(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0111783
(43) 공개일자 2024년07월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07K 16/28 (2006.01) *A61K 39/00* (2006.01)
A61P 35/00 (2006.01) *C07K 16/46* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07K 16/2878 (2013.01)
A61P 35/00 (2018.01)
(21) 출원번호 10-2024-7020460
(22) 출원일자(국제) 2022년11월21일
심사청구일자 없음
(85) 번역문제출일자 2024년06월19일
(86) 국제출원번호 PCT/IB2022/061241
(87) 국제공개번호 WO 2023/089587
국제공개일자 2023년05월25일
(30) 우선권주장
63/281,954 2021년11월22일 미국(US)
(뒷면에 계속)

(71) 출원인
얀센 바이오테크 인코포레이티드
미국 펜실베이니아주 19044 호샴 릿지뷰 드라이브 800/850
(72) 발명자
다이엠, 마이클
미국 펜실베니아 19335 맬번 그렛 밸리 로드 200
후앙, 치치
미국 펜실베니아 19355 맬번 그렛 밸리 로드 200
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인한성

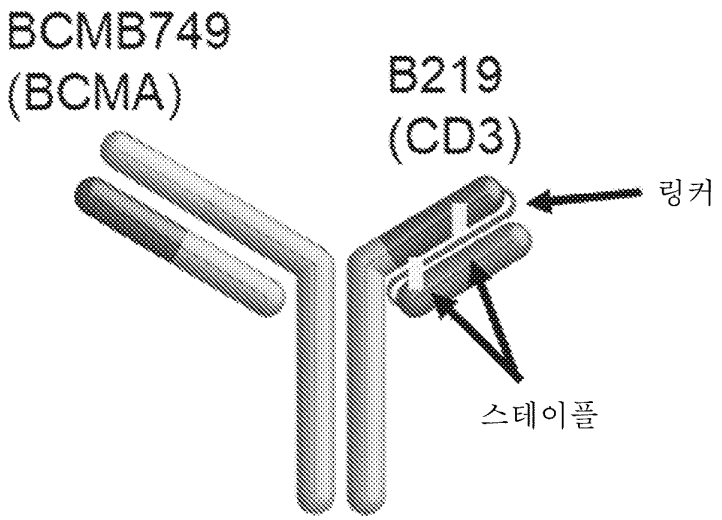
전체 청구항 수 : 총 36 항

(54) 발명의 명칭 **면역 반응을 위한 강화된 다중특이성 결합제를 포함하는 조성물**

(57) 요 약

특정 측면에서, 개선된 단일쇄 가변 단편을 포함하는 분자를 위한 재료 및 방법이 본 명세서에 개시된다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
C07K 16/2809 (2013.01)
C07K 16/468 (2013.01)
A61K 2039/505 (2013.01)
C07K 2317/31 (2013.01)
C07K 2317/55 (2013.01)
C07K 2317/622 (2013.01)
C07K 2317/624 (2013.01)
C07K 2317/64 (2013.01)

(72) 발명자
루오, 진큐안
미국 펜실베니아 19044 호샴 릿지뷰 드라이브 800/850
테플리아코브, 알렉시
미국 펜실베니아 19044 호샴 릿지뷰 드라이브 800/850
보처, 로렌
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피오 박스 300 920 유에스 루트 202
펠드캄프, 마이클
미국 펜실베니아 08869 라리탄 피오 박스 300 920 유에스 루트 202
암스트롱, 안토니
미국 펜실베니아 08869 라리탄 피오 박스 300 920 유에스 루트 202
난다, 히르시
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202
마한, 앤드류 데이비드
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202
구나워데나, 하르샤 프리트비라즈
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202
초우두리, 파르타
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202
폴타쉬, 마이클 로렌스
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202
프린슬로우, 엘리자베스 가이어
미국 뉴 저지 08869 라리탄 피.오. 박스 300 920 유에스 루트 202

(30) 우선권주장
63/322,158 2022년03월21일 미국(US)
63/393,750 2022년07월29일 미국(US)

명 세 서

청구범위

청구항 1

항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하는 분자로서, 상기 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, 상기 scFv는

a) 시스테인(Cys)으로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

b) Cys로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하는 분자.

청구항 2

제1항에 있어서, 다이설파이드 결합이 없는 비교가능한 분자와 비교하여, 향상된 안정성, 발현 수율 및/또는 품질을 갖는 분자.

청구항 3

제1 항원에 결합하는 Fab, 제2 항원에 결합하는 scFv 및 Fc 영역을 포함하는 분자로서, 상기 scFv는 상기 scFv를 안정화시키는 수단을 포함하는 분자.

청구항 4

제3항에 있어서, 상기 scFv는 VH, L 및 VL을 포함하고, 상기 scFv를 안정화시키는 수단은

a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하는 분자.

청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서,

a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 분자.

청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 VH Cys와 상기 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 분자.

청구항 7

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 있어서,

a) 상기 VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하고/하거나;

b) 상기 VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며,

여기서 잔기 넘버링은 초티아(Chothia)에 따르는 분자.

청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 있어서,

a) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

b) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

c) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

d) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

e) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

f) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

g) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

h) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

i) 상기 VH Cys는 H3에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

j) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

k) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

l) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

m) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

n) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

o) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

p) 상기 VH Cys는 H5에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

q) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

r) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

s) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

t) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

u) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

v) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

w) 상기 VH Cys는 H40에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

x) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

y) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

z) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

aa) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

bb) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

cc) 상기 VH Cys는 H43에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

dd) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

ee) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

ff) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

gg) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L42에 존재하거나;

hh) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

ii) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

jj) 상기 VH Cys는 H46에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

kk) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L3에 존재하거나;

ll) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L5에 존재하거나;

mm) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L39에 존재하거나;

nn) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L45에 존재하거나;

oo) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L100에 존재하거나;

pp) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L102에 존재하거나;

qq) 상기 VH Cys는 H105에 존재하고, 상기 VL Cys는 L43에 존재하며,

여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 분자.

청구항 9

제1항 내지 제8항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하며;

임의로 상기 Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되고, 임의로 상기 Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되며;

임의로 상기 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 분자.

청구항 10

제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 L은

a) 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23) - 여기서, X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수임 -;

b) 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24) - 여기서, X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수임 -,

임의로 상기 L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함함;

c) 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25) - 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수임 -;

d) 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26) - 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수임 -; 또는

e) 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27) - 여기서, X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수임 -을 포함하는 분자.

청구항 11

제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이를 가지며, 임의로 상기 L은 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는 분자.

청구항 12

제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

청구항 13

제1항 내지 제12항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

청구항 14

제1항 내지 제12항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

청구항 15

제1항 내지 제13항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) (a) 상기 VH는 H105의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L42의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(ii) (a) 상기 VH는 H105의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L45의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(iii) (a) 상기 VH는 H105의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L39의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(iv) (a) 상기 VH는 H5의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L42의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(v) (a) 상기 VH는 H5의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L45의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(vi) (a) 상기 VH는 H5의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L39의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(vii) (a) 상기 VH는 H3의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L42의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(viii) (a) 상기 VH는 H3의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L45의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하거나;

(ix) (a) 상기 VH는 H3의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L39의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

청구항 16

제1항 내지 제12항 및 제14항 중 어느 한 항에 있어서,

(i) (a) 상기 VH는 H43의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L100의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(ii) (a) 상기 VH는 H43의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L102의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(iii) (a) 상기 VH는 H43의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L5의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(iv) (a) 상기 VH는 H43의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L3의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(v) (a) 상기 VH는 H40의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L100의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(vi) (a) 상기 VH는 H40의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L102의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(vii) (a) 상기 VH는 H40의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L5의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(viii) (a) 상기 VH는 H40의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L3의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(ix) (a) 상기 VH는 H46의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L100의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(x) (a) 상기 VH는 H46의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L102의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(xi) (a) 상기 VH는 H46의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L5의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하거나;

(xii) (a) 상기 VH는 H46의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L3의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

청구항 17

제15항 또는 제16항에 있어서, 상기 L은 서열 번호 3, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

청구항 18

제1항 내지 제17항 중 어느 한 항에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 분자.

청구항 19

제1항 내지 제18항 중 어느 한 항에 있어서, 상기 Fab는 종양 항원에 결합하고, 상기 scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 상기 종양 항원은 BCMA이고, 상기 T 세포 항원은 CD3인 분자.

청구항 20

제19항에 있어서, 상기 scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

청구항 21

제19항 또는 제20항에 있어서, 상기 Fab는 (i) 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL; 또는 (ii) 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 분자.

청구항 22

제21항에 있어서, (a) 상기 VH는 H105의 Cys를 포함하고; (b) 상기 VL은 L43의 Cys를 포함하며; (c) 상기 L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; (d) 상기 scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

청구항 23

제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자 또는 이의 단편을 인코딩하는 폴리뉴클레오티드.

청구항 24

제23항의 폴리뉴클레오티드를 포함하는 벡터.

청구항 25

제24항의 벡터를 포함하는 숙주 세포로서, 임의로 원핵 세포 또는 진핵 세포인 숙주 세포.

청구항 26

a) 제23항의 폴리뉴클레오티드를 숙주 세포에 도입하는 단계;

b) 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 숙주 세포를 배양하는 단계; 및

c) 생성된 분자를 정제하는 단계를 포함하는, 분자를 생성하는 방법.

청구항 27

a) 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 제25항의 숙주 세포를 배양하는 단계, 및

b) 생성된 분자를 정제하는 단계를 포함하는, 분자를 생성하는 방법.

청구항 28

제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자를 포함하며, 임의로 약제학적으로 허용가능한 부형제를 추가로 포함하는 약제학적 조성물인 조성물.

청구항 29

표적 세포를 제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자와 접촉시키는 단계를 포함하며, 임의로 Fab는 표적 세포 상의 제1 항원에 결합하고, scFv는 세포 상의 제2 항원에 결합하는, 세포를 표적 세포로 유도하거나 결합시키는

방법.

청구항 30

제29항에 있어서, 상기 세포는 면역 세포이고, 임의로 상기 면역 세포는 T 세포인 방법.

청구항 31

제29항 또는 제30항에 있어서, 상기 표적 세포는 종양 세포이고/이거나, 대상의 질환 또는 장애를 치료하기 위한 방법으로서, 임의로 a) 상기 질환 또는 장애는 종양이고, 임의로 상기 종양은 암이고/이거나; b) 상기 대상은 인간 대상인 방법.

청구항 32

제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자를 생성하는 수단.

청구항 33

표적 세포를 제거하거나 억제시키는 방법으로서, 상기 표적 세포를 제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자와 접촉시키는 단계를 포함하는 방법.

청구항 34

대상의 질환 또는 장애를 치료하는 방법으로서, 제1항 내지 제22항 중 어느 한 항의 분자 또는 제28항의 조성물을 상기 대상에게 투여하는 단계를 포함하는 방법.

청구항 35

제1항 내지 제22항 중 어느 한 항에 있어서, 의약으로 사용하기 위한 분자.

청구항 36

제1항 내지 제22항 중 어느 한 항에 있어서, 질환 또는 장애를 치료하는데 사용하기 위한 분자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 관련 출원의 상호 참조

[0002] 본 출원은 2021년 11월 22일자로 출원된 미국 특허 출원 제63/281,954호, 2022년 3월 21일자로 출원된 미국 특허 출원 제63/322,158호 및 2022년 7월 29일자로 출원된 미국 특허 출원 제63/393,750호의 이익을 주장하며, 이들 각각의 내용은 전체적으로 본 명세서에 참고로 포함된다.

[0003] 서열 목록

[0004] 본 출원은 본 출원과 함께 XML 파일 형식으로 제출된 컴퓨터 판독 가능 서열목록을 포함하며, 그 전체 내용이 전체적으로 본 명세서에 참고로 포함된다. 본 출원과 함께 제출된 서열목록 XML 파일은 제목이 "14620-710-228_SEQ_LISTING.xml"이고, 2022년 11월 18일자로 작성되었으며, 크기가 94,758 바이트이다.

[0005] 기술분야

[0006] 다양한 측면에서, 개선된 단일쇄 가변 단편 및 이의 등가물을 포함하는 다중특이성 분자를 제조하고 사용하는 물질 및 방법이 본원에 개시된다.

발명의 내용

[0007] 한 측면에서, 본 발명은 표적에 결합할 수 있는 분자(예를 들어, 결합 분자)에 대한 물질 및 방법을 제공한다. 한 측면에서, 분자는 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하며, 여기서 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는

[0008] a) 시스테인(Cys)으로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[0009] b) Cys로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[0010] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 1개의 다이설파이드 결합 또는 2개의 다이설파이드 결합이 없는, 예를 들어 제1 다이설파이드 결합 및 제2 다이설파이드 결합이 없는 비교가능한 분자와 비교하여, 안정성, 발현 수율 및/또는 품질이 개선된다.

[0011] 일부 실시 형태에서, a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있다.

[0012] 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å이다.

[0013] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아(Chothia)에 따른다.

[0014] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0015] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0016] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0017] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0018] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0019] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0020] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0021] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0022] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0023] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0024] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0025] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0026] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0027] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0028] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0029] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0030] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0031] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0032] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0033] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0034] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0035] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0036] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0037] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0038] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0039] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0040] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0041] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0042] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0043] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0044] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0045] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0046] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0047] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0048] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0049] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0050] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0051] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0052] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0053] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0054] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0055] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0056] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0057] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며,

[0058] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0059] 일부 실시 형태에서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다.

[0060] 일부 실시 형태에서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입이다.

[0061] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0062] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0063] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함한다.

[0064] 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아

미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0065] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0066] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0067] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; 여기서, X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0068] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0069] 일부 실시 형태에서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0070] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0071] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0072] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0073] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0074] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0075] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0076] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0077] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0078] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0079] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으

로 존재한다.

[0080] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0081] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0082] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0083] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0084] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0085] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고;VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0086] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0087] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0088] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0089] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0090] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0091] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0092] 일부 실시 형태에서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하며, 여기서 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하고; 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하며; 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성한다.

[0093] 일부 실시 형태에서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3이다.

[0094] 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함한다.

[0095] 일부 실시 형태에서, Fab는 (i) 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL; 또는 (ii) 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열

을 포함하는 VL을 포함한다.

[0096] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L43의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0097] 한 측면에서, 본 발명은 제1 항원에 결합하는 항원 결합 단편(Fab), 제2 항원에 결합하는 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하는 분자로서, 상기 scFv는 scFv를 안정화시키는 수단을 포함하는 분자를 제공한다.

[0098] 일부 실시 형태에서, scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하며, 여기서 scFv를 안정화시키는 수단은 a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는 c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함한다.

[0099] 일부 실시 형태에서, a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있다.

[0100] 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å이다.

[0101] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하고/하거나, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0102] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0103] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0104] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0105] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0106] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0107] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0108] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0109] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0110] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0111] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0112] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0113] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0114] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0115] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0116] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0117] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0118] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0119] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0120] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0121] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0122] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0123] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0124] VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0125] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0126] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0127] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0128] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0129] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0130] VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0131] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0132] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0133] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0134] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0135] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0136] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0137] VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0138] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0139] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0140] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0141] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0142] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0143] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나,

[0144] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며,

[0145] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0146] 일부 실시 형태에서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다.

[0147] 일부 실시 형태에서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입이다.

[0148] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0149] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0150] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열

번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함한다.

[0151] 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0152] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0153] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0154] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0155] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0156] 일부 실시 형태에서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0157] 일부 실시 형태에서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0158] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0159] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0160] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0161] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0162] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0163] 일부 실시 형태에서, VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0164] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0165] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0166] 일부 실시 형태에서, VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0167] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0168] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0169] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0170] 일부 실시 형태에서, VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0171] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0172] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0173] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0174] 일부 실시 형태에서, VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0175] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0176] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0177] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0178] 일부 실시 형태에서, VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0179] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0180] 일부 실시 형태에서, 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하며, 여기서 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하고; 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하며; 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성한다.

[0181] 일부 실시 형태에서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3이다.

[0182] 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함한다.

[0183] 일부 실시 형태에서, Fab는 (i) 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL; 또는 (ii) 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함한다.

[0184] 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L43의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0185] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 분자 또는 이의 단편, 또는 이의 폴리펩티드를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드를 제공한다.

[0186] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 폴리뉴클레오티드를 포함하는 벡터를 제공한다.

[0187] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 벡터를 포함하는 숙주 세포를 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 숙주 세포는 원핵 세포이다. 일부 실시 형태에서, 상기 숙주 세포는 진핵 세포이다.

[0188] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 분자를 생성하는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 본 명세서에 개시된 숙주 세포를 배양하는 단계 및 생성된 분자를 정제하는 단계를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 본 명세서에 개시된 폴리뉴클레오티드를 숙주 세포에 도입하는 단계; 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 숙주 세포를 배양하는 단계 및 생성된 분자를 정제하는 단계를 포함한다.

[0189] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 분자를 포함하는 조성물을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 조성물은 약제학적으로 허용가능한 부형제를 추가로 포함하는 약제학적 조성물이다.

[0190] 한 측면에서, 본 발명은 본 명세서에 개시된 분자를 생성하는 수단을 제공한다.

[0191] 한 측면에서, 본 발명은 세포를 표적 세포로 유도하거나 결합시키는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 표적 세포를 본 명세서에 개시된 분자와 접촉시키는 단계를 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab는 표적 세포 상의 제1 항원에 결합하고, scFv는 세포 상의 제2 항원에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 세포는 면역 세포이다. 일부 실시 형태에서, 면역 세포는 T 세포이다. 일부 실시 형태에서, 표적 세포는 종양 세포이다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 대상의 질환 또는 장애를 치료하기 위한 것이다. 일부 실시 형태에서, 상기 질환 또는 장애는 종양이다. 일부 실시 형태에서, 상기 질환 또는 장애는 암이다. 일부 실시 형태에서, 상기 대상은 인간 대상이다.

[0192] 한 측면에서, 본 발명은 표적 세포를 제거하거나 억제하는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 표적 세포를 본 명세서에 개시된 분자와 접촉시키는 단계를 포함한다.

[0193] 한 측면에서, 본 발명은 대상의 질환 또는 장애를 치료하는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 본 명세서에 개시된 분자를 대상에게 투여하는 것을 포함한다.

[0194] 한 측면에서, 본 발명은 의약으로서 사용하기 위한 본 명세서에 개시된 분자를 제공한다. 한 측면에서, 본 발명은 질환 또는 장애를 치료하는데 사용하기 위한 분자를 제공한다.

도면의 간단한 설명

[0195] **도 1**은 안정화된 이중특이성 BCMA/CD3 항체의 예시적인 설계를 나타낸다. 이중특이성 항체의 CD3 scFv는 유연한 링커에 의해 연결되고, 링커는 링커의 스테이플 서열과 앵커 포인트 사이의 다이설파이드 결합을 통해 scFv(spFv)에 안정화된다.

도 2a 및 **도 2b**는 스테이플링에 의한 Cris7a/b 도메인의 개선된 열안정성을 나타낸다. **도 2a**: Cris7a scFv, Cris7a spFv, Cris7b scFv 및 Cris7b spFv에 대한 DSC 서모그램의 오버레이. 분석에서 얻은 단백질 설계 및 엔탈피 특징과 관련된 파라미터는 **표 12** 및 **표 14**에 기재되어 있다. **도 2b**: LH 배향의 Cris7a/Cris7b의 scFv 및 spFv 단백질의 SDS-PAGE.

도 3a 내지 **도 3d**는 이중특이성 분자를 포함하는 Cris7b의 크기 배제 크로마토그래피를 나타낸다.

도 4a 내지 **도 4d**는 이중특이성 분자를 포함하는 CD3B219의 크기 배제 크로마토그래피를 나타낸다.

도 5는 CD3/BCMA 이중특이성 분자의 열 안정성을 나타낸다.

도 6은 CD3/BCMA 이중특이성 분자의 세포독성을 나타낸다. CD3/BCMA 이중특이성 분자는 $BCMA^{+}$ $H929^{-}$ GFP^{+} 세포를 사멸시켰음.

도 7은 CD3/BCMA 이중특이성 분자에 의한 $CD4^{+}/CD25^{+}$ 이펙터 세포의 활성화를 나타낸다.

도 8은 CD3/BCMA 이중특이성 분자에 의한 $CD8^{+}/CD25^{+}$ 이펙터 세포의 활성화를 나타낸다.

도 9는 spFv 이중특이성 분자에 의한 단백질 수율을 나타낸다.

도 10은 spFv 이중특이성 분자의 응집 저항성을 나타낸다.

도 11은 scFv 이중특이성 분자 및 spFv 이중특이성 분자의 유사한 CD3 결합 친화도를 나타낸다.

도 12는 scFv 이중특이성 분자 및 spFv 이중특이성 분자의 유사한 CD3 매개 사멸 특성을 나타낸다.

도 13a 내지 **도 13e**는 scFv의 스테이플링을 나타낸다. **도 13a**: 낮은 안정성을 개선하고, 호흡 매개 응집을 최소화하는 scFv 스테이플링. **도 13b**: HL 구성을 예로 사용한 "스테이플링" 체계의 카툰 개략도. 유사한 체계가 LH 구축물에 유효하다. 점선은 선행(leading) 가변 영역의 C 말단과 스테이플링 "CPPC" 모티프를 연결하는 유연한 링커를 나타내고, 두 번째 점선은 후행(trailing) 가변 영역의 N 말단에 연결되었다. 링커 중간에 "CPPC"라고 표시된 세그먼트는 IgG1 힌지에서 자연적으로 발생하는 "스테이플"의 가능한 디자인 중 하나를 나타내었다. VH 및 VL에서 Cys 잔기로 돌연변이된 앵커 포인트("$C(AP_L)$" 및 "$C(AP_H)$"로 표시됨)는 스틱으로 표시된다. 스테이플 Cys 잔기와 앵커 포인트 사이의 짧은 선은 스테이플링 다이설파이드 결합 형성을 나타낸다. **도 13c**: 생식계열 인간 항체(PDB ID 5I19, GLk1)의 Fv에 매핑된 앵커 포인트 선택 기하학 고려 사항(HL 구성)의 그래픽 그림. Cter: 선행 도메인의 C 말단; Nter: 후행 도메인의 N 말단; APH: 선행 도메인의 앵커 위치; APL: 후행 도메인의 앵커 위치; dAP: APH와 APH 사이의 거리; d1-d4: 도면에 정의된 다양한 거리. LH 배향(도시되지 않음)에 대해서도 유사한 도면을 그릴 수 있다. HL 배향에 대한 앵커 포인트는 VH의 경우 초티아 위치 43(H43C), VL의 경우 초티아 위치 100(L100C)이며; LH에 대해서는, VL의 경우 초티아 위치 42(L42C), VH의 경우 초티아 위치 105(H105C)이다. **도 13d** 및 **도 13e**: 인간 IgG (PDB 5DK3) 힌지 CPPC(**도 13d**) 및 마우스 IgG2a (PDB 1IGT) 힌지 CPPC(**도 13e**) 내의 두 Cys 잔기 사이의 Cβ(Cys1)-Cβ(Cys2) 거리; 이들 힌지 Cβ(Cys1)-Cβ(Cys2) 거리는 약 7 Å 내지 약 9 Å의 범위이다.

도 14a 내지 **도 14g**는 다양한 scFv/spFv 도메인의 구조 및 비교를 나타낸다. **도 14a**: GLk1 spFv LH. **도 14b**: GLk1 spFv HL. **도 14c**: GLk2 spFv HL. **도 14d**: Glk2 spFv HL의 앵커 포인트에 대한 스테이플 모티프 CPPC 및 SS의 2mFo-dFc 전자 밀도(1.5σ로 윤곽 표시). 원형은 스테이플링 다이설파이드 밀도를 나타낸다. **도 14e**: CAT2200b spFv HL. **도 14f**: IL-17에 결합된 CAT2200a scFv LH와 비교한 비결합 CAT2200b spFv HLL. **도 14g**: IL-17에 결합된 CAT2200a spFv LH와 비교한 비결합 CAT2200b spFv HL의 전면도 및 후면도.

도 15는 5개의 spFv 구조의 스테이플 및 링커 형태를 나타낸다. CPPC 모티프는 명확성을 위해 Cys1, Pro1, Pro2, Cys2로 다시 표지되었다. 구조가 CPPC 모티프의 주쇄에 중첩되어 있다. 점선은 Cys1 잔기와 Cys2 잔기 사이의 Cα-Cα 및 Cβ-Cβ 거리를 나타낸다. 링커 스테이플 Cys 잔기의 모든 카피에서 관찰된 Cβ-Cβ 거리의 범위가 표시된다. N 말단은 'Nter'로, C 말단은 'Cter'로 표시된다.

도 16a 내지 **도 16d**는 spFv 이중특이성 분자의 스테이플링된 링커에서 개선된 수율, 제품 품질 및 예상되는 다이설파이드 형성을 나타낸다. **도 16a**: BCMA (Fab) × CD3 (scFv/spFv) 이중특이성 분자 구조의 개략도. Fc 영역의 HK는 Fc 헤테로이량체화에 대한 노브 인 홀(K, 노브; H, 홀) 돌연변이를 나타낸다. 단백질 A가 RF 포함 사슬 단량체 또는 호모이량체에 결합하는 것을 방지하기 위해 정제를 위한 Fab 포함 사슬의 RF (H435R 및 Y436F) 돌연변이. **도 16b**: BCMB749를 갖는 scFv/spFv Cris7b 포함 분자의 CH1 후의 SEC 프로파일은 scFv 단백질에는 올리고머 종(O로 표시)이 존재하지만 spFv 단백질(단량체, M)에는 존재하지 않음을 나타낸다. **도 16c**: 스테이플링된 이중특이성 분자의 예상되는 다이설파이드의 개략도. 모든 Cys 잔기는 각각의 폴리펩티드 사슬의 순차적 위치/번호로 표시된다. 예상되는 다이설파이드 결합은 이를 연결하는 선으로 표시된다. 점선은 단일 사슬 Fv의 스테이플링된 영역에 있는 추가의 다이설파이드 결합을 나타낸다. 사슬 간 다이설파이드 결합은 실

선 이중선으로 나타낸다. **도 16d**: LysC-ProAlanase 비환원성 분해된 이중특이성 분자의 총 이온 전류(TIC). 표지된 크로마토그래프 피크는 완전 절단된 다이설파이드 펩티드이다. TIC의 다른 피크는 예상되는 다이설파이드 펩티드의 비특이적으로 소화된 단백질을 나타낸다. 별표가 있는 다이설파이드 결합은 **도 25** 및 **도 26**에 주어진 XIC/MS1/MS2 데이터를 갖는 대표적인 종이다.

도 17a 내지 **도 17d**는 Cris7b 포함 spFv 이중특이성 분자의 CD3에 대한 안정성 및 유지된 결합 친화도를 나타낸다. **도 17a**: BCMB749를 갖는 Cris7b 포함 scFv/spFv 이중특이성 분자의 NanoDSF 추적은 스테이플링 돌연변이의 통합으로 보다 높은 Tm으로의 약 10℃ 전이를 나타내었다. **도 17b** 및 **도 17c**: Cris7b spFv 이중특이성 분자는 열 유도된 응집에 저항성을 나타내었다. SEC 추적(**도 17b**) 및 응집체 레벨의 정량화(**도 17c**)는 Cris7b 포함 spFv 이중특이성 분자가 4℃ 또는 40℃에서 6주 기간에 걸쳐 열 유도된 응집의 극적인 감소를 나타내는 것을 보여주었다. **도 17d**: BLI 결합 추적은 재조합 CD3에 대한 결합과 관련하여 유사한 결합 특징(예를 들어, 결합 및 해리)을 나타내었다. 연한 회색: Cris7b spFv; 짙은 회색: Cris7b scFv Bird; 점선: Cris7b G4S.

도 18a 내지 **도 18c**는 spFv 이중특이성 분자와 이의 스테이플링되지 않은 대응물 사이의 유사한 기능을 나타낸다. **도 18a**: spFv 이중특이성 분자는 $BCMA^+$ 암세포의 강력한 사멸 활성을 나타내었다. **도 18b** 및 **도 18c**: scFv/spFv 이중특이성 분자는 유사한 효능으로 $CD4^+/CD25^+$(**도 18b**) 및 $CD8^+/CD25^+$(**도 18c**) T 세포를 활성화시켰다. 널 대조군은 사멸 또는 T 세포 활성화 활성을 나타내지 않았다.

도 19a 및 **도 19b**는 VL 및 VH 서열에서의 앵커 포인트 선택을 예시한다. **도 19a**: VL(서열 번호 144)과 VH(서열 번호 144) 사이의 제안된 링커. 가변 아미노산 잔기(aa) 수는 유연성을 제공하고 적절한 링커-앵커 다이설파이드 형성을 허용하지만 다이설파이드 스크램블링을 허용하기에 충분히 길지 않다. **도 19b**: VL 및 VH 서열은 초티아 넘버링 체계(초티아 및 레스크(Lesk) 1987)에 따라 넘버링되며, 상기 서열을 나타내었다. 앵커 포인트는 선택한 위치 아래에 숫자(1 또는 2)와 쌍으로 강조 표시된다. 아래에 동일한 강조 표시와 숫자가 있는 VL 및 VH의 두 위치는 특정 spFv 작제물의 앵커 포인트로 사용되는 한 쌍의 위치를 나타낸다. 쌍 1과 2는 각각, LH 및 HL 작제물에 대한 것이다. HL 배향에 대한 앵커 포인트는 VH의 경우 초티아 위치 43(H43C), VL의 경우 초티아 위치 100(L100C)이며; LH에 대해서는, VL의 경우 초티아 위치 42(L42C), VH의 경우 초티아 위치 105(H105C)이다. Glk1 VL(서열 번호 56); Glk1 VH(서열 번호 60); Glk2 VL(서열 번호 145); Glk2 VH(서열 번호 146); CAT2200 VL(서열 번호 147); CAT2200a VH(서열 번호 148).

도 20a 내지 **도 20e**는 다이설파이드 결합 배치(**도 20a**), 및 스테이플링을 위한 앵커 포인트 사이(**도 20b** 및 **도 20c**) 및 직접 사슬간 다이설파이드 결합 위치 사이(**도 20d** 및 **도 20e**)의 Cα-Cα 및 Cβ-Cβ 거리 분포를 나타낸다. DS1: 초티아 위치 L43과 H105 사이의 다이설파이드 결합; DS2: L100 및 H44. (**도 20a**) 형성된 다이설파이드 결합의 Cα-Cα 및 Cβ-Cβ 거리의 위치를 설명하는 카툰. Cα 잔기와 Cβ 잔기 사이의 상대 거리는 다이설파이드 결합 형성 효율에 큰 영향을 미쳤다. **도 20b** 내지 **도 20e**의 거리 분포를 평가함에 있어서, 앵커 위치의 2개의 Cys 잔기는 거리, 특히 Cβ-Cβ가 SS 결합을 형성하는 위치에 전형적인 것보다 훨씬 더 길기 때문에, 다이설파이드 결합을 직접 형성할 가능성은 낮다. VL/VH간 다이설파이드 결합(DS1 및 DS2, **도 20d** 및 **도 20e**)의 경우, 대부분의 VL/VH 쌍은 전형적인 SS 결합 배치보다 훨씬 더 넓은 Cβ-Cβ 거리를 가지며, 이는 직접적인 SS 결합이 종종 형성되지 않거나 안정성이 개선되지 않는 구조적 이유일 가능성이 높다. 인간화를 포함한 인간의 PDB(rcsb.org) 및 2.5 Å 이상의 분해능을 갖는 뮤린 기원의 모든 항체 Fab 및 scFv 결정 구조가 거리 계산에 포함되었다. 이러한 구조의 모든 VL/VH 쌍이 포함되었다. 비대칭 단위의 다수의 카피는 독립적인 것으로 처리되었다. 구조에서 Gly가 있는 위치의 경우, 에너지 최소화 없이 Gly 잔기를 Ala로 돌연변이시켜, 추정된 Cβ 위치의 좌표를 제공하였다. 총 2501개의 Fv 구조가 거리 계산에 포함되었다. 모든 계산은 MOE(CCG, 몬트리올)에서 CCG 기술 지원의 사용자 지정 스크립트를 사용하여 수행되었으며, 여기에서 지원을 받은 것으로 인정된다. (**도 20a** 및 **도 20b**), 각각, LH 및 HL 스테이플링을 위해 선택된 두 앵커 위치에 대한 Cα-Cα 및 Cβ-Cβ 거리. (**도 20c** 및 **도 20d**) 각각, 알려진 항체 구조의 DS1 및 DS2에 대한 Cα-Cα 및 Cβ-Cβ 거리. 단백질 다이설파이드 결합에 대한 Cα 및 Cβ 거리는 문헌[Dani *et al.* (2003) *Protein Eng.* 16(3):187-193]에서 가져온 것이다.

도 21a 내지 **도 21c**는 말단 배치에 대한 스테이플링 앵커를 나타낸다. **도 21a**: 거리의 개략도. Nter: N 말단; Cter: C 말단; **d**: VL 앵커 포인트와 VH 앵커 포인트 사이의 거리; d1-d4: **d1**: 도메인 1의 선행 세그먼트; 도메인 1(VH, 카툰)의 C 말단에서 도메인 1(VH, 카툰)의 Cys 앵커 잔기까지의 거리, **d2**: 도메인 1(VH, 카툰)의 C 말단에서 도메인 2(VL, 카툰)의 Cys 앵커 잔기까지의 거리, **d3**: 도메인 2의 대응 후행 세그먼트; 도메인 2(VL, 카툰)의 N 말단에서 도메인 2(VL, 카툰)의 Cys 앵커 잔기까지의 거리, **d4**: 도메인 2(VL, 카툰)의 N 말단에서 도메

인 1(VH, 카툰)의 Cys 앵커 잔기까지의 거리. **도 21b** 및 **도 21c**: LH 및 HL 구성에 대한 도 S2에서와 동일한 Fv 단편 세트에 대한 거리 분포. 방법은 **도 20**에 제공된 것과 동일하였다.

도 22는 Glk2 spFv HL 구조의 후행 VL 도메인의 E1과 후행 링커 세그먼트의 골격 사이의 H 결합을 나타낸다.

도 23은 BCMB749의 인간화 및 서열 정렬을 나타낸다. 각각의 서열 정렬은 모(위), 선택된 인간 수용체 생식세포계열 서열(가운데) 및 이탤릭체로 된 복귀 돌연변이가 이식된 CDR(아래)을 포함한다. CDR은 밑줄이 그어져 있다. 볼드체: 프레임워크 영역의 CDR 지원 위치. 박스형: VL/VH 인터페이스 잔기. BCMB749_VL(서열 번호 129); BCMB749_VH(서열 번호 132); huKV1-12*01(서열 번호 149); huHV1-3*01(서열 번호 150); BCMB749h_VL(서열 번호 135); BCMB749h_VH(서열 번호 137).

도 24는 정제 후 scFv(왼쪽) 또는 spFv(오른쪽) 아암을 갖는 소규모로 생산된 CD3 포함 이중특이성 샘플의 제품 품질을 비교하는 분석적 SEC 추적을 나타낸다. 위쪽 플롯은 Cris7b 변이체를 포함하는 이중특이성 분자를 표시하고; 아래쪽 플롯은 대체 항 CD3 결합 변이체를 포함하는 이중특이성 분자를 표시한다. 왼쪽의 플롯은 뮤린 항 BCMA Fab 아암을 포함하고; 오른쪽의 플롯은 인간화 항 BCMA Fab 아암을 포함한다.

도 25a 내지 **도 25c**는 Byos의 다이설파이드의 질량 분석 매핑을 나타낸다. **도 25a**: LysC 및 ProAlanase 분해 후 모든 다이설파이드 결합 다이펩티드 종에 대한 계산 및 관찰된 질량 결과. **도 25b**: Fc 다이설파이드 262-322. **도 25c**: spFv 다이설파이드 119-237. **도 25b** 및 **도 25c**: (상부 왼쪽 패널) 예상 질량의 MS1은 계산된 다이설파이드 종의 2 ppm 이내이고; (상부 오른쪽 패널) 예상 다이설파이드의 체류 시간을 나타내는 추출 이온 크로마토그램(XIC). 회수된 펩티드의 신호는 중간 범위에 있었다. (하부 패널) 다이설파이드의 두 펩티드에 대한 MS/MS 커버리지.

도 26a 내지 **도 26c**는 스테이플링에 의한 항체 결합에 영향을 미치지 않음을 나타낸다. **도 26a**: 재조합 CD3에 대한 ELISA 적정은 scFv 또는 spFv 아암의 존재와는 관계없이, 항원에 대한 유사한 결합을 보여주었는데, 이는 스테이플링 돌연변이가 항원 결합을 방해하지 않음을 나타낸다. **도 26b**: 재조합 BCMA에 대한 ELISA 적정은 scFv 또는 spFv 아암의 존재와는 관계없이, 항원에 대한 유사한 결합을 보여주었는데, 이는 스테이플링 돌연변이가 파트너 아암의 결합에 영향을 미치지 않는다는 것을 뒷받침한다. **도 26c**: 한 쌍의 이중특이성 분자(Cris7b scFv bird 링커 × BCMA, 왼쪽; Cris7b spFv × BCMA, 오른쪽)에 대한 BLI 결합 추적은 scFv 또는 spFv 아암의 존재와는 관계없이, BCMA에 대한 유사한 결합을 보여주었다.

도 27은 scFv/spFv 이중특이성 및 삼중특이성의 생물물리학적 특성의 비교를 나타낸다. BsAb: 이중특이성 항체; TsAb: 삼중특이성 항체, 여기서 1과 2는 표적 1과 2를 나타낸다. sc/sp는 단일 사슬 부분에 대한 포맷(scFv/spFv)을 나타낸다. SPR에 의한 모든 친화도 값. *세포 결합 EC50. scFv/spFv 부분에 대한 값만 주어진다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0196] 개시된 방법 및 분자는 본 발명의 일부를 형성하는 첨부 도면과 관련하여 취해진 하기 상세한 설명을 참조하여 더욱 쉽게 이해될 수 있다. 본 개시된 방법 및 분자는 본 명세서에 기재되고/되거나 도시된 구체적인 방법 및 분자로 제한되지 않으며, 본 명세서에 사용된 용어는 특정 실시 형태를 단지 예로서 기술하기 위한 것이고 제한하려는 의도가 아님을 이해하여야 한다.

[0197] 본 명세서에 인용된 모든 특허, 공개된 특허 출원 및 간행물은 마치 본 명세서에 완전히 기재되어 있는 것처럼 참고로 포함된다.

[0198] 달리 언급되지 않는 한, 목록이 제시되는 경우, 그러한 목록의 각각의 개별 요소, 및 그러한 목록의 하나하나의 모든 조합은 별개의 실시 형태임이 이해되어야 한다. 예를 들어, "A, B 또는 C"로 표현된 실시 형태의 목록은 실시 형태 "A", "B", "C", "A 또는 B", "A 또는 C", "B 또는 C" 또는 "A, B 또는 C"를 포함하는 것으로 해석되어야 한다.

[0199] 본 명세서 및 첨부된 청구범위에 사용된 단수형태의 표현은, 문맥상 달리 명백하게 지시되지 않는 한, 복수의 언급대상을 포함한다. 따라서, 예를 들어, "세포"에 대한 언급은 2개 이상의 세포의 조합 등을 포함한다.

[0200] "포함하는", "본질적으로 ~로 이루어진" 및 "~로 이루어진"이라는 전환어구는, 특허 용어에서 일반적으로 허용되는 의미를 내포하는 것으로 의도되며; 즉, (i) "구비하는", "함유하는", 또는 "특징으로 하는"과 동의어인 "포함하는"은 포괄적 또는 개방형(open-ended)이고 추가의 언급되지 않은 요소 또는 방법 단계를 배제하지 않으

며; (ii) "~로 이루어진"은 청구범위에 명시되지 않은 임의의 요소, 단계, 또는 성분을 배제하고; (iii) "~로 본질적으로 이루어진"은 명시된 재료 또는 단계, 및 청구된 발명의 "기본적이고 신규한 특성(들)에 실질적으로 영향을 주지 않는 것들"로 청구범위의 범주를 제한한다. 어구 "포함하는"(또는 이의 등가적 표현)의 관점에서 기재된 실시 형태는 또한 "~로 이루어진" 및 "~로 본질적으로 이루어진"의 관점에서 독립적으로 기재된 것들을 실시 형태로서 제공한다.

[0201] "약"은 당업자에 의해 결정된 바와 같이 특정 값에 대한 허용가능한 오차 범위 내에 있음을 의미하며, 이는 그 값이 측정되거나 결정되는 방법, 즉, 측정 시스템의 제한사항에 부분적으로 좌우될 것이다. 특정 검정, 결과 또는 실시 형태와 관련하여 실시예에서 또는 명세서에서의 어딘가 다른 곳에서 달리 명시적으로 언급되지 않는 한, "약"은 당업계의 관행에 따른 단일 표준 편차, 또는 최대 5%의 범위 어느 쪽이든 더 큰 값 이내에 있음을 의미한다.

[0202] "대안적인 스캐폴드"는 높은 입체형태 공차(conformational tolerance)의 가변 도메인과 연관된 구조화된 코어를 함유하는 단일쇄 단백질 프레임워크를 지칭한다. 가변 도메인은, 스캐폴드 완전성(integrity)을 손상시키지 않고서, 도입되는 변이에 견디며, 이에 따라 가변 도메인은 특이적 항원에 결합하도록 조작 및 선택될 수 있다.

[0203] "항체 의존성 세포독성", "항체 의존성 세포 매개 세포독성" 또는 "ADCC"는 이펙터 세포 상에 발현되는 Fc 감마 수용체(FcγR)를 통한, 용해 활성을 갖는 이펙터 세포, 예컨대 자연 살해 세포(NK), 단핵구, 대식세포 및 호중구와 항체 코팅된 표적 세포의 상호작용에 의존하는 세포 사멸을 유도하는 기전을 지칭한다.

[0204] "항체 의존성 세포 식작용" 또는 "ADCP"는 식세포, 예컨대 대식세포 또는 수지상 세포에 의한 내재화에 의한 항체 코팅된 표적 세포의 제거의 기전을 지칭한다.

[0205] 용어 "항원"은 면역 반응을 매개할 수 있는 임의의 분자(예를 들어, 단백질, 펩티드, 다당류, 당단백질, 당지질, 핵산, 이들의 부분, 또는 이들의 조합)를 지칭한다. 비제한적인 예시적 면역 반응은 면역 세포, 예컨대 T 세포, B 세포 또는 NK 세포의 활성화 및 항체 생산을 포함한다.

[0206] 용어 "항원 결합 단편" 또는 "항원 결합 도메인"은 항원에 결합하는 단백질의 일부를 지칭한다. 항원 결합 단편은 합성 폴리펩티드이거나, 효소적으로 얻을 수 있는 폴리펩티드이거나, 유전자 조작된 폴리펩티드일 수 있으며, 항원에 결합하는 면역글로불린의 일부, 예컨대 중쇄 가변 영역(VH), 경쇄 가변 영역(VL), Fab, Fab', $F(ab')_2$, Fd, 및 Fv 단편, 1개의 VH 도메인 또는 1개의 VL 도메인으로 이루어진 도메인 항체(dAb), 낙타화(camelized) VH 도메인, VHH 도메인, 항체의 CDR을 모방하는 아미노산 잔기로 이루어진 최소 인식 단위, 예컨대 FR3-CDR3-FR4 부분, HCDR1, HCDR2 및/또는 HCDR3 및 LCDR1, LCDR2 및/또는 LCDR3, 항원에 결합하는 대체 스캐폴드, 및 항원 결합 단편을 포함하는 다중특이성 분자를 포함한다. 항원 결합 단편(예컨대, VH 및 VL)은 링커를 통해 함께 결합되어 다양한 유형의 단일 항체 설계를 형성할 수 있으며, 여기서 VH/VL 도메인은 분자내에서 쌍을 이루거나, VH 및 VL 도메인이 별개의 단일쇄에 의해 발현되는 경우에 분자간에 쌍을 이루어서, 1가 항원 결합 도메인, 예컨대 단일쇄 가변 단편(scFv) 또는 다이아바디(diabody)를 형성할 수 있다. 항원 결합 단편은 또한, 단일특이성 또는 다중특이성일 수 있는 다른 항체, 단백질, 항원 결합 단편 또는 대체 스캐폴드에 접합되어, 이중특이성 및 다중특이성 분자를 조작할 수 있다.

[0207] 용어 "항체"는 광의적으로 의미되며, 뮤린, 인간, 인간화 및 키메라 단일클론 항체를 포함한 단일클론 항체, 항원 결합 단편, 다중특이성 항체(예컨대, 이중특이성, 삼중특이성, 사중특이성 등), 이량체성, 사량체성 또는 다량체성 항체, 단일쇄 항체, 도메인 항체를 포함하는 면역글로불린 분자, 및 필요한 특이성의 항원 결합 부위를 포함하는 면역글로불린 분자의 임의의 다른 변형된 구성을 포함한다. "전장 항체"는 다이설파이드 결합에 의해 상호연결된 2개의 중쇄(HC) 및 2개의 경쇄(LC)뿐만 아니라 이의 다량체(예를 들어, IgM)로 구성된다. 각각의 중쇄는 중쇄 가변 영역(VH) 및 중쇄 불변 영역(도메인 CH1, 힌지, CH2 및 CH3으로 구성됨)으로 구성된다. 각각의 경쇄는 경쇄 가변 영역(VL) 및 경쇄 불변 영역(CL)으로 구성된다. VH 및 VL 영역은 프레임워크 영역(FR)이 산재된, 상보성 결정 영역(CDR)으로 불리는 초가변성의 영역으로 추가로 세분될 수 있다. 각각의 VH 및 VL은 3개의 CDR 및 4개의 FR 세그먼트로 구성되며, 아미노 말단에서 카르복시 말단으로 하기 순서대로 배열된다: FR1, CDR1, FR2, CDR2, FR3, CDR3 및 FR4. 면역글로불린은 중쇄 불변 도메인 아미노산 서열에 따라, 5개의 주요 분류, IgA, IgD, IgE, IgG 및 IgM으로 정해질 수 있다. IgA 및 IgG는 아이소타입 IgA1, IgA2, IgG1, IgG2, IgG3 및 IgG4로 추가로 하위분류된다. 임의의 척추동물 종의 항체 경쇄는 그의 불변 도메인의 아미노산 서열에 기초하여, 명확하게 별개인 2개의 유형, 즉 카파(κ) 및 람다(λ) 중 하나로 정해질 수 있다.

[0208] 용어 "이중특이성"은 2개의 별개의 항원 또는 동일한 항원 내의 2개의 별개의 에피토프에 특이적으로 결합하는

분자(예컨대, 항체)를 지칭한다. 이중특이성 분자는 다른 관련 항원들에 대한, 예를 들어 다른 종(상동체), 예컨대 인간 또는 원숭이, 예를 들어 마카카 사이노몰거스(*Macaca cynomolgus*)(사이노몰거스, 사이노), 또는 판트로글로디테스(*Pan troglodytes*)로부터의 동일한 항원에 대한 교차-반응성을 가질 수 있거나, 2개 이상의 별개의 항원 사이에 공유되는 에피토프에 결합할 수 있다.

[0209] 용어 "BCMA"는 B 세포 성숙 항원을 지칭한다. BCMA는 CD269 및 TNFRSF17(UniProt Q02223)로도 알려져 있으며, 분화된 형질 세포에서 발현되는 종양 괴사 수용체 슈퍼패밀리의 구성원이다. 일부 실시 형태에서, BCMA는 인간 BCMA이다. 예시적인 인간 BCMA 뉴클레오티드 서열은 GenBank 수탁 번호 BC058291에 의해 제공된다. 인간 게놈에는 BCMA 유전자의 4가지 주요 하플로타입이 있다(문헌[Kawasaki et al., Genes Immun. 2:276-9, 2001]). 본 발명에 따라, 용어 "BCMA"는 모든 4가지 하플로타입을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 인간 BCMA의 세포외 도메인은 Uniprot Ref. No. Q02223-1을 갖는 아미노산 서열의 아미노산 1개 내지 54개로 구성된다. 본 명세서에 사용되는 용어 "BCMA에 대한 항체, 항 BCMA 항체"는 BCMA에 특이적으로 결합하는 항체에 관한 것이다. 일부 실시 형태에서, 항 BCMA 항체는 인간 BCMA에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 항 BCMA 항체는 인간 BCMA의 일부에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 항 BCMA 항체는 인간 BCMA의 세포외 도메인에 결합한다.

[0210] 용어 "키메라 항원 수용체" 또는 "CAR"은 리간드 또는 항원 특이성을 면역 세포, 예를 들어 T 세포(미감작 T 세포, 중심 기억 T 세포, 이펙터 기억 T 세포 또는 이들의 조합을 포함하지만, 이에 한정되지 않음)에 이식하는 조작된 T 세포 수용체를 지칭한다. CAR은 인공 T 세포 수용체, 키메라 T 세포 수용체 또는 키메라 면역수용체로도 알려져 있다. 일부 실시 형태에서, CAR은 항원에 결합할 수 있는 세포외 도메인, 막관통 도메인 및 적어도 하나의 세포내 도메인을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 세포내 도메인은 세포에서 생물학적 과정의 활성화 또는 저해를 유도하는 신호를 전달하는 도메인으로서 기능하는 것으로 알려진 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 막관통 도메인은 세포막에 걸쳐 있는 것으로 알려져 있고, 세포외 도메인과 세포내 도메인을 연결하는 기능을 할 수 있는 펩티드 또는 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, CAR은 세포외 도메인과 막관통 도메인 사이의 링커의 역할을 하는 힌지 도메인을 추가로 포함한다.

[0211] "CD3"은 다량체 T 세포 수용체(TCR) 복합체의 일부로서 T 세포에서 발현되는 항원을 말한다. CD3은 2개 또는 4개의 수용체 사슬(CD3 엡실론, CD3 델타, CD3 제타 및 CD3 감마)의 결합으로 형성된 호모이량체 또는 헤테로이량체로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 제공된 CD3 항체는 CD3-감마, CD3-델타 및 CD3-제타, 및 T 세포 수용체 알파/베타 및 감마/델타 헤테로이량체와 함께, T 세포 수용체-CD3 복합체를 형성하는 CD3-엡실론 폴리펩티드에 결합한다. 이러한 복합체는 항원 인식을 몇몇 세포내 신호-전달 경로에 커플링하는 데 있어서 중요한 역할을 한다. CD3 복합체는 신호 전달을 매개하여, T 세포 활성화 및 증식을 가져온다. CD3은 면역 반응에 필요하다. 용어 "CD3"은 임의의 CD3 변이체, 아이소형 및 종 상동체를 포함하는데, 이는 세포(T 세포를 포함함)에 의해 천연 발현되거나 관심있는 단백질을 인코딩하는 유전자 또는 cDNA로 형질감염된 세포 상에서 발현될 수 있다. 소정 실시 형태에서, CD3은 인간 CD3이다.

[0212] 용어 "보체 의존성 세포독성" 또는 "CDC"는, 표적 결합된 단백질의 Fc 이펙터 도메인이 보체 성분 C1q에 결합하여 활성화하고, 이는 결국 보체 캐스케이드를 활성화하여 표적 세포사를 유발하는 세포사 유도 기전을 지칭한다. 보체의 활성화는 또한 표적 세포 표면 상에의 보체 성분의 침착을 가져올 수 있는데, 이는 백혈구 상의 보체 수용체(예를 들어, CR3)에 결합함으로써 CDC를 용이하게 한다.

[0213] 용어 "상보성 결정 영역"(CDR)은 항원에 결합하는 항체 영역이다. VH 내에 3개의 CDR(HCDR1, HCDR2, HCDR3)이 존재하고, VL 내에 3개의 CDR(LCDR1, LCDR2, LCDR3)이 존재한다. CDR은 카바트(Kabat)(문헌[Wu *et al.*, (1970) *J Exp Med* 123: 211-250]; 문헌[Kabat *et al.*, Sequences of Proteins of Immunological Interest, 5th Ed. Public Health Service, National Institutes of Health, Bethesda, Md., 1991]), 초티아(문헌[Chothia *et al.*, (1987) *J Mol Biol* 196: 901-17]), IMGT(문헌[Lefranc *et al.*, (2003) *Dev Comp Immunol* 27: 55-77]) 및 AbM(문헌[Martin and Thornton (1996) *J Bmol Biol* 263: 800-815])과 같은 다양한 도해를 사용하여 정의될 수 있다. 다양한 도해와 가변 영역 넘버링 사이의 대응이 기재되어 있다(예를 들어, 문헌[Lefranc *et al.* (2003) *Dev Comp Immunol* 27: 55-77]; 문헌[Honegger and Pluckthun, J Mol Biol (2001) 309:657-670]; 문헌[International ImMunoGeneTics(IMGT) 데이터베이스; Web resources, http://www_imgt_org] 참조). UCL Business PLC의 abYsis와 같은 이용가능한 프로그램을 사용하여 CDR을 상세하게 설명할 수 있다. 본 명세서에 사용되는 바와 같이, 용어 "CDR", "HCDR1", "HCDR2", "HCDR3", "LCDR1", "LCDR2" 및 "LCDR3"은 본 명세서에 달리 명시적으로 언급되어 있지 않는 한, 상기에 기재된 방법들인 카바트, 초티아, IMGT 또는 AbM 중 임의의 것에 의해 정의된 CDR을 포함한다.

[0214] "줄이다(Decrease)", "(lower)낮추다" 또는 "감소시키다(reduce)"는 일반적으로 대조군 또는 비히클에 의해 매개되는 반응과 비교할 때 감소된 반응(즉, 하류 효과)을 매개하는 시험 분자의 능력을 지칭한다. 비제한적인 예시적 반응은 항원 또는 수용체에 대한 단백질의 결합, FcγR에 대한 향상된 결합, 또는 향상된 Fc 이펙터 기능, 예컨대 향상된 ADCC, CDC 및/또는 ADCP를 포함한다. 감소는 시험 분자와 대조군(또는 비히클) 사이의 측정된 반응에서 통계적으로 유의한 차이, 또는 측정된 반응의 감소, 예컨대 약 1.1, 1.2, 1.5, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20 또는 30배 이상, 예컨대 500, 600, 700, 800, 900 또는 1000배 이상의 감소일 수 있다.

[0215] 용어 "향상시키다", "촉진시키다" 또는 "증가시키다"는 일반적으로 대조군 또는 비히클에 의해 매개된 반응과 비교할 때 더 큰 반응(즉, 하류 효과)을 매개하는 시험 분자의 능력을 지칭한다. 비제한적인 예시적 반응은 항원 또는 수용체에 대한 단백질의 결합, FcγR에 대한 향상된 결합, 또는 향상된 Fc 이펙터 기능, 예컨대 향상된 ADCC, CDC 및/또는 ADCP를 포함한다. 향상은 시험 분자와 대조군(또는 비히클) 사이의 측정된 반응에서 통계적으로 유의한 차이, 또는 측정된 반응의 증가, 예컨대 약 1.1, 1.2, 1.5, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 15, 20 또는 30배 이상, 예컨대 500, 600, 700, 800, 900 또는 1000배 이상의 증가일 수 있다.

[0216] 용어 "발현 벡터"는 발현 벡터에 존재하는 폴리뉴클레오티드 서열에 의해 인코딩되는 폴리펩티드의 번역을 지시하기 위해 생물계 또는 재구성된 생물계에서 이용될 수 있는 벡터를 지칭한다.

[0217] 용어 "이종"은 사실상 서로 동일한 관계에서 발견되지 않는 2개 이상의 폴리펩티드 또는 2개 이상의 폴리뉴클레오티드를 포함하는 폴리펩티드 또는 폴리뉴클레오티드를 지칭한다.

[0218] 용어 "이종 폴리뉴클레오티드"는 사실상 서로 동일한 관계에서 발견되지 않는 2개 이상의 폴리뉴클레오티드를 포함하는 폴리뉴클레오티드를 지칭한다.

[0219] 용어 "이종 폴리펩티드"는 사실상 서로 동일한 관계에서 발견되지 않는 2개 이상의 폴리펩티드를 포함하는 폴리펩티드를 지칭한다.

[0220] 용어 "인간 항체"는 인간 대상에게 투여될 때 최소 면역 반응을 갖도록 최적화된 항체를 지칭한다. 인간 항체의 가변 영역은 인간 면역글로불린 서열로부터 유래된다. 인간 항체가 불변 영역 또는 이의 일부를 포함하는 경우, 불변 영역은 또한 인간 면역글로불린 서열로부터 유래된다. 인간 항체는, 인간 항체의 가변 영역이 인간 생식세포계열 면역글로불린 또는 재배열된 면역글로불린 유전자를 사용하는 시스템으로부터 얻어지는 경우, 인간 기원의 서열"로부터 유래되는" 중쇄 및 경쇄 가변 영역을 포함한다. 그러한 예시적인 시스템은 파지 상에 디스플레이된 인간 면역글로불린 유전자 라이브러리, 및 유전자도입 비인간 동물, 예컨대 인간 면역글로불린 유전자좌를 보유하는 마우스 또는 래트이다. "인간 항체"는 전형적으로, 인간 항체 및 인간 면역글로불린 유전자좌를 얻는 데 사용되는 시스템간의 차이, 체세포 돌연변이의 도입 또는 프레임워크 또는 CDR 내로의 치환의 의도적인 도입, 또는 둘 모두로 인해 인간에서 발현된 면역글로불린과 비교하여 아미노산 차이를 함유한다. 전형적으로, "인간 항체"는 인간 생식세포계열 면역글로불린 또는 재배열된 면역글로불린 유전자에 의해 인코딩된 아미노산 서열과 아미노산 서열이 적어도 약 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98% 또는 99% 동일하다. 일부 경우에, "인간 항체"는, 예를 들어 문헌[Knappik *et al.*, (2000) *J Mol Biol* 296:57-86]에 기재된 바와 같이 인간 프레임워크 서열 분석으로부터 유래되는 공통 프레임워크 서열을 함유하거나, 예를 들어 문헌[Shi *et al.*, (2010) *J Mol Biol* 397:385-396] 및 국제 특허 출원 공개 WO2009/085462호에 기재된 바와 같이 파지 상에 디스플레이된 인간 면역글로불린 유전자 라이브러리 내로 혼입된 합성 HCDR3을 함유할 수 있다. 적어도 하나의 CDR이 비인간 종으로부터 유래되는 항체는 "인간 항체"의 정의에 포함되지 않는다.

[0221] 용어 "인간화 항체"는, 하나 이상의 CDR이 비인간 종으로부터 유래되고, 적어도 하나의 프레임워크가 인간 면역글로불린 서열로부터 유래되는 항체를 지칭한다. 인간화 항체는 프레임워크 내에 치환을 포함할 수 있으므로, 프레임워크는 발현된 인간 면역글로불린 또는 인간 면역글로불린 생식세포계열 유전자 서열의 정확한 카피가 아닐 수 있다.

[0222] 용어 "단리된"은 분자가 생성되는 시스템, 예컨대 재조합 세포의 다른 성분으로부터 실질적으로 분리되고/되거나 정제된 분자(예컨대, 본 발명의 scFv 또는 spFv, 또는 본 발명의 scFv 또는 spFv를 포함하는 이종 단백질)의 균질 집단뿐만 아니라, 적어도 하나의 정제 또는 단리 단계를 거친 단백질을 지칭한다. "단리된"은 기타 세포 물질 및/또는 화학물질이 실질적으로 없는 분자를 지칭하며, 보다 높은 순도로, 예컨대 약 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99% 또는 100% 순도로 단리된 분자를 포함한다.

[0223] 용어 "조절하다"는 대조군 또는 비히클에 의해 매개된 반응과 대비하여, 향상된 또는 감소된 반응을 매개하는 시험 분자의 향상된 또는 감소된 능력을 지칭한다(즉, 하류 효과).

[0224] 용어 "단일클론 항체"는 실질적으로 균질한 항체 분자 집단으로부터 얻어진 항체를 지칭하는데, 즉, 집단을 구성하는 개별 항체는 항체 중쇄로부터 C 말단 라이신의 제거와 같은 가능성 있는 잘 알려진 변경, 또는 아미노산 이성질화 또는 탈아미드화, 메티오닌 산화 또는 아스파라긴 또는 글루타민 탈아미드화와 같은 번역 후 변형을 제외하고는 동일하다. 단일클론 항체는 전형적으로 1개의 항원 에피토프에 결합한다. 이중특이성 단일클론 항체는 2개의 별개의 항원 에피토프에 결합한다. 단일클론 항체는 항체 집단 내에 불균질한 글리코실화를 가질 수 있다. 단일클론 항체는 단일특이성 또는 다중특이성, 예컨대 이중특이성 1가, 2가 또는 다가일 수 있다.

[0225] 용어 "다중특이성"은 2개 이상의 별개의 항원 또는 동일한 항원 내의 2개 이상의 별개의 에피토프에 결합하는 분자를 지칭한다. 다중특이성 분자는 다른 관련 항원들에 대한, 예를 들어 다른 종(상동체), 예컨대 인간 또는 원숭이, 예를 들어 마카카 파시쿨라리스(*Macaca fascicularis*)(사이노몰거스, 사이노), 또는 판 트로글로디테스(*Pan troglodytes*)로부터의 동일한 항원에 대한 교차-반응성을 가질 수 있거나, 2개 이상의 별개의 항원 사이에 공유되는 에피토프에 결합할 수 있다.

[0226] 용어 "폴리뉴클레오티드"는 당-인산 골격 또는 다른 균등한 공유결합적 화학적 특성에 의해 공유 결합된 뉴클레오티드의 사슬을 포함하는 분자를 지칭한다. cDNA는 폴리뉴클레오티드의 전형적인 예이다.

[0227] 본 명세서에 사용되는 용어 "단백질" 또는 "폴리펩티드"는 펩티드 결합에 의해 연결된 2개 이상의 아미노산 잔기로 각각 구성된 하나 이상의 폴리펩티드를 포함하는 분자를 지칭한다. 단백질은 단량체일 수 있거나, 2개 이상의 서브유닛으로 된 단백질 복합체일 수 있으며, 서브유닛은 동일하거나 별개이다. 50개 미만의 아미노산의 작은 폴리펩티드는 "펩티드"로 지칭될 수 있다. 단백질은 이종 융합 단백질, 당단백질, 또는 인산화, 아세틸화, 미리스토일화, 팔미토일화, 글리코실화, 산화, 포르밀화, 아미드화, 시트룰린화, 폴리글루타밀화, ADP-리보실화, PEG화 또는 비오티닐화와 같은 번역후 변형에 의해 변형된 단백질일 수 있다.

[0228] 용어 "재조합"은 재조합 수단에 의해 제조, 발현, 생성 또는 단리된 폴리뉴클레오티드, 폴리펩티드, 벡터, 바이러스 및 기타 거대분자를 지칭한다.

[0229] 용어 "단일쇄 가변 단편", "단일쇄 Fv" 또는 "scFv"는 VH, VL 및 VH와 VL 사이의 링커를 포함하는 단일쇄 단백질을 지칭한다. scFv는 예를 들어, VH 및 VL의 N 말단에서 C 말단으로의 순서와 관련하여, 어느 한 배향으로의 VL 및 VH를 가질 수 있다. 따라서, scFv는 VL-링커-VH 또는 VH-링커-VL 배향일 수 있다. scFv는 VH, VL 및 링커 사이에 다이설파이드 결합을 포함하도록 조작될 수 있다.

[0230] 용어 "특이적으로 결합한다", "특이적 결합", "특이적으로 결합하는" 또는 "결합한다"는 단백질(예컨대, scFv)이 항원 또는 항원 내의 에피토프에 대해 다른 항원에 대해서보다 더 큰 결합 친화성으로 결합하는 것을 지칭한다. 전형적으로, 단백질(예컨대, scFv)은 약 1×10^{-6} M 이하, 약 1×10^{-7} M 이하, 약 5×10^{-8} M 이하, 약 1×10^{-8} M 이하, 약 1×10^{-9} M 이하, 약 1×10^{-10} M 이하, 약 1×10^{-11} M 이하 또는 약 1×10^{-12} M 이하의 평형 해리 상수(K_D)로 항원 또는 항원 내의 에피토프에 결합하며, 이때 전형적으로 K_D는 비특이적 항원(예를 들어, BSA, 카세인)에 결합하기 위한 이의 K_D보다 적어도 100배 더 적다.

[0231] 용어 "스테이플"은 앵커 포인트 Cys와 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 1개 또는 2개의 Cys 잔기를 포함하는 scFv 링커를 지칭한다.

[0232] 용어 "스테이플링된 단일쇄 Fv" 또는 "spFv"는 VH와 링커 또는 VL과 링커 사이에 하나 이상의 다이설파이드 결합을 포함하는 scFv를 지칭한다. 일부 실시 형태에서, spFv는 VH와 링커 사이의 1개의 다이설파이드 결합, VL과 링커 사이의 1개의 다이설파이드 결합, 또는 VH 사이에 1개와, 링커와 VL과 링커 사이에 1개를 갖는 2개의 다이설파이드 결합을 포함한다. 일부 실시 형태에서, VH와 VL 사이에 다이설파이드 결합을 포함하는 scFv 분자는 용어 "spFv"에서 제외된다.

[0233] 용어 "대상"은 임의의 인간 또는 비인간 동물을 포함한다. "비인간 동물"은 모든 척추동물, 예를 들어 포유동물 및 비포유동물, 예컨대 비인간 영장류, 양, 개, 고양이, 말, 소, 닭, 양서류, 파충류 등을 포함한다. 용어 "대상" 및 "환자"는 본 명세서에서 상호교환적으로 사용될 수 있다. 일부 실시 형태에서, 상기 대상은 인간 대상이다.

[0234] 용어 "치료적 유효량"은 필요한 투여량에서 그리고 필요한 시간 동안 원하는 치료 결과를 달성하는 데 유효한

양을 지칭한다. 치료적 유효량은 개체의 질병 상태, 연령, 성별, 및 체중, 그리고 치료제 또는 치료제들의 병용물이 개체에서 원하는 반응을 유도하는 능력과 같은 인자들에 따라 변동될 수 있다.

[0235] 질환 또는 장애와 관련하여, 용어 "치료하다", "치료하는" 또는 "치료"는 하기 중 하나 이상을 달성하는 것을 지칭한다: 장애의 중증도 및/또는 지속기간을 감소시킴; 치료되는 장애에 특징적인 증상의 악화를 억제함; 이전에 장애를 가졌던 대상에서 장애의 재발을 제한하거나 예방함; 또는 장애에 대해 이전에 증상을 나타낸 대상에서 증상의 재발을 제한하거나 예방함.

[0236] 용어 "삼중특이성"은 3개의 별개의 항원 또는 동일한 항원 내의 3개의 별개의 에피토프에 특이적으로 결합하는 분자(예컨대, 항체)를 지칭한다. 삼중특이성 분자는 다른 관련 항원들에 대한, 예를 들어 다른 종(상동체), 예컨대 인간 또는 원숭이, 예를 들어 마카카 사이노몰거스(사이노몰거스, 사이노), 또는 판 트로글로디테스로부터의 동일한 항원에 대한 교차-반응성을 가질 수 있거나, 3개 이상의 별개의 항원 사이에 공유되는 에피토프에 결합할 수 있다.

[0237] 용어 "변이체", "돌연변이체" 또는 "변경된"은 하나 이상의 변형, 예를 들어 하나 이상의 치환, 삽입, 및/또는 결실에 의해 참조 폴리펩티드 또는 참조 폴리뉴클레오티드와 상이한 폴리펩티드 또는 폴리뉴클레오티드를 지칭한다.

[0238] 달리 명백하게 언급되지 않는 한, 본 명세서 전체에 걸쳐 항체 불변 영역의 아미노산 잔기의 넘버링은 문헌 [Kabat *et al.*, Sequences of Proteins of Immunological Interest, 5th Ed. Public Health Service, National Institutes of Health, Bethesda, MD. (1991)]에 기재된 바와 같이 EU 인덱스에 따른다.

[0239] Ig 불변 영역 내의 돌연변이는 다음과 같이 지칭된다: L351Y_F405A_Y407V는 하나의 면역글로불린 불변 영역에서의 L351Y, F405A 및 Y407V 돌연변이를 지칭한다. L351Y_F405A_Y407V/T394W는 분자에 존재하는 제1 Ig 불변 영역 내의 L351Y, F405A 및 Y407V 돌연변이 및 제2 Ig 불변 영역 내의 T394W 돌연변이를 지칭한다.

[0240] 가변 영역의 넘버링은 달리 명시적으로 언급되지 않는 한 초티아에 따른다.

[0241] 용어 "VH 시스테인" 또는 "VH Cys"는 VH 프레임워크에 존재하는 Cys 잔기를 지칭한다.

[0242] 용어 "VL 시스테인" 또는 "VL Cys"는 VL 프레임워크에 존재하는 Cys 잔기를 지칭한다.

[0243] 용어 "안정화된"은 가열되지 않은 scFv 샘플과 비교할 때 항원에 대한 유사한 결합을 유지하는 scFv를 지칭하며, 이는 열안정성으로 지칭된다.

[0244] 용어 "개선된 안정성"은 spFv에 도입된 다이설파이드 결합 및 Cys 잔기가 없는 모 scFv와 비교할 때 상승된 융점(Tm)을 갖는 본 발명의 spFv를 지칭한다. 상승된 Tm은 약 2℃ 이상, 예컨대 약 3℃, 4℃, 5℃, 6℃, 7℃, 8℃, 9℃, 10℃, 11℃, 12℃, 13℃, 14℃ 또는 15℃의 상승일 수 있다.

[0245] 용어 "앵커 포인트"는, 전체 scFv 구조에 대한 부작용 없이 Cys에 돌연변이를 일으킬 수 있고 scFv 링커에 존재하는 Cys와 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 scFv VH 또는 VL 프레임워크 Cys 잔기를 지칭한다.

[0246] 용어 "표면 노출된"은 단백질의 표면에 적어도 부분적으로 노출되고 용매에 접근 가능한, 예컨대 중수소화에 접근 가능한 아미노산 잔기를 지칭한다. 1차 서열 또는 단백질에 기초하여 잔기의 표면 접근성을 예측하기 위한 알고리즘이 당업계에 잘 알려져 있다. 대안적으로, 표면 노출된 잔기는 단백질의 결정 구조로부터 확인될 수 있다.

[0247] 용어 "LTBR"은 종양 괴사 인자 수용체 슈퍼패밀리의 구성원인, 아폽토시스 및 사이토카인 방출에 관여하는 림프독소에 대한 세포 표면 수용체인 폴리펩티드를 지칭한다. LTBR은 또한 "종양 괴사 인자 수용체 슈퍼패밀리 구성원 3(TNFRSF3)"으로 지칭될 수 있다. LTBR은 상피 계통 및 골수계 계통의 세포를 포함한 다수의 세포 유형의 표면 상에서 발현된다. LTBR은 림프독소 막 형태(림프독소-알파와 림프독소-베타의 복합체)에 결합할 수 있다. LTBR의 활성화는 TRAF3 및 TRAF5를 통해 아폽토시스를 촉발할 수 있고 인터류킨 8의 방출로 이어질 수 있다. 일부 실시 형태에서, LTBR은 인간 LTBR이다. 예시적인 인간 LTBR은 UniProt No. P36941을 갖는 아미노산 서열을 포함한다.

[0248] **4.1. 물질의 조성**

[0249] 항원 결합 단일쇄 가변 단편(scFv)은 본 기술 분야 및 본 발명의 광범위한 교시를 고려하여, 치료제, 조영제, 진단약 또는 다중특이성 분자와 같은 이종 분자의 일부로서 활용될 수 있는 분자이다. scFv의 과제에는 낮은

안정성과 응집 경향이 포함된다(예를 들어, 문헌[Worn and Pluckthun (2001) *J Mol Biol* 305: 989-1010]; 문헌[Rothlisberger *et al.*, (2005) *J Mol Biol* 347: 773-789]; 문헌[Gross *et al.*, (1989) *Transplant Proc* 21(1 Pt 1): 127-130, Porter *et al.*, (2011) *J Cancer* 2: 331-332]; 문헌[Porter *et al.*,(2011) *N Engl J Med* 365: 725-733] 참조).

[0250] 이러한 배경을 토대로, 본 발명자들은 다중특이성 분자 및 이종 분자를 포함하지만 이에 한정되지 않는 다양한 분자에 임의로 통합될 수 있는 scFv 설계를 위한 개선된 재료 및 방법에 대한 필요성을 인식하였다. 본 발명은 안정화된 scFv 분자(본 명세서에서 spFv(스테이플링된 Fv)로 지칭됨), spFv를 포함하는 이종 및 다중특이성 분자, 이를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드, 벡터, 숙주 세포 및 이들의 제조 및 사용 방법을 제공한다. 본 발명은, 링커와 scFv의 가변 도메인 사이에 다이설파이드 결합을 형성하는 시스테인 잔기로 조작될 수 있는 유연한 링커(본 명세서에서 스테이플로 지칭됨)에서 및 VH 및/또는 VL(본 명세서에서 VH 앵커 포인트 또는 VL 앵커 포인트로 지칭됨)에서 적합한 잔기 위치의 확인에 적어도 부분적으로 기초한다. 본 명세서에 기재된 "스테이플링" 전략은 특히, 개선된 안정성을 갖는 scFv에 구조적 동일성을 제공하는 모든 VH/VL 도메인 및 기존 scFv 분자를 포함하지만 이에 한정되지 않는 다양한 분자에 널리 적용가능하다. 본 명세서에 기재된 spFv는 키메라 항원 수용체(CAR), T 세포 방향전환 분자, 이중특이성 및 다중특이성 분자를 포함하여 임의의 이종 단백질, 이중특이성 또는 다중특이성 포맷으로 접합될 수 있고, 치료, 진단 및 검출 분자로서 사용될 수 있다.

[0251] ***4.1.1. 본 발명의 spFv***

[0252] 본 발명은 다양한 spFv를 제공한다. 한 측면에서, 본 발명은 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하는 단리된 단일쇄 가변 단편(scFv)을 제공하며, 여기서 scFv는 a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는 c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함한다.

[0253] 본 발명은 또한 VH, L 및 VL을 포함하는 단리된 scFv를 제공하며, 여기서 a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있다. 일부 실시 형태에서, 다이설파이드 결합은 scFv의 발현 동안 형성된다.

[0254] 일부 실시 형태에서, spFv는 L Cys와 VH Cys 사이, 또는 L Cys와 VL Cys 사이에 형성된 하나의 다이설파이드 결합으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, 이러한 spFv는 "반고정(half-anchored) spFv"라고 한다. 앵커 위치는 1개 또는 2개의 다이설파이드 결합을 포함하는 spFv에서 동일하다. 링커 Cys 위치는 앵커 포인트와의 다이설파이드 결합 형성에 대한 거리 및 배치 요건을 충족시키는 한, 반고정 spFv에서 다양할 수 있다. 일부 실시 형태에서, 반고정 spFv는 2개의 다이설파이드 결합으로 안정화된 VL/VH 쌍과 유사하게 VL/VH 상대 이동을 억제한다. 따라서, 반고정 spFv도 안정화된다.

[0255] spFv의 VH 및 VL은 어떤 방향으로도 고정될 수 있다. 예를 들어, 일부 실시 형태에서, VH의 N 말단은 VL의 C 말단에 고정된다. 일부 실시 형태에서, VH의 C 말단은 VL의 N 말단에 고정된다. 앵커 위치도 VL 및 VH 배향에 따라 달라지며, 모든 VL 및 VH 앵커 포인트가 쌍을 이룰 수 있는 것은 아니다.

[0256] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv는 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv에 비해 증가된 안정성을 갖는다. 안정성에는 열 안정성과 기계적 안정성이 포함된다. 열안정성은, 가열된 단백질 샘플(예컨대, 100℃로 가열된 샘플)을 사용하여 DSC 스캔을 수행한 후에, 2-상태 또는 비-2-상태 전이를 사용하여 얻어진 열 용융 프로파일을 분석하는 시차 열량계(differential thermal calorimetry, DSC)를 사용하여 평가될 수 있다. 비-2-상태 전이의 경우, 각각 VL 및 VH 도메인의 용융 Tm에 상응하는 2개의 전이(Tm1 및 Tm2)가 기록된다. 일부 실시 형태에서, spFv는 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv에 비해 증가된 열 안정성을 갖는다. 일부 실시 형태에서, spFv의 Tm은 모 scFv의 Tm에 관계없이 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv의 Tm보다 약 10℃ 더 높다.

[0257] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv는 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv에 비해 이중특이성 단

량체의 수율 및 품질이 크게 개선되었다. 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv는 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv에 비해 고농도에서 열 스트레스 시에 응집이 감소되었다. 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv 분자는 다중특이성 분자이다. 일부 실시 형태에서, spFv 분자는 이중특이성 분자이다. 다른 실시 형태에서, spFv 분자는 삼중특이성 분자이다. 특정한 실시 형태에서, spFv 분자는 다이설파이드 결합(들)이 없는 모 scFv에 비해 향상된 발현성을 갖는다. 일부 실시 형태에서, 스테이플링은 scFv 전환의 성공률을 높일 수 있으므로, 더 많은 scFv 분자를 치료용 작제물의 분자 빌딩 블록으로 사용할 수 있다.

[0258] 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 7 Å 내지 약 9 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 7 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 8 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 9 Å이다.

[0259] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아(Chothia)에 따른다.

[0260] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재한다.

[0261] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재한다.

[0262] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재한다.

[0263] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재한다.

[0264] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재한다.

[0265] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재한다.

[0266] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0267] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L3에 존재한다.

[0268] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L5에 존재한다.

[0269] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L39에 존재한다.

[0270] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L42에 존재한다.

[0271] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L43에 존재한다.

[0272] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L45에 존재한다.

[0273] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L100에 존재한다.

[0274] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L102에 존재한다.

[0275] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0276] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L43에 존재한다.

[0277] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0278] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0279] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0280] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0281] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0282] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0283] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0284] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0285] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0286] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0287] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0288] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0289] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0290] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0291] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0292] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0293] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0294] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0295] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0296] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0297] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0298] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0299] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0300] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0301] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0302] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0303] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0304] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0305] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0306] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0307] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0308] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0309] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0310] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0311] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0312] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0313] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0314] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0315] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0316] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0317] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0318] VH 및 VL 영역의 잔기 넘버링은 초티아에 따른다. 초티아 넘버링은 잘 알려져 있다. 카바트 또는 IMGT 넘버링, 또는 순차적 넘버링과 같은 다른 넘버링 시스템이 또한 VH 및 VL 잔기 위치를 넘버링하는 데 사용될 수 있다. **표 1**은 예시적인 VH, GLk1 VH(**서열 번호 60**)에 대한 초티아, 카바트 및 순차적 넘버링 사이의 대응을 나타낸다. **표 2**는 예시적인 VL, GLk1 VL(**서열 번호 56**)에 대한 초티아, 카바트 및 순차적 넘버링 사이의 대응을 나타낸다.

[0319] [표 1]

예시적인 VH, GLk1 VH에 대한 초티아, 카바트 및 순차적 넘버링 사이의 대응

초티아 넘버링	카바트 넘버링	순차적 넘버링	위치에서의 아미노산 잔기		초티아 넘버링	카바트 넘버링	순차적 넘버링	위치에서의 아미노산 잔기
H1	H1	1	E		H60	H60	61	A
H2	H2	2	V		H61	H61	62	D
H3	H3	3	Q		H62	H62	63	S
H4	H4	4	L		H63	H63	64	V
H5	H5	5	L		H64	H64	65	K
H6	H6	6	E		H65	H65	66	G
H7	H7	7	S		H66	H66	67	R
H8	H8	8	G		H67	H67	68	F
H9	H9	9	G		H68	H68	69	T
H10	H10	10	G		H69	H69	70	I
H11	H11	11	L		H70	H70	71	S
H12	H12	12	V		H71	H71	72	R
H13	H13	13	Q		H72	H72	73	D
H14	H14	14	P		H73	H73	74	N
H15	H15	15	G		H74	H74	75	S
H16	H16	16	G		H75	H75	76	K
H17	H17	17	S		H76	H76	77	N
H18	H18	18	L		H77	H77	78	T
H19	H19	19	R		H78	H78	79	L
H20	H20	20	L		H79	H79	80	Y
H21	H21	21	S		H80	H80	81	L
H22	H22	22	C		H81	H81	82	Q
H23	H23	23	A		H82	H82	83	M
H24	H24	24	A		H82A	H82A	84	N
H25	H25	25	S		H82B	H82B	85	S
H26	H26	26	G		H82C	H82C	86	L
H27	H27	27	F		H83	H83	87	R
H28	H28	28	T		H84	H84	88	A
H29	H29	29	F		H85	H85	89	E
H30	H30	30	S		H86	H86	90	D
H31	H31	31	S		H87	H87	91	T
H32	H32	32	Y		H88	H88	92	A
H33	H33	33	A		H89	H89	93	V
H34	H34	34	M		H90	H90	94	Y
H35	H35	35	S		H91	H91	95	Y
H36	H36	36	W		H92	H92	96	C
H37	H37	37	V		H93	H93	97	A
H38	H38	38	R		H94	H94	98	K
H39	H39	39	Q		H95	H95	99	Y
H40	H40	40	A		H96	H96	100	D
H41	H41	41	P		H97	H97	101	G
H42	H42	42	G		H98	H98	102	I
H43	H43	43	K		H99	H99	103	Y
H44	H44	44	G		H100	H100	104	G
H45	H45	45	L		H100A	H100A	105	E
H46	H46	46	E		H100B	H100B	106	L
H47	H47	47	W		H101	H101	107	D
H48	H48	48	V		H102	H102	108	F
H49	H49	49	S		H103	H103	109	W
H50	H50	50	A		H104	H104	110	G
H51	H51	51	I		H105	H105	111	Q
H52	H52	52	S		H106	H106	112	G
H52A	H52A	53	G		H107	H107	113	T
H53	H53	54	S		H108	H108	114	L
H54	H54	55	G		H109	H109	115	V
H55	H55	56	G		H110	H110	116	T
H56	H56	57	S		H111	H111	117	V
H57	H57	58	T		H112	H112	118	S
H58	H58	59	Y		H113	H113	119	S
H59	H59	60	Y					

[0320]

[0321] [표 2]

예시적인 VL, GLk1 VL 에 대한 초티아, 카바트 및 순차적 넘버링 사이의 대응

초티아 넘버링	카바트 넘버링	순차적 넘버링	위치에서의 아미노산 잔기		초티아 넘버링	카바트 넘버링	순차적 넘버링	위치에서의 아미노산 잔기
L1	L1	1	D		L55	L55	55	Q
L2	L2	2	I		L56	L56	56	S
L3	L3	3	Q		L57	L57	57	G
L4	L4	4	M		L58	L58	58	V
L5	L5	5	T		L59	L59	59	P
L6	L6	6	Q		L60	L60	60	S
L7	L7	7	S		L61	L61	61	R
L8	L8	8	P		L62	L62	62	F
L9	L9	9	S		L63	L63	63	S
L10	L10	10	S		L64	L64	64	G
L11	L11	11	L		L65	L65	65	S
L12	L12	12	S		L66	L66	66	G
L13	L13	13	A		L67	L67	67	S
L14	L14	14	S		L68	L68	68	G
L15	L15	15	V		L69	L69	69	T
L16	L16	16	G		L70	L70	70	D
L17	L17	17	D		L71	L71	71	F
L18	L18	18	R		L72	L72	72	T
L19	L19	19	V		L73	L73	73	L
L20	L20	20	T		L74	L74	74	T
L21	L21	21	I		L75	L75	75	I
L22	L22	22	T		L76	L76	76	S
L23	L23	23	C		L77	L77	77	S
L24	L24	24	R		L78	L78	78	L
L25	L25	25	A		L79	L79	79	Q
L26	L26	26	S		L80	L80	80	P
L27	L27	27	Q		L81	L81	81	E
L28	L28	28	S		L82	L82	82	D
L29	L29	29	I		L83	L83	83	F
L30	L30	30	S		L84	L84	84	A
L31	L31	31	S		L85	L85	85	T
L32	L32	32	Y		L86	L86	86	Y
L33	L33	33	L		L87	L87	87	Y
L34	L34	34	N		L88	L88	88	C
L35	L35	35	W		L89	L89	89	Q
L36	L36	36	Y		L90	L90	90	Q
L37	L37	37	Q		L91	L91	91	S
L38	L38	38	Q		L92	L92	92	Y
L39	L39	39	K		L93	L93	93	S
L40	L40	40	P		L94	L94	94	T
L41	L41	41	G		L95	L95	95	P
L42	L42	42	K		L96	L96	96	L
L43	L43	43	A		L97	L97	97	T
L44	L44	44	P		L98	L98	98	F
L45	L45	45	K		L99	L99	99	G
L46	L46	46	L		L100	L100	100	Q
L47	L47	47	L		L101	L101	101	G
L48	L48	48	I		L102	L102	102	T
L49	L49	49	Y		L103	L103	103	K
L50	L50	50	A		L104	L104	104	V
L51	L51	51	A		L105	L105	105	E
L52	L52	52	S		L106	L106	106	I
L53	L53	53	S		L107	L107	107	K
L54	L54	54	L		L108	L108	108	R

[0322]

[0323] 일부 실시 형태에서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 예시적인 비인간 Ig 힌지 영역은 마우스, 래트, 개, 닭 및 비인간 영장류, 예컨대 원숭이로부터의 것이다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 일부 실시 형태에서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3, IgG4, IgM, IgA 또는 IgE 아이소타입이다.

[0324] 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 잔기 216을 포함하고, 인간 IgG의 잔기 230에서 종결되며, 잔기 넘버링은 EU 인덱스에 따른다. 일부 경우에, 대략 잔기 231 내지 대략 잔기 237의 하부 힌지 영역이 또한 IgG 힌지 영역에 포함될 수 있다. 일부 실시 형태에서, IgG1 힌지 영역은 하기에 제공되는 서열 번호 63의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, IgG1 힌지 영역은 하기에 제공되는 서열 번호 64의 아미노산 서열을 포함한다. 다른 Ig 아이소타입의 힌지 영역은 잘 알려져 있으며, 이의 아미노산 서열은 예를 들어, ImMunoGeneTics 웹 사이트에서 얻어질 수 있다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 IgG2 힌지 영역이다. 일부 실시 형태에서, IgG2 힌지 영역은 하기에 제공되는 서열 번호 65의 아미노산 서열을 포함한다.

[0325] EPKSCDKTHTCPPCP(서열 번호 63)

[0326] EPKSCDKTHTCPPCPAPELLGG(서열 번호 64)

[0327] ERKCCVECPPCP(서열 번호 65)

[0328] 일부 실시 형태에서, L은 Ig 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함한다. 따라서, 일부 실시 형태에서, L은 Ig 힌지 영역의 적어도 일부 또는 조작된 Ig 힌지 영역의 적어도 일부를 포함한다. 조작된 Ig 힌지 영역은 야생형 Ig 힌지 영역과 비교할 때 하나 이상의 돌연변이를 포함한다. 도입될 수 있는 돌연변이의 비제한적인 예에는 Cys 잔기의 치환(예를 들어, L의 Cys 수를 1개 또는 2개로 감소시키기 위해), Pro 잔기의 치환, 또는 임의의 보존적 변형(예컨대, 보존적 치환)이 포함된다.

[0329] "보존적 변형"은 아미노산 변형을 포함하는 항체의 결합 특성에 유의한 영향을 주지 않거나 그를 변경시키지 않는 아미노산 변형을 지칭한다. 보존적 변형은 아미노산 치환, 첨가, 및 결실을 포함한다. 보존적 아미노산 치환은 아미노산이 유사한 측쇄를 갖는 아미노산 잔기로 대체된 것들이다. 유사한 측쇄를 갖는 아미노산 잔기들의 패밀리는 잘 규정되어 있고, 산성 측쇄(예를 들어, 아스파르트산, 글루탐산), 염기성 측쇄(예를 들어, 라이신, 아르기닌, 히스티딘), 비극성 측쇄(예를 들어, 알라닌, 발린, 류신, 아이소류신, 프롤린, 페닐알라닌, 메티오닌), 비하전된 극성 측쇄(예를 들어, 글리신, 아스파라긴, 글루타민, 시스테인, 세린, 트레오닌, 티로신, 트립토판), 방향족 측쇄(예를 들어, 페닐알라닌, 트립토판, 히스티딘, 티로신), 지방족 측쇄(예를 들어, 글리신, 알라닌, 발린, 류신, 아이소류신, 세린, 트레오닌), 아미드(예를 들어, 아스파라긴, 글루타민), 베타-분지형 측쇄(예를 들어, 트레오닌, 발린, 아이소류신) 및 황-함유 측쇄(시스테인, 메티오닌)를 갖는 아미노산을 포함한다. 추가로, 알라닌 스캐닝(scanning) 돌연변이생성(문헌[MacLennan *et al.*, (1988) *Acta Physiol Scand Suppl* 643:55-67]; 문헌[Sasaki *et al.*, (1988) *Adv Biophys* 35:1-24])에 대해 이전에 기재된 바와 같이, 폴리펩티드 내의 임의의 천연 잔기를 또한 알라닌으로 치환할 수 있다. 아미노산 치환은 알려진 방법에 의해, 예를 들어 PCR 돌연변이생성(미국 특허 제4,683,195호)에 의해 이루어질 수 있다. 생성된 변이체 힌지는 본 발명의 spFv 작제물에 혼입될 수 있고, 공지된 검정 및 본 명세서에 기재된 검정을 사용하여 항원에 대한 결합 및 안정성과 같은 그의 특성에 대해 시험될 수 있다.

[0330] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수이다. 강성을 제공하기 위해 Pro가 L에 포함될 수 있다. 최대 가요성을 허용하기 위해 Gly가 L에 포함될 수 있다. Cys 및 Met를 제외한 임의의 다른 아미노산이 또한 L에 사용될 수 있다.

[0331] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0332] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함한다.

[0333] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPC를 포함한다.

[0334] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGC를 포함한다.

[0335] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSC를 포함한다.

[0336] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPPC(서열 번호 1)를 포함한다.

[0337] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGPC(서열 번호 28)를 포함한다.

[0338] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPGC(서열 번호 29)를 포함한다.

[0339] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGGC(서열 번호 30)를 포함한다.

[0340] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSPG(서열 번호 31)를 포함한다.

[0341] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPSC(서열 번호 32)를 포함한다.

[0342] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSSC(서열 번호 33)를 포함한다.

[0343] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGSC(서열 번호 34)를 포함한다.

[0344] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSGC(서열 번호 35)를 포함한다.

[0345] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPPPC(서열 번호 36)를 포함한다.

[0346] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGPPC(서열 번호 37)를 포함한다.

[0347] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPGPC(서열 번호 38)를 포함한다.

[0348] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPPGC(서열 번호 39)를 포함한다.

[0349] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGGPC(서열 번호 40)를 포함한다.

[0350] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPGGC(서열 번호 41)를 포함한다.

[0351] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGGGC(서열 번호 42)를 포함한다.

[0352] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSPPC(서열 번호 43)를 포함한다.

[0353] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPSPC(서열 번호 44)를 포함한다.

[0354] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPPSC(서열 번호 45)를 포함한다.

[0355] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSSPC(서열 번호 46)를 포함한다.

[0356] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPSSC(서열 번호 47)를 포함한다.

[0357] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSSSC(서열 번호 48)를 포함한다.

[0358] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CGSPC(서열 번호 49)를 포함한다.

[0359] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPGSC(서열 번호 50)를 포함한다.

[0360] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CSGPC(서열 번호 51)를 포함한다.

[0361] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPSGC(서열 번호 52)를 포함한다.

[0362] 일부 실시 형태에서, L은 약 15 내지 약 20개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15 내지 약 20개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0363] 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 16개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 16개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 17개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 17개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 18개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 18개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 20개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 20개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0364] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0365] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0366] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; 여기서, X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0367] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7

의 아미노산 서열을 포함한다.

[0368] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 4의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 5의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0369] 일부 실시 형태에서, L은 약 5 내지 약 10개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 5개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 5개의 아미노산으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, L은 7개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 7개의 아미노산으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, L은 8개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 8개의 아미노산으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, L은 9개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 9개의 아미노산으로 구성된다. 일부 실시 형태에서, L은 약 10개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 10개의 아미노산으로 구성된다.

[0370] 일부 실시 형태에서, L은 후행 세그먼트를 추가로 포함한다. 일부 실시 형태에서, 후행 세그먼트은 4개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, 후행 세그먼트은 5개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0371] 일부 실시 형태에서, L은 9+4+5 구성을 포함한다.

[0372] 일부 실시 형태에서, spFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다. 일부 실시 형태에서, spFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0373] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0374] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0375] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0376] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0377] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0378] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0379] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0380] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0381] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0382] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를

포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0383] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0384] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0385] 본 발명은 또한 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0386] 본 발명은 또한 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0387] 본 발명은 또한 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0388] 본 발명은 또한 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0389] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0390] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0391] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0392] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0393] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0394] 본 발명은 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L43의 의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0395] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 4의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 5의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0396] ***4.1.2. 본 발명의 spFv를 포함하는 분자***

[0397] 본 발명은 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것)를 포함하는 분자를 제공한다. 일부

실시 형태에서, 분자는 다중특이성 분자이다. 일부 실시 형태에서, 분자는 이종 분자이다.

[0398] 다이설파이드 결합(들)이 없는 불안정한 scFv와 유사하게, 본 발명의 spFv는 제2 분자에 접합될 수 있다. 제2 분자의 비제한적인 예에는 반감기 연장 부분, 조영제, 치료제, 다양한 항체 포맷을 포함하는 항체 및 이의 단편, 항원 결합 도메인, Fc 영역 및 면역글로불린 중쇄/경쇄 또는 이의 단편이 포함된다.

[0399] 일부 실시 형태에서, 분자는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하는 단일쇄 가변 단편(scFv)을 포함하며, 여기서 scFv는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함한다.

[0400] 일부 실시 형태에서, 분자는 VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하며, 여기서 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있다.

[0401] 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 7 Å 내지 약 9 Å이다.

[0402] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아(Chothia)에 따른다.

[0403] 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0404] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0405] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L43에 존재한다.

[0406] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0407] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0408] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0409] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0410] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0411] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0412] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0413] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0414] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0415] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0416] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0417] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0418] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0419] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0420] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H5에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0421] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0422] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0423] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0424] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0425] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0426] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0427] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H40에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0428] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0429] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0430] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0431] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0432] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0433] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0434] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H43에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0435] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0436] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0437] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0438] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0439] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0440] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0441] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H46에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0442] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L3에 존재한다.

[0443] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재한다.

[0444] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L39에 존재한다.

[0445] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L42에 존재한다.

[0446] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L45에 존재한다.

[0447] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L100에 존재한다.

[0448] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L102에 존재한다.

[0449] VH 및 VL 영역의 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0450] 일부 실시 형태에서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 비인간 Ig 힌지 영역의 비제한적인 예에는 마우스, 래트, 개, 닭 및 비인간 영장류, 예컨대 원숭이 유래의 것들이 포함된다. 일부 실시 형태에서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래된다. 일부 실시 형태에서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3, IgG4, IgM, IgA 또는 IgE 아이소타입이다.

[0451] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, y는 1 내지 3의 정수이다. 강성을 제공하기 위해 Pro가 링커에 포함될 수 있다. 최대 가요성을 허용하기 위해 Gly가 링커에 포함될 수 있다. Cys 및 Met를 제외한 임의의 다른 아미노산이 또한 L에 사용될 수 있다.

[0452] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수이다.

[0453] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함한다.

[0454] 일부 실시 형태에서, L은 약 15 내지 약 20개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15 내지 약 20개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 14개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 15개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 16개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 16개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 17개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 17개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 18개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 18개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 19개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는다. 일부 실시 형태에서, L은 약 20개의 아미노산을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 약 20개의 아미노산의 길이를 갖는다.

[0455] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0456] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0457] 일부 실시 형태에서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0458] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0459] 일부 실시 형태에서, spFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다. 일부 실시 형태에서, spFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0460] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0461] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0462] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0463] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0464] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는

서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0465] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H5의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0466] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L42의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0467] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L45의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0468] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H3의 Cys를 포함하고; VL은 L39의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0469] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0470] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0471] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0472] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H43의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0473] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0474] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0475] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0476] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H40의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0477] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L100의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0478] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L102의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0479] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하

고; VL은 L5의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0480] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H46의 Cys를 포함하고; VL은 L3의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재한다.

[0481] 일 실시 형태에서, VH, L 및 VL을 포함하는 scFv를 포함하는 분자를 제공하며, 여기서 VH는 H105의 Cys를 포함하고; VL은 L43의 Cys를 포함하며; L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고; scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0482] 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 4의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 5의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0483] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 scFv는 제2 단백질, 폴리뉴클레오티드, 치료제, 세포독성제 또는 검출가능 표지에 접합된다.

[0484] 일부 실시 형태에서, 제2 단백질은 반감기 연장 부분이다.

[0485] 일부 실시 형태에서, 제2 단백질은 항체 또는 이의 단편이다.

[0486] 일부 실시 형태에서, 제2 단백질은 항원 결합 단편이다.

[0487] 일부 실시 형태에서, 제2 단백질은 치료 분자이다.

[0488] 4.1.2.1. 본 발명의 spFv 및 반감기 연장 부분을 포함하는 분자

[0489] 본 발명은 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것) 및 반감기 연장 부분을 포함하는 분자를 제공한다. 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv는 반감기 연장 부분에 접합된다.

[0490] 반감기 연장 부분의 비제한적인 예에는 면역글로불린(Ig), Ig의 단편, Ig 불변 영역, Ig 불변 영역의 단편, Fc 영역, 트랜스페린, 알부민, 알부민 변이체, 알부민 결합 도메인 또는 폴리에틸렌 글리콜(PEG)이 포함된다. 인간 Ig의 아미노산 서열은 잘 알려져 있다. 인간 Ig에는 IgG1, IgG2, IgG3, IgG4, IgM, IgA 및 IgE가 포함된다.

[0491] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 Ig 또는 이의 단편에 접합된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 Fc 영역에 접합된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 트랜스페린에 접합된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 알부민에 접합된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 알부민 결합 단백질에 접합된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 폴리에틸렌 글리콜(PEG)에 접합된다. PEG의 비제한적인 예에는 PEG5000 및 PEG20,000이 포함된다. 일부 실시 형태에서, 본 발명의 spFv는 예를 들어, 원하는 특성을 위해 지방산 또는 지방산 에스테르에 접합된다. 지방산 및 지방산 에스테르의 비제한적인 예에는 라우레이트, 미리스테이트, 스테아레이트, 아라키데이트, 베헤네이트, 올레에이트, 아라키도네이트, 옥탄이산, 테트라데칸이산, 옥타데칸이산, 도코산이산, 폴리라이신, 옥탄, 탄수화물(덱스트란, 셀룰로스, 올리고당 또는 다당류) 등이 포함된다.

[0492] 반감기 연장 부분은 본 발명의 spFv와의 직접 융합체일 수 있으며, 표준 클로닝 및 발현 기술에 의해 생성될 수 있다. 대안적으로, 잘 알려진 화학적 커플링 방법을 사용하여, 본 발명의 재조합적으로 생성된 spFv에 상기 부분을 부착할 수 있다.

[0493] 4.1.2.2. 본 발명의 spFv, 및 치료제, 세포독성제 또는 검출가능 표지를 포함하는 분자

[0494] 본 발명은 치료제, 세포독성제 또는 검출가능 표지에 접합된 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것)를 포함하는 분자를 제공한다.

[0495] 이러한 분자는 시험관내 또는 생체내에서 spFv가 결합하는 항원을 발현하는 세포에 치료제를 안내하거나, 그러한 세포의 사멸을 매개하고, 그러한 세포를 가시화하거나, 확인하고/하거나 정제하는 데 사용될 수 있다.

[0496] 검출가능 표지는, 본 발명의 spFv에 접합될 때, 예를 들어 분광학적, 광화학적, 생화학적, 면역화학적, 또는 화

학적 수단을 통해 spFv를 검출가능하게 하는 조성물을 포함한다.

[0497] 검출가능 표지의 비제한적인 예에는 방사성 동위원소, 자성 비드, 금속 비드, 콜로이드 입자, 형광 염료, 고 전자밀도 시약(electron-dense reagent), 효소(예를 들어, ELISA에서 통상적으로 사용되는 것), 비오틴, 디곡시게닌, 합텐, 발광 분자, 화학발광 분자, 형광색소, 형광단, 형광 켄칭제(fluorescent quenching agent), 착색된 분자, 방사성 동위원소, 신틸레이트(scintillate), 아비딘, 스트렙타비딘, 단백질 A, 단백질 G, 항체 또는 이의 단편, 폴리히스티딘, Ni^{2+}, Flag 태그, myc 태그, 중금속, 효소, 알칼리 포스파타제, 퍼옥시다제, 루시페라제, 전자 공여체/수용체, 아크리디늄 에스테르 및 발색 기질이 포함된다.

[0498] 검출가능 표지는, 예컨대, 검출가능 표지가 방사성 동위원소인 경우, 신호를 자발적으로 방출할 수 있다. 다른 경우에는, 검출가능 표지는 외부장(external field)에 의해 자극된 결과로서 신호를 방출한다.

[0499] 방사성 동위원소의 비제한적인 예에는 γ 방출, 오제(Auger) 방출, β 방출, α 방출 및 양전자 방출 방사성 동위원소가 포함된다. 방사성 동위원소의 비제한적인 예에는 ^{3}H, ^{11}C, ^{13}C, ^{15}N, ^{18}F, ^{19}F, ^{55}Co, ^{57}Co, ^{60}Co, ^{61}Cu, ^{62}Cu, ^{64}Cu, ^{67}Cu, ^{68}Ga, ^{72}As, ^{75}Br, ^{86}Y, ^{89}Zr, ^{90}Sr, ^{94m}Tc, ^{99m}Tc, ^{115}In, ^{123}I, ^{124}I, ^{125}I, ^{131}I, ^{211}At, ^{212}Bi, ^{213}Bi, ^{223}Ra, ^{226}Ra, ^{225}Ac 및 ^{227}Ac가 포함된다.

[0500] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 칼슘, 스칸듐, 티타늄, 바나듐, 크롬, 망간, 철, 코발트, 니켈, 구리, 아연, 갈륨, 게르마늄, 비소, 셀레늄, 브롬, 크립톤, 루비듐, 스트론튬, 이트륨, 지르코늄, 니오븀, 몰리브덴, 테크네튬, 루테늄, 로듐, 팔라듐, 은, 카드뮴, 인듐, 주석, 안티몬, 텔루륨, 요오드, 제논, 세슘, 바륨, 란타늄, 하프늄, 탄탈룸, 텅스텐, 레늄, 오스뮴, 이리듐, 백금, 금, 수은, 탈륨, 납, 비스무트, 프란슘, 라듐, 악티늄, 세륨, 프라세오디뮴, 네오디뮴, 프로메튬, 사마륨, 유로퓸, 가돌리늄, 테르븀, 디스프로슘, 홀뮴, 에르븀, 툴륨, 이터븀, 루테튬, 토륨, 프로트악티늄, 우라늄, 넵투늄, 플루토늄, 아메리슘, 퀴륨, 버클륨, 캘리포늄, 아인슈타이늄, 페르뮴, 멘델레븀, 노벨륨, 또는 로렌슘 원자를 포함하지만, 이에 한정되지 않는 원자 번호가 20보다 큰 금속이다.

[0501] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 원자 번호가 20보다 큰 알칼리 토금속이다.

[0502] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 란탄족 원소이다. 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 악티늄족 원소이다. 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 전이 금속이다. 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 전이후 금속(poor metal)이다. 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 금 원자, 비스무트 원자, 탄탈룸 원자 및 가돌리늄 원자이다.

[0503] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 원자 번호가 53(즉, 요오드) 내지 83(즉, 비스무트)인 금속이다.

[0504] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 자기 공명 영상에 적합한 원자이다.

[0505] 일부 실시 형태에서, 금속 원자는 +1, +2 또는 +3 산화 상태의 형태의 금속 이온, 예컨대 Ba^{2+}, Bi^{3+}, Cs^{+}, Ca^{2+}, Cr^{2+}, Cr^{3+}, Cr^{6+}, Co^{2+}, Co^{3+}, Cu^{+}, Cu^{2+}, Cu^{3+}, Ga^{3+}, Gd^{3+}, Au^{+}, Au^{3+}, Fe^{2+}, Fe^{3+}, F^{3+}, Pb^{2+}, Mn^{2+}, Mn^{3+}, Mn^{4+}, Mn^{7+}, Hg^{2+}, Ni^{2+}, Ni^{3+}, Ag^{+}, Sr^{2+}, Sn^{2+}, Sn^{4+} 및 Zn^{2+}이다. 금속 원자는 산화철, 산화망간 또는 산화가돌리늄을 포함하지만, 이에 한정되지 않는 금속 산화물을 포함할 수 있다.

[0506] 적합한 염료는 5(6)-카르복시플루오레세인, IRDye 680RD 말레이미드, IRDye 800CW, 루테늄 폴리피리딜 염료 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는 임의의 시판용 염료를 포함한다.

[0507] 적합한 형광단은 플루오레세인 아이소티오시아네이트(FITC), 플루오레세인 티오세미카르바지드, 로다민, Texas Red, CyDye(예를 들어, Cy3, Cy5, Cy5.5), Alexa Fluor(예를 들어, Alexa488, Alexa555, Alexa594; Alexa647), 근적외선(NIR)(700 내지 900 nm) 형광 염료, 및 카르보시아닌 및 아미노스티릴 염료를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0508] 검출가능 표지에 접합된 본 명세서에 개시된 scFv를 포함하는 분자는 조영제로서 사용될 수 있다.

[0509] 일부 실시 형태에서, 검출가능 표지는 또한 세포독성제이다. 일부 실시 형태에서, 세포독성제는 화학요법제, 약물, 성장 억제제, 독소(예를 들어, 세균, 진균, 식물 또는 동물 유래의 효소적으로 활성인 독소 또는 이의 단편) 또는 방사성 동위원소(즉, 방사성 접합체(radio-conjugate))이다.

[0510] 일부 실시 형태에서, 세포독성제는 다우노마이신, 독소루비신, 메토트렉세이트, 빈데신, 세균 독소, 예컨대 디

프테리아 독소, 리신(ricin), 겔다나마이신, 메이탄시노이드 또는 칼리케아미신이다. 세포독성제는 튜불린 결합, DNA 결합, 또는 토포아이소머라제 억제를 포함하지만, 이에 한정되지 않는 기전에 의해 그의 세포독성 및 세포분열억제(cytostatic) 효과를 끌어낼 수 있다.

[0511] 일부 실시 형태에서, 세포독성제는 효소적으로 활성인 독소, 예컨대 디프테리아 A 사슬, 디프테리아 독소의 비결합성 활성 단편, 외독소 A 사슬(슈도모나스 아이루기노사(*Pseudomonas aeruginosa*) 유래), 리신 A 사슬, 아브린 A 사슬, 모데신 A 사슬, 알파-사르신, 알레우리테스 포르디이(*Aleurites fordii*) 단백질, 디안틴 단백질, 피토라카 아메리카나(*Phytolaca americana*) 단백질(PAPI, PAPII, 및 PAP-S), 모모르디카 카란티아(*Momordica charantia*) 억제제, 쿠르신, 크로틴, 사파오나리아 오프피시날리스(*Sapaonaria officinalis*) 억제제, 겔로닌, 미토겔린, 레스트릭토신, 페노마이신, 에노마이신, 및 트리코테센이다.

[0512] 일부 실시 형태에서, 세포독성제는 방사성 핵종, 예컨대 ^{212}Bi, ^{131}I, ^{131}In, ^{90}Y, 및 ^{186}Re이다.

[0513] 일부 실시 형태에서, 세포독성제는 돌라스타틴 또는 돌로스타틴 펩티드 유사체 및 유도체, 오리스타틴 또는 모노메틸 오리스타틴 페닐알라닌이다. 예시적인 분자는 미국 특허 제5,635,483호 및 제5,780,588호에 개시되어 있다. 돌라스타틴 및 오리스타틴은 미세소관의 동태, GTP 가수분해, 및 핵 및 세포 분열을 방해하고 항암 및 항진균 활성을 갖는 것으로 밝혀졌다. 돌라스타틴 또는 오리스타틴 약물 부분은 펩티드 약물 부분의 N 말단 또는 C 말단을 통해(예를 들어, 국제 특허 출원 공개 WO02/088172호 참조), 또는 단백질 내로 조작된 임의의 시스테인을 통해 본 명세서에 개시된 scFv에 부착될 수 있다.

[0514] 검출가능 표지에 대한 접합은 공지된 방법을 사용하여 수행될 수 있다.

[0515] 일부 실시 형태에서, 검출가능 표지는 킬레이트제와 복합체를 형성한다.

[0516] 일부 실시 형태에서, 검출가능 표지는 링커를 통해 본 명세서에 개시된 spFv에 접합된다.

[0517] 검출가능 표지 또는 세포독성제는 공지된 방법을 사용하여 본 발명의 spFv에 직접적으로 또는 간접적으로 결합될 수 있다. 적합한 링커가 당업계에 알려져 있으며, 보결분자단(prosthetic group), 비페놀계 링커(N-석신이미딜-벤조에이트의 유도체; 도데카보레이트), 마크로사이클릭 및 비환상 킬레이트제의 킬레이트 부분, 예컨대 1,4,7,10-테트라아자사이클로도데칸-1,4,7,10-테트라아세트산(DOTA)의 유도체, 다이에틸렌트라이아민펜타아세트산(DTPA)의 유도체, S-2-(4-아이소티오시아네이토벤질)-1,4,7-트라이아자사이클로노난-1,4,7-트라이아세트산(NOTA)의 유도체 및 1,4,8,11-테트라아자사이클로도데칸-1,4,8,11-테트라아세트산(TETA)의 유도체, N-석신이미딜-3-(2-피리딜다이티올) 프로피오네이트(SPDP), 이미노티올란(IT), 이미도에스테르의 2기능성 유도체(예컨대 다이메틸 아디피미데이트 HCl), 활성 에스테르(예컨대 다이석신이미딜 수베레이트), 알데하이드(예컨대 글루타르알데하이드), 비스-아지도 화합물(예컨대 비스(p-아지도벤조일)헥산다이아민), 비스-다이아조늄 유도체(예컨대 비스-(p-다이아조늄벤조일)-에틸렌다이아민), 다이아이소시아네이트(예컨대 톨루엔 2,6-다이아이소시아네이트), 및 비스-활성 불소 화합물(예컨대 1,5-다이플루오로-2,4-다이니트로벤젠) 및 다른 킬레이트 부분을 포함지만, 이에 한정되지 않는다. 적합한 펩티드 링커가 잘 알려져 있다.

[0518] 4.1.2.3. 본 발명의 spFv 및 면역글로불린(Ig) 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 분자

[0519] 본 명세서에 개시된 spFv는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편에 접합될 수 있다. 본 발명은 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것) 및 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 분자를 제공한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 Fc 이펙터 기능 C1q 결합, 보체 의존성 세포독성(CDC), Fc 수용체 결합, 항체 의존성 세포 매개 세포독성(ADCC), 식세포작용 또는 세포 표면 수용체(예를 들어, B 세포 수용체; BCR)의 하향 조절을 포함하는 항체 유사 특성을 부여할 수 있다. Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 또한 본 명세서에 기재된 바와 같은 반감기 연장 부분으로서 기능할 수 있다. 본 명세서에 개시된 spFv는 또한 표준 방법을 사용하여 전장 항체 내로 조작될 수 있다. spFv를 포함하는 전장 항체는 본 명세서에 기재된 바와 같이 추가로 조작될 수 있다.

[0520] 면역글로불린 중쇄 불변 영역은 서브도메인 CH1, 힌지, CH2 및 CH3으로 구성된다. 중쇄 상에서 CH1 도메인은 잔기 118 내지 215에 걸쳐 이어져 있고, CH2 도메인은 잔기 231 내지 340에 걸쳐 이어져 있고, CH3 도메인은 잔기 341 내지 447에 걸쳐 이어져 있으며, 잔기 넘버링은 EU 인덱스에 따른다. 일부 경우에, 잔기 341은 CH2 도메인 잔기로 지칭된다. 일부 실시 형태에서, 힌지는 잔기 216을 포함하며, 인간 IgG1의 230에서 종결된다. 일부 실시 형태에서, 힌지는 본 명세서에 기재된 바와 같이 대략 잔기 231부터 대략 잔기 237까지의 하부 힌지 영역을 포함한다. Ig Fc 영역은 Ig 불변 영역의 적어도 CH2 및 CH3 도메인을 포함하며, 따라서 Ig 중쇄 불변 영

역의 적어도 대략 231 내지 447의 영역을 포함한다.

[0521] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역은 중쇄 불변 영역이다.

[0522] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역은 경쇄 불변 영역이다.

[0523] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 Fc 영역을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 CH2 도메인을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 CH3 도메인을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 CH2 도메인 및 CH3 도메인을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 힌지, CH2 도메인, 및 CH3 도메인의 적어도 일부를 포함한다. 힌지의 일부는 Ig 힌지의 하나 이상의 아미노산 잔기를 지칭한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역의 단편은 힌지, CH2 도메인, 및 CH3 도메인을 포함한다.

[0524] 일부 실시 형태에서, spFv는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편의 N 말단에 접합된다. 일부 실시 형태에서, spFv는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편의 C 말단에 접합된다.

[0525] 본 명세서에 개시된 spFv 및 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 분자는 여러 공지된 분석을 사용하여 기능성에 대해 평가될 수 있다. 표적 항원에 대한 결합은 본 명세서에 기재된 방법을 사용하여 평가될 수 있다. Ig 불변 도메인 또는 이의 단편(예를 들어, Fc 영역)에 의해 부여되는 변경된 특성은 FcɣRI, FcɣRII, FcɣRIII 또는 FcRn과 같은 가용성 형태의 수용체를 사용하는 Fc 수용체 결합 분석에서, 또는 예를 들어 ADCC, CDC 또는 ADCP를 측정하는 세포 기반 분석을 사용하여 분석될 수 있다.

[0526] ADCC는 표적 세포로서 본 발명의 spFv가 결합하는 항원을 발현하는 세포를 사용하고 이펙터 세포로서 NK 세포를 사용하는 시험관내 분석을 사용하여 평가될 수 있다. 세포용해는 용해된 세포로부터의 표지(예를 들어, 방사성 기질, 형광 염료 또는 천연 세포내 단백질)의 방출에 의해 검출될 수 있다. 예시적인 분석에서, 표적 세포는 1개의 표적 세포 대 4개의 이펙터 세포의 비율로 사용된다. 표적 세포는 BATDA로 미리 표지되고, 이펙터 세포 및 시험 항체와 배합된다. 샘플을 2시간 동안 인큐베이션하고, 상청액 내로 방출된 BATDA를 측정함으로써 세포 용해를 측정한다. 0.67% Triton X-100(Sigma Aldrich)에 의한 최대 세포독성, 및 임의의 항체의 부재 하에서의 표적 세포로부터의 BATDA의 자발적인 방출에 의해 결정된 최소 대조군에 대해 데이터를 정규화한다.

[0527] ADCP는, 단핵구 유래 대식세포를 이펙터 세포로서 사용하고, 본 명세서에 개시된 spFv가 결합하는 항원을 발현하는 임의의 세포를 GFP 또는 다른 표지된 분자를 발현하도록 조작된 표적 세포로서 사용함으로써 평가될 수 있다. 예시적인 검정에서, 이펙터:표적 세포 비는, 예를 들어 4:1일 수 있다. 이펙터 세포는 본 발명의 항체와 함께 또는 이것 없이 4시간 동안 표적 세포와 인큐베이션될 수 있다. 인큐베이션 후에, 세포는 아큐타제를 사용하여 탈착될 수 있다. 대식세포는 형광 표지에 커플링된 항-CD11b 및 항-CD14 항체로 확인될 수 있으며, % 식세포작용은 표준 방법을 사용하여 $CD11^{+}CD14^{+}$ 대식세포에서의 % GFP 형광에 기초하여 결정될 수 있다.

[0528] 세포의 CDC는, 예를 들어 RPMI-B(1% BSA가 보충된 RPMI) 중에서 1 x 10^{5}개 세포/웰(50 μL/웰)로 다우디(Daudi) 세포를 플레이팅하고, 0 내지 100 μg/mL의 최종 농도로 웰에 50 μL의 시험 단백질을 첨가하고, 실온에서 15분 동안 반응물을 인큐베이션하고, 11 μL의 풀링된(pooled) 인간 혈청을 웰에 첨가하고, 37℃에서 45분 동안 반응물을 인큐베이션함으로써 측정될 수 있다. 용해된 세포의 백분율(%)은 표준 방법을 사용하여 FACS 검정에서 % 프로피듐 요오다이드 염색된 세포로서 검출될 수 있다.

[0529] 일부 실시 형태에서, 분자는 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하며, 여기서 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하며, 분자는 다이설파이드 결합이 없는, 예를 들어 제1 다이설파이드 결합 및 제2 다이설파이드 결합이 없는 분자와 비교하여, 향상된 안정성, 발현 수율 및/또는 품질을 갖는다.

[0530] 일부 실시 형태에서, a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나; c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이

드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있다.

[0531] 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å이다. 일부 실시 형태에서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 7 Å 내지 약 9 Å이다.

[0532] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아(Chothia)에 따른다. 일부 실시 형태에서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0533] 일부 실시 형태에서, VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0534] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0535] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0536] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0537] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0538] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0539] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0540] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0541] VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0542] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0543] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0544] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0545] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0546] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0547] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0548] VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0549] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0550] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0551] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0552] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0553] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0554] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0555] VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0556] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0557] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0558] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0559] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0560] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0561] VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0562] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0563] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0564] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0565] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0566] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0567] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0568] VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0569] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0570] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0571] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0572] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0573] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0574] VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0575] VH Cys는 H105에 존재하고 VL Cys는 L43에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0576] 일부 실시 형태에서, 분자는 CD3에 결합하는 scFv(또는 spFv) 및 BCMA에 결합하는 Fab를 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 125의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 126의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 127의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 VH, L 및 VL을 포함한다. L은 VH와 VL을 연결한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 링커는 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 4의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 5의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함한다. 일부 실시 형태에서, VL은 L43의 Cys를 포함한다. 일부 실시 형태에서, VH는 H105의 Cys를 포함하고, VL은 L43의 Cys를 포함한다. 일부 실시 형태에서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재한다.

[0577] 일부 실시 형태에서, CD3에 결합하는 scFv(또는 spFv)는 Ig 불변 영역에 접합된다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역은 서열 번호 133의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역은 서열 번호 139의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다.

[0578] 일부 실시 형태에서, BCMA에 결합하는 Fab는 VH 및 VL을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab의 VH는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab의 VH는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab의 VL은 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab의 VL은 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, BCMA VH/VL은 서열 번호 132 및 서열 번호 129를 포함한다. 일부 실시 형태에서, Fab의 VH는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하고, Fab의 VL은 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함한다. 다른 실시 형태에서, Fab의 VH는 서열 번호 137 및 서열 번호 129를 포함한다. 일부 실시 형태에서, BCMA VH/VL은 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하고, Fab의 VL은 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함한다. 추가의 실시 형태에서, BCMA VH는 Ig 불변 영역에 접합된다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역은 서열 번호 133의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 분자는 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 폴리펩티드를 포함한다.

[0579] 일부 실시 형태에서, 분자는 이중특이성 분자이다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131 또는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134 또는 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 140, 서열 번호 141, 서열 번호 142 또는 서열 번호 143의 아미

노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0580] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0581] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0582] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0583] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0584] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0585] 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 이중특이성 분자는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함하는 제1 폴리펩티드, 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함하는 제2 폴리펩티드, 및 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함하는 제3 폴리펩티드를 포함한다.

[0586] 4.1.2.4. 본 발명의 spFv를 포함하는 CAR

[0587] 본 발명은 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것)를 포함하는 키메라 항원 수용체(CAR)를 제공한다. 본 발명의 spFv를 포함하는 CAR은 이의 세포외 도메인으로서, 하나 이상의 본 발명의 scFv를 포함하는 단일특이성 또는 다중특이성 CAR일 수 있다.

[0588] 키메라 항원 수용체(CAR)는 유전자 조작된 수용체이다. 이들 조작된 수용체는 당업계에 알려진 기법에 따라 T 세포를 포함한 면역 세포 내로 용이하게 삽입되고 이에 의해 발현될 수 있다. CAR의 경우, 단일 수용체가 특정 항원을 인식하여, 그 항원에 결합될 때 면역 세포를 활성화하여 그 항원을 보유하는 세포를 공격하고 파괴하도록 프로그래밍될 수 있다. 이들 항원이 표적 세포 상에 존재하는 경우, CAR을 발현하는 면역 세포는 표적 세포

를 표적화하고 사멸할 수 있다.

[0589] 일부 실시 형태에서, CAR은 항원에 결합하는 세포외 도메인, 임의의 링커, 막관통 도메인, 및 신호전달 도메인을 포함하는 세포내 도메인을 포함한다.

[0590] CAR의 세포외 도메인은 원하는 항원에 결합하는 임의의 폴리펩티드를 포함할 수 있다. 일부 실시 형태에서, CAR의 세포외 도메인은 본 명세서에 개시된 scFv(또는 spFv)를 포함한다. CAR은 또한, 탠덤 형태로 배열되고 링커 서열에 의해 분리될 수 있는 2개 이상의 원하는 항원에 결합하도록 조작될 수 있다. 예를 들어, 하나 이상의 본 발명의 scFv(또는 spFv), 도메인 항체, 라마(llama) VHH 항체 또는 다른 VH 단독 항체 단편이 링커를 통해 탠덤으로 조직화되어 이중특이성 또는 다중특이성 CAR을 생성할 수 있다.

[0591] CAR의 막관통 도메인은 CD8, T 세포 수용체의 알파, 베타 또는 제타 사슬, CD28, CD3 엡실론, CD45, CD4, CD5, CD9, CD16, CD22, CD33, CD37, CD64, CD80, CD86, CD134, CD137, CD154, KIRDS2, OX40, CD2, CD27, LFA-1(CD11a, CD18), ICOS(CD278), 4-1BB(CD137), 4-1BBL, GITR, CD40, BAFFR, HVEM(LIGHTR), SLAMF7, NKp80(KLRFI), CD19, IL2R 베타, IL2R 감마, IL7Ra, ITGA1, VLA1, CD49a, ITGA4, IA4, CD49D, ITGA6, VLA-6, CD49f, ITGAD, CD11d, ITGAE, CD103, ITGAL, ITGAM, CD11b, ITGAX, CD11c, ITGB1, CD29, ITGB2, CD18, ITGB7, TNFR2, DNAM1(CD226), SLAMF4(CD244, 2B4), CD84, CD96(촉각(Tactile)), CEACAM1, CRT AM, Ly9(CD229), CD160(BY55), PSGL1, CD100(SEMA4D), SLAMF6(NTB-A, Ly108), SLAM(SLAMF1, CD150, IPO-3), BLAME(SLAMF8), SELPLG(CD162), LTBR, PAG/Cbp, NKp44, NKp30, NKp46, NKG2D, 및/또는 NKG2C의 막관통 도메인으로부터 유래될 수 있다.

[0592] 일부 실시 형태에서, CAR의 세포내 도메인은 공자극 도메인을 추가로 포함한다. 공자극 도메인은 하나 이상의 공자극 분자의 세포내 도메인으로부터 유래될 수 있다. 공자극 분자는 항원에 결합 시에 T 림프구의 효율적인 활성화 및 기능에 필요한 제2 신호를 제공하는, 항원 수용체 또는 Fc 수용체 이외의 잘 알려진 세포 표면 분자이다. 공자극 분자의 비제한적인 예에는 4-1BB, CD2, CD7, CD27, CD28, CD30, CD40, CD54(ICAM), CD83, CD134(OX40), CD150(SLAMF1), CD152(CTLA4), CD223(LAG3), CD270(HVEM), CD278(ICOS), DAP10, LAT, NKD2C SLP76, TRIM, 및 ZAP70이 포함된다.

[0593] CAR의 세포내 도메인은 예를 들어, CD3ζ, CD3ε, CD22, CD79a, CD66d 또는 CD39의 신호전달 도메인으로부터 유래될 수 있다. CAR의 세포내 도메인은 표적 항원에 대한 효과적인 CAR 결합의 메시지를 면역 이펙터 세포의 내부로 전달하여 이펙터 세포 기능, 예를 들어 활성화, 사이토카인 생성, 증식 및 세포독성 활성 - CAR 결합된 표적 세포로의 세포독성 인자의 방출을 포함함 -, 또는 세포외 CAR 도메인에 대한 항원 결합 후에 유도되는 다른 세포 반응을 유도하는 데 관여하는 CAR 폴리펩티드의 일부를 지칭한다.

[0594] 일부 실시 형태에서, 링커는 세포외 도메인과 막관통 도메인 상이에 위치한다. 일부 실시 형태에서, 링커는 약 2 내지 100개의 아미노산 길이의 폴리펩티드이다. 링커는 인접한 단백질 도메인들이 서로에 대해 자유롭게 이동하도록 글리신 및 세린과 같은 가요성 잔기를 포함하거나 이로 구성될 수 있다. 2개의 인접한 도메인이 서로 입체적으로 방해하지 않도록 하는 것이 바람직한 경우에는 더 긴 링커가 사용될 수 있다. 링커는 절단 가능하거나 절단 가능하지 않을 수 있다. 예시적인 절단가능한 링커는 2A를 포함한다.

[0595] 예시적인 CAR은 본 발명의 scFv(또는 spFv)를 포함하는 세포외 도메인, CD8의 막관통 도메인을 포함하는 막관통 도메인 및 CD3ζ의 신호전달 도메인을 포함하는 세포내 도메인을 포함한다. 예시적인 CAR은 본 발명의 scFv(또는 spFv)를 포함하는 세포외 도메인, CD8의 막관통 도메인 또는 CD28의 막관통 도메인을 포함하는 막관통 도메인 및 CD3ζ의 신호전달 도메인을 포함하는 세포내 도메인 및 CD28의 세포내 도메인, 4-1BB의 세포내 도메인 또는 OX40의 세포내 도메인을 포함하는 공자극 도메인을 포함한다.

[0596] CAR은 표준 분자 생물학 기법에 의해 생성된다.

[0597] 일부 실시 형태에서, 분자는 단일특이성이다.

[0598] 일부 실시 형태에서, 분자는 다중특이성이다.

[0599] 일부 실시 형태에서, 분자는 이중특이성이다.

[0600] 일부 실시 형태에서, 분자는 삼중특이성이다.

[0601] 일부 실시 형태에서, 분자는 사중특이성이다.

[0602] 일부 실시 형태에서, **표 18**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공

된다. 다른 실시 형태에서, **표 18**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 일부 실시 형태에서, **표 19**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 다른 실시 형태에서, **표 19**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 일부 실시 형태에서, **표 20**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 다른 실시 형태에서, **표 20**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 일부 실시 형태에서, **표 21**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 다른 실시 형태에서, **표 21**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 일부 실시 형태에서, **표 22**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 다른 실시 형태에서, **표 22**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 일부 실시 형태에서, **표 23**에 제공된 원자 좌표에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다. 다른 실시 형태에서, **표 23**에 제공된 원자 좌표의 하나 이상의 서브세트에 의해 정의된 scFv(예를 들어, spFv) 구조가 본 명세서에 제공된다.

[0603] **4.2. 본 발명의 spFv를 포함하는 분자의 생성**

[0604] 본 명세서에 개시된 spFv는 공지된 재조합 기술, 발현 및 정제 프로토콜을 사용하여 임의의 공지된 포맷의 분자 내로 조작될 수 있다.

[0605] 본 명세서에 개시된 spFv는 2개의 반쪽 분자의 안정성을 촉진하는 CH3 도메인 내의 하나 이상의 돌연변이를 갖는 전장 다중특이성 항체 내로 조작될 수 있다. 이들 다중특이성 항체는 Fab 아암 교환을 사용하여 또는 다양한 사슬의 동시-발현에 의해 시험관내에서 생성될 수 있다. 시험관내 Fab 아암 교환의 경우, 2개의 단일특이성 2가 항체는 CH3 도메인 내에 하나 이상의 치환을 갖도록 조작되고, 항체는 힌지 영역 내의 시스테인이 다이설파이드 결합 이성질화를 거치기에 충분한 환원 조건 하에서 함께 인큐베이션되어; Fab 아암 교환에 의해 다중특이성 항체를 생성한다. 인큐베이션 조건은 비환원성 상태로 최적으로 회복될 수 있다. 사용될 수 있는 환원제의 비제한적인 예에는 2-메르캅토에틸아민(2-MEA), 다이티오트레이톨(DTT), 다이티오에리트리톨(DTE), 글루타티온, 트리스(2-카르복시에틸)포스핀(TCEP), L-시스테인 및 베타-메르캅토에탄올이 포함된다. 일부 실시 형태에서, 환원제는 2-메르캅토에틸아민, 다이티오트레이톨 및 트리스(2-카르복시에틸)포스핀(TCEP)으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 예를 들어, pH 5 내지 8에서, 예를 들어 pH 7.0에서 또는 pH 7.4에서 적어도 25 mM 2-MEA의 존재 하에서 또는 적어도 0.5 mM 다이티오트레이톨의 존재 하에서 20℃ 이상의 온도에서 90분 이상 동안의 인큐베이션이 사용될 수 있다.

[0606] 사용될 수 있는 CH3 돌연변이는 노브-인-홀(Knob-in-Hole) 돌연변이(Genentech), 정전기적으로 매칭된 돌연변이(Chugai, Amgen, NovoNordisk, Oncomed), SEEDbody(Strand Exchange Engineered Domain body)(EMD Serono), Duobody® 돌연변이(Genmab) 및 다른 비대칭 돌연변이(예를 들어, Zymeworks)와 같은 기술을 포함한다.

[0607] 노브-인-홀 돌연변이는, 예를 들어 국제 특허 출원 공개 WO1996/027011호에 개시되어 있으며, CH3 영역의 계면 상의 돌연변이를 포함하는데, 여기서는 작은 측쇄(홀)를 갖는 아미노산이 제1 CH3 영역 내로 도입되고 큰 측쇄(노브)를 갖는 아미노산이 제2 CH3 영역 내로 도입되어, 그 결과 제1 CH3 영역과 제2 CH3 영역 사이의 우선적인 상호작용을 가져온다. 노브와 홀을 형성하는 CH3 영역 돌연변이의 비제한적인 예에는 T366Y/F405A, T366W/F405W, F405W/Y407A, T394W/Y407T, T394S/Y407A, T366W/T394S, F405W/T394S 및 T366W/T366S_L368A_Y407V가 포함된다.

[0608] 중쇄 이종이량체 형성은 미국 특허 출원 공개 제2010/0015133호, 미국 특허 출원 공개 제2009/0182127호, 미국 특허 출원 공개 제2010/028637호 또는 미국 특허 출원 공개 제2011/0123532호에 기재된 바와 같이 제1 CH3 영역 상에 양으로 하전된 잔기를 그리고 제2 CH3 영역 상에 음으로 하전된 잔기를 치환함으로써 정전기 상호작용을 사용하여 촉진될 수 있다.

[0609] 중쇄 헤테로이량체화를 촉진하기 위해 사용될 수 있는 다른 비대칭 돌연변이는 미국 특허 출원 공개 제2012/0149876호 또는 미국 특허 출원 공개 제2013/0195849호(Zymeworks)에 기재된 바와 같은, L351Y_F405A_Y407V/T394W, T366I_K392M_T394W/F405A_Y407V, T366L_K392M_T394W/F405A_Y407V, L351Y_Y407A/T366A_K409F, L351Y_Y407A/T366V_K409F, Y407A/T366A_K409F, 또는 T350V_L351Y_F405A_Y407V/T350V_T366L_K392L_T394W를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0610] SEEDbody 돌연변이는 미국 특허 출원 공개 제20070287170호에 기재된 바와 같이, 선택된 IgG 잔기를 IgA 잔기로 치환하여 중쇄 헤테로이량체화를 촉진하는 것을 수반한다.

[0611] 사용될 수 있는 다른 예시적인 돌연변이는 국제 특허 출원 공개 WO2007/147901호, WO 2011/143545호, WO2013/157954호, WO2013/096291호 및 미국 특허 출원 공개 제2018/0118849호에 기재된 바와 같은, R409D_K370E/D399K_E357K, S354C_T366W/Y349C_T366S_L368A_Y407V, Y349C_T366W/S354C_T366S_L368A_Y407V, T366K/L351D, L351K/Y349E, L351K/Y349D, L351K/L368E, L351Y_Y407A/T366A_K409F, L351Y_Y407A/T366V_K409F, K392D/D399K, K392D/E356K, K253E_D282K_K322D/D239K_E240K_K292D, K392D_K409D/D356K_D399K를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0612] Duobody® 돌연변이(Genmab)는, 예를 들어 미국 특허 출원 공개 제2014/0303356호에 개시되어 있으며, 돌연변이 F405L/K409R, 야생형/F405L_R409K, T350I_K370T_F405L/K409R, K370W/K409R, D399AFGHILMNRSTVWY/K409R, T366ADEFGHILMQVY/K409R, L368ADEGHNRSTVQ/K409AGRH, D399FHKRQ/K409AGRH, F405IKLSTVW/K409AGRH 및 Y407LWQ/K409AGRH를 포함한다.

[0613] 본 명세서에 개시된 spFv가 혼입될 수 있는 추가의 이중특이성 또는 다중특이성 구조는 이중 가변 도메인 면역글로불린(DVD)(국제 특허 출원 공개 WO2009/134776호; DVD는 구조 VH1-링커-VH2-CH를 갖는 중쇄 및 구조 VL1-링커-VL2-CL을 갖는 경쇄를 포함하는 전장 항체임; 링커는 임의적임), 류신 지퍼 또는 콜라겐 이량체화 도메인과 같은, 상이한 특이성을 갖는 2개의 항체 아암을 연결하기 위한 다양한 이량체화 도메인을 포함하는 구조(국제 특허 출원 공개 WO2012/022811호; 미국 특허 제5,932,448호; 미국 특허 제6,833,441호), 함께 접합된 2개 이상의 도메인 항체(dAb), 다이아바디, 중쇄 단독 항체, 예컨대 낙타과 항체 및 조작된 낙타과 항체, 이중 표적화(DT)-Ig(GSK/Domantis), 투-인-원 항체(Two-in-one Antibody)(Genentech), 가교-결합된 Mab(Karmanos Cancer Center), mAb2(F-Star) 및 CovX-바디(CovX/Pfizer), IgG-유사 이중특이체(InnClone/Eli Lilly), Ts2Ab(MedImmune/AZ) 및 BsAb(Zymogenetics), HERCULES(Biogen Idec) 및 TvAb(Roche), scFv/Fc 융합체(Academic Institution), SCORPION(Emergent BioSolutions/Trubion, Zymogenetics/BMS), 이중 친화성 재표적화 기술(Fc-DART)(MacroGenics) 및 이중$(scFv)_2$-Fab(National Research Center for Antibody Medicine--China), 이중-작용(Dual-Action) 또는 Bis-Fab(Genentech), 독-앤드-록(Dock-and-Lock)(DNL)(ImmunoMedics), 2가 이중특이성(Biotecnol), 및 Fab-Fv(UCB-Celltech)를 포함한다. scFv-, 다이아바디-기반 및 도메인 항체는 이중특이성 T 세포 인게이저(BiTE) (Micromet), 탠덤 다이아바디(Tandab) (Affimed), 이중 친화성 재표적화 기술(DART) (MacroGenics), 단일쇄 다이아바디(Academic), TCR-유사 항체(AIT, ReceptorLogics), 인간 혈청 알부민 scFv 융합체(Merrimack) 및 COMBODY(Epigen Biotech), 이중 표적화 나노바디(Ablynx), 이중 표적화 중쇄 단독 도메인 항체를 포함하지만 이로 한정되지 않는다.

[0614] 본 발명의 scFv(또는 spFv)는 또한 3개의 항원 결합 도메인을 포함하는 다중특이성 분자로 조작될 수 있다. 그러한 설계에서, 적어도 하나의 항원 결합 도메인은 본 발명의 scFv(또는 spFv)의 형태이다. 예시적인 설계는 다음을 포함한다(여기서 "1"은 제1 항원 결합 도메인을 나타내고, "2"는 제2 항원 결합 도메인을 나타내고, "3"은 제3 항원 결합 도메인을 나타냄):

[0615] 설계 1: 사슬 A) scFv1- CH2-CH3; 사슬 B) VL2-CL; 사슬 C) VH2-CH1-힌지-CH2-CH3

[0616] 설계 2: 사슬 A) scFv1- 힌지- CH2-CH3; 사슬 B) VL2-CL; 사슬 C) VH2-CH1-힌지-CH2-CH3

[0617] 설계 3: 사슬 A) scFv1-CH1-힌지-CH2-CH3; 사슬 B) VL2-CL; 사슬 C) VH2-CH1-힌지-CH2-CH3

[0618] 설계 4: 사슬 A) CH2-CH3-scFv1; 사슬 B) VL2-CL; 사슬 C) VH2-CH1-힌지-CH2-CH3

[0619] 미국 특허 출원 공개 제2012/0149876호 또는 미국 특허 출원 공개 제2013/0195849호(Zymeworks)에 기재된 바와 같은, 돌연변이 L351Y_F405A_Y407V/T394W, T366I_K392M_T394W/F405A_Y407V, T366L_K392M_T394W/F405A_Y407V, L351Y_Y407A/T366A_K409F, L351Y_Y407A/T366V_K409F, Y407A/T366A_K409F, 또는 T350V_L351Y_F405A_Y407V/T350V_T366L_K392L_T394W를 포함하지만, 이에 한정되지 않는 CH3 조작이 설계 1 내지 설계 4 내로 도입될 수 있다.

[0620] **4.3. 아이소타입, 알로타입 및 Fc 조작**

[0621] 본 명세서에 개시된 분자에 존재하는 Fc 영역과 같은 Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 임의의 알로타입 또는 아이소타입일 수 있다.

[0622] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 IgG1 아이소타입이다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 IgG2 아이소타입이다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 IgG3 아이소타입이다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 IgG4 아이소타입이다.

[0623] Ig 불변 영역 또는 이의 단편은 임의의 알로타입이다. 일부 실시 형태에서, 알로타입은 Ig 불변 영역의 특성, 예컨대 결합 또는 Fc 매개 이펙터 기능에 영향을 미치지 않는다. Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 치료용 단백질의 면역원성은 주입 반응의 위험성 증가 및 치료 반응의 지속 기간의 감소와 관련이 있다(문헌 [Baert *et al.*, (2003) *N Engl J Med* 348:602-608]). Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 치료용 단백질이 숙주에서 면역 반응을 유도하는 정도는 Ig 불변 영역의 알로타입에 의해 부분적으로 결정될 수 있다(문헌 [Stickler *et al.*, (2011) *Genes and Immunity* 12:213-221]). Ig 불변 영역 알로타입은 항체의 불변 영역 서열의 특정 위치에서의 아미노산 서열 변이와 관련이 있다. **표 3**은 선택된 IgG1, IgG2, 및 IgG4 알로타입을 나타낸다.

[0624] [표 3]

선택된 IgG1, IgG2 및 IgG4 알로타입

알로타입	다양성 위치에서의 아미노산 잔기(잔기 넘버링: EU 인덱스)							
	IgG2		IgG4		IgG1			
	189	282	309	422	214	356	358	431
G2m(n)	T	M						
G2m(n-)	P	V						
G2m(n)/(n-)	T	V						
nG4m(a)			L	R				
G1m(17)					K	E	M	A
G1m(17,1)					K	D	L	A

[0625]

[0626] C-말단 라이신(CTL)은 혈류 중의 내인성 순환 카르복시펩티다제에 의해 Ig 불변 영역으로부터 제거될 수 있다(문헌[Cai *et al.*, (2011) *Biotechnol Bioeng* 108:404-412]). 제조 동안, 미국 특허 출원 공개 제2014/0273092호에 기재된 바와 같이, 세포외 Zn^{2+}, EDTA 또는 EDTA - Fe^{3+}의 농도의 제어에 의해 CTL 제거가 최대 수준 미만으로 제어될 수 있다. 단백질의 CTL 함량은 알려진 방법을 사용하여 측정될 수 있다.

[0627] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역에 접합된 spFv는 C 말단 라이신 함량이 약 10% 내지 약 90%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 20% 내지 약 80%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 40% 내지 약 70%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 50% 내지 약 80%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 60% 내지 약 80%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 50% 내지 약 70%이다. 일부 실시 형태에서, C 말단 라이신 함량은 약 60% 내지 약 70%이다. 일부 실시 형태에서, C-말단 라이신 함량은 약 55% 내지 약 70%이다. 일부 실시 형태에서, C-말단 라이신 함량은 약 60%이다.

[0628] Fc 영역 돌연변이는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자에 대해 이루어져서, 그의 이펙터 기능, 예컨대 ADCC, ADCP 및/또는 ADCP 및/또는 약동학적 특성을 조절한다. 이것은 돌연변이(들)를 Fc에 도입하여, 돌연변이된 Fc의 활성화 FcγR(FcγRI, FcγRIIa, FcγRIII), 억제성 FcγRIIb 및/또는 FcRn에의 결합을 조절함으로써 달성될 수 있다.

[0629] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편에 적어도 하나의 돌연변이를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 적어도 하나의 돌연변이가 Fc 영역 내에 있다.

[0630] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 Fc 영역 내에 적어도 1개, 2개, 3개, 4개, 5개, 6개, 7개, 8개, 9개, 10개, 11개, 12개, 13개, 14개 또는 15개의 돌연변이를 포함한다.

[0631] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 FcRn에 대한 분자의 결합을 조절하는 Fc 영역 내에 적어도 하나의 돌연변이를 포함한다.

[0632] 반감기를 조절하기 위해 돌연변이될 수 있는 Fc 위치(예를 들어, FcRn에 대한 결합)는 위치 250, 252, 253, 254, 256, 257, 307, 376, 380, 428, 434 및 435를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 단독으로 또는 조합하여 이루어질 수 있는 돌연변이의 비제한적인 예에는 돌연변이 T250Q, M252Y, I253A, S254T, T256E, P257I, T307A, D376V, E380A, M428L, H433K, N434S, N434A, N434H, N434F, H435A 및 H435R이 포함된다. 반감기를 증가시키기 위해 이루어질 수 있는 단독 또는 조합 돌연변이의 비제한적인 예에는 돌연변이 M428L/N434S, M252Y/S254T/T256E, T250Q/M428L, N434A 및 T307A/E380A/N434A가 포함된다. 반감기를 감소시키기 위해 이루어

질 수 있는 단독 또는 조합 돌연변이의 비제한적인 예에는 돌연변이 H435A, P257I/N434H, D376V/N434H, M252Y/S254T/T256E/H433K/N434F, T308P/N434A 및 H435R이 포함된다.

[0633] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 Fc 영역 내에 M252Y/S254T/T256E 돌연변이를 포함한다.

[0634] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 활성화 Fcɣ 수용체(FcɣR)에 대한 분자의 결합을 감소시키고/시키거나 Fc 이펙터 기능, 예컨대 C1q 결합, 보체 의존성 세포독성(CDC), 항체 의존성 세포 매개 세포독성(ADCC) 또는 식작용(ADCP)을 감소시키는 하나 이상의 돌연변이를 Fc 영역 내에 포함한다.

[0635] 활성화 FcɣR에 대한 본 명세서에 개시된 분자의 결합을 감소시키고 후속으로 이펙터 기능을 감소시키도록 돌연변이될 수 있는 Fc 위치는 위치 214, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 265, 267, 268, 270, 295, 297, 309, 327, 328, 329, 330, 331 및 365를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 단독으로 또는 조합하여 이루어질 수 있는 돌연변이의 비제한적인 예에는 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4에서의 돌연변이 K214T, E233P, L234V, L234A, G236의 결실, V234A, F234A, L235A, G237A, P238A, P238S, D265A, D265S, S267E, H268A, H268Q, Q268A, N297A, A327Q, P329A, D270A, Q295A, V309L, A327S, L328F, A330S 및 P331S가 포함된다. 감소된 ADCC를 가져오는 조합 돌연변이의 비제한적인 예에는 IgG1 상의 돌연변이 L234A/L235A, IgG1 상의 돌연변이 L234A/L235A/D265S, IgG2 상의 돌연변이 V234A/G237A/P238S/H268A/V309L/A330S/P331S, IgG4 상의 돌연변이 F234A/L235A, IgG4 상의 돌연변이 S228P/F234A/ L235A, 모든 Ig 아이소타입 상의 돌연변이 N297A, IgG2 상의 돌연변이 V234A/G237A, IgG1 상의 돌연변이 K214T/E233P/ L234V/L235A/G236-결실/A327G/P331A/D365E/L358M, IgG2 상의 돌연변이 H268Q/V309L/ A330S/P331S, IgG1 상의 돌연변이 S267E/L328F, IgG1 상의 돌연변이 L234F/L235E/D265A, IgG1 상의 돌연변이 L234A/L235A/G237A/P238S/H268A/A330S/P331S, IgG4 상의 돌연변이 S228P/F234A/L235A/G237A/P238S 및 IgG4 상의 돌연변이 S228P/F234A/L235A/G236-결실/G237A/P238S가 포함된다. IgG2로부터의 잔기 117 내지 260 및 IgG4로부터의 잔기 261 내지 447을 갖는 Fc와 같은 하이브리드 IgG2/4 Fc 도메인이 또한 사용될 수 있다.

[0636] 감소된 CDC를 가져오는 예시적인 돌연변이는 K322A 돌연변이이다. S228P 돌연변이가, IgG4 안정성을 향상시키기 위해 IgG4에서 이루어질 수 있다.

[0637] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 Fc 영역 내의 하나 이상의 돌연변이를 포함하며, 여기서 하나 이상의 돌연변이는 K214T, E233P, L234V, L234A, G236의 결실, V234A, F234A, L235A, G237A, P238A, P238S, D265A, S267E, H268A, H268Q, Q268A, N297A, A327Q, P329A, D270A, Q295A, V309L, A327S, L328F, A330S 및 P331S로 이루어진 군으로부터 선택된다. 일부 실시 형태에서, 하나 이상의 돌연변이는 L234A, L235A, D265S를 포함한다. 일부 실시 형태에서, 하나 이상의 돌연변이는 L234A 또는 L235A를 포함한다.

[0638] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 분자는 FcɣR에 대한 분자의 결합을 향상시키고/시키거나 Fc 이펙터 기능, 예컨대 C1q 결합, 보체 의존성 세포독성(CDC), 항체 의존성 세포 매개 세포독성(ADCC) 및/또는 식작용(ADCP)을 향상시키는 하나 이상의 돌연변이를 Fc 영역 내에 포함한다.

[0639] 활성화 FcɣR에 대한 분자의 결합을 증가시키고/시키거나 Fc 이펙터 기능을 향상시키도록 돌연변이될 수 있는 Fc 위치는 위치 236, 239, 243, 256,290,292, 298, 300, 305, 312, 326, 330, 332, 333, 334, 345, 360, 339, 378, 396 또는 430(잔기 넘버링은 EU 인덱스에 따름)을 포함한다. 단독으로 또는 조합하여 이루어질 수 있는 돌연변이의 비제한적인 예에는 G236A, S239D, F243L, T256A, K290A, R292P, S298A, Y300L, V305L, K326A, A330K, I332E, E333A, K334A, A339T 및 P396L이 포함된다. ADCC 또는 ADCP를 증가시키는 조합 돌연변이의 비제한적인 예에는 S239D/I332E, S298A/E333A/K334A, F243L/R292P/Y300L, F243L/R292P/Y300L/P396L, F243L/R292P/Y300L/V305I/P396L 및 G236A/S239D/I332E가 포함된다.

[0640] CDC를 향상시키도록 돌연변이될 수 있는 Fc 위치는 위치 267, 268, 324, 326, 333, 345 및 430을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 단독으로 또는 조합하여 이루어질 수 있는 돌연변이의 비제한적인 예에는 S267E, F1268F, S324T, K326A, K326W, E333A, E345K, E345Q, E345R, E345Y, E430S, E430F 및 E430T가 포함된다. CDC를 증가시키는 조합 돌연변이의 비제한적인 예에는 K326A/E333A, K326W/E333A, H268F/S324T, S267E/H268F, S267E/S324T 및 S267E/H268F/S324T가 포함된다.

[0641] 일부 실시 형태에서, 돌연변이는 야생형 IgG1, 야생형 IgG2 또는 야생형 IgG4에 존재한다. 일부 실시 형태에서, 야생형 IgG1은 하기에 제공되는 서열 번호 66의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 야생형 IgG2는 하기에 제공되는 서열 번호 67의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, 야생형 IgG4는 하기에 제공되는 서열 번호 68의 아미노산 서열을 포함한다.

[0642] ASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTQTYICNVNHKPSNTKVDKKVEPKS CDKTHTCPPCPAPELLGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVDVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKC KVSNKALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSRDELTKNQVSLTCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVF SCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK(서열 번호 66)

[0643] ASTKGPSVFPLAPCSRSTSESTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSNFGTQTYTCNVDHKPSNTKVDKTVERKC CVECPPCPAPPVAGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVDVSHEDPEVQFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQFNSTFRVVSVLTVVHQDWLNGKEYKCKVSN KGLPAPIEKTISKTKGQPREPQVYTLPPSREEMTKNQVSLTCLVKGFYPSDISVEWESNGQPENNYKTTPPMLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVFSCSV MHEALHNHYTQKSLSLSPGK(서열 번호 67)

[0644] ASTKGPSVFPLAPCSRSTSESTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTKTYTCNVDHKPSNTKVDKRVESKY GPPCPSCPAPEFLGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVDVSQEDPEVQFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQFNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVS NKGLPSSIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSQEEMTKNQVSLTCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLYSRLTVDKSRWQEGNVFSCS VMHEALHNHYTQKSLSLSLGK(서열 번호 68)

[0645] FcγR 또는 FcRn에 대한 본 명세서에 개시된 분자의 결합은 유세포 측정을 사용하여 각각의 수용체를 발현하도록 조작된 세포에서 평가될 수 있다.

[0646] **4.4. 당조작(glycoengineering)**

[0647] ADCC를 매개하는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자의 능력은 Ig 불변 영역 또는 이의 단편의 올리고당 성분을 조작함으로써 향상될 수 있다. 인간 IgG1 또는 IgG3은 잘 알려진 바이안테나리(biantennary) G0, G0F, G1, G1F, G2 또는 G2F 형태의 글리칸의 대부분에 의해 Asn297에서 N-글리코실화된다. 조작되지 않은 CHO 세포에 의해 생성될 수 있는 Ig 불변 영역 함유 단백질은 전형적으로 적어도 약 85%의 글리칸 푸코스 함량을 갖는다. Ig 불변 영역 또는 이의 단편에 부착된 바이안테나리 복합형(complex-type) 올리고당으로부터의 코어(core) 푸코스의 제거는, 항원 결합 또는 CDC 활성을 변경시키지 않고서, 개선된 FcγRIIIa 결합을 통해 분자의 ADCC를 향상시킨다. 그러한 분자는 바이안테나리 복합형의 Fc 올리고당을 보유하는 비교적 높은 탈푸코실화 면역글로불린의 성공적인 발현을 유발하는 것으로 보고된 상이한 방법, 예컨대 배양 삼투압의 제어(문헌[Konno *et al.,* (2012) *Cytotechnology* 64:249-265]), 숙주 세포주로서의 변이체 CHO 세포주 Lec13의 적용(문헌[Shields *et al.,*(2002) *J Biol Chem* 277:26733-26740]), 숙주 세포주로서의 변이체 CHO 세포주 EB66의 적용(문헌[Olivier *et al.,* (2010) *MAbs*;2: 405-415]), 숙주 세포주로서의 래트 하이브리도마 세포주 YB2/0의 적용(문헌[Shinkawa *et al.,* (2003) J Biol Chem 278:3466-3473]), 1,6-푸코실트랜스퍼라제(*FUT8*) 유전자에 대해 특이적인 작은 간섭 RNA의 도입(문헌[Mori *et al.,* (2004) *Biotechnol Bioeng* 88:901-908]), 또는 β-1,4-*N*-아세틸글루코사미닐트랜스퍼라제 III 및 골지 α-만노시다제 II 또는 강력한 알파-만노시다제 I 억제제, 키푸넨신의 동시발현(문헌[Ferrara *et al.,* (2006) *J Biol Chem* 281:5032-5036])을 사용하여 달성될 수 있다.

[0648] 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자는 푸코스 함량이 약 1% 내지 약 15%, 예를 들어 약 15%, 14%, 13%, 12%, 10%, 9%, 8%, 7%, 6%, 5%, 4%, 3%, 2% 또는 1%인 바이안테나리 글리칸 구조를 갖는다. 일부 실시 형태에서, Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자는 푸코스 함량이 약 50%, 40%, 45%, 40%, 35%, 30%, 25% 또는 20%인 글리칸 구조를 갖는다.

[0649] "푸코스 함량"은 Asn297에서의 당 사슬 내의 푸코스 단당의 양을 지칭한다. 푸코스의 상대량은 모든 당구조(glycostructure)에 대한 푸코스-함유 구조의 백분율이다. 이들은, 예를 들어 하기와 같은 다수의 방법에 의해 특성화 및 정량화될 수 있다: 1) 국제 특허 출원 공개 WO2008/077546호에 기재된 바와 같이 N-글리코시다제 F 처리된 샘플(예를 들어, 복합, 하이브리드, 및 올리고- 및 고-만노스 구조)의 MALDI-TOF를 사용하는 방법; 2) Asn297 글리칸의 효소적 방출을 행하고, 후속으로, 유도체화하고, 형광 검출을 사용하는 HPLC(UPLC) 및/또는 HPLC-MS(UPLC-MS)에 의해 검출/정량화함에 의한 방법; 3) 엔도(Endo) S, 또는 제1 GlcNAc 단당과 제2 GlcNAc 단당 사이를 절단하여 푸코스가 제1 GlcNAc에 부착된 상태로 남겨 두는 다른 효소로 Asn297 글리칸을 처리하거나 처리하지 않고서, 천연 또는 환원된 mAb의 온전한 단백질을 분석하는 방법; 4) 효소적 분해(예를 들어, 트립신 또는 엔도펩티다제 Lys-C)에 의해 mAb를 구성 펩티드들로 분해하고, 후속으로 HPLC-MS(UPLC-MS)에 의해 분리, 검출 및 정량화하는 방법; 5) Asn297에서의 PNGase F에 의한 특이적인 효소적 탈글리코실화에 의해 mAb 단백질로부터 mAb 올리고당을 분리하는 방법. 이렇게 방출된 올리고당은 형광단으로 표지되고, 하기를 가능하게 하는 다양한 상보적 기법에 의해 분리 및 확인될 수 있다: 실험 질량과 이론 질량의 비교에 의한 매트릭스-보조 레이저 탈착 이온화(matrix-assisted laser desorption ionization, MALDI) 질량 분석법에 의한 글리칸

구조의 미세한 특성화, 이온 교환 HPLC(GlycoSep C)에 의한 시알화도(degree of sialylation)의 결정, 순상 HPLC(글리코셉 N)에 의한 친수성 기준에 따른 올리고당 형태의 분리 및 정량화, 및 고성능 모세관 전기영동-레이저 유도 형광(high performance capillary electrophoresis-laser induced fluorescence, HPCE-LIF)에 의한 올리고당의 분리 및 정량화.

[0650] "낮은 푸코스" 또는 "낮은 푸코스 함량"은 약 1% 내지 약 15%의 푸코스 함량을 갖는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자를 지칭한다.

[0651] "정상 푸코스" 또는 "정상 푸코스 함량"은 약 50% 초과, 예를 들어 약 80% 초과 또는 약 85% 초과의 푸코스 함량을 갖는 Ig 불변 영역 또는 이의 단편을 포함하는 본 명세서에 개시된 분자를 지칭한다.

[0652] **4.5. 항이디오타입 항체**

[0653] 항이디오타입 항체는 본 명세서에 개시된 spFv에 특이적으로 결합하는 항체이다. 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 spFv에 특이적으로 결합하는 항이디오타입 항체를 제공한다.

[0654] 일부 실시 형태에서, 항이디오타입 항체는 본 명세서에 개시된 spFv의 다이설파이드 결합에 결합한다. 일부 실시 형태에서, 항이디오타입 항체는 본 명세서에 개시된 spFv의 항원 결합 도메인에 결합한다.

[0655] **4.6. 폴리뉴클레오티드, 벡터, 숙주 세포**

[0656] 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 spFv를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드를 제공한다. 또한 이러한 폴리뉴클레오티드를 포함하는 벡터를 제공한다.

[0657] 일부 실시 형태에서, 벡터는 발현 벡터이다. 발현 벡터는 플라스미드 벡터, 바이러스 벡터, 배큘로바이러스 발현용 벡터, 원핵생물 발현용 벡터, 진핵생물 발현용 벡터, 트랜스포존 기반 벡터, 또는 주어진 세포 또는 유기체 내로 본 명세서에 개시된 폴리뉴클레오티드를 도입시키기에 적합한 임의의 다른 벡터일 수 있다. 본 명세서에 개시된 spFv를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드는 spFv의 발현을 용이하게 하는 발현 벡터 내의 제어 서열에 작동가능하게 연결될 수 있다. 그러한 조절 요소는 전사 프로모터, 적합한 mRNA 리보솜 결합 부위를 인코딩하는 서열, 및 전사 및 번역의 종결을 제어하는 서열을 포함할 수 있지만, 이에 한정되지 않는다. 발현 벡터는 또한 하나 이상의 비전사 요소, 예컨대 복제 기점, 다른 5' 또는 3' 플랭킹(flanking) 비전사 서열, 5' 또는 3' 비번역 서열(예컨대 필요한 리보솜 결합 부위), 스플라이스 공여체 및 수용체 부위, 또는 선택 마커를 포함할 수 있다. 폴리뉴클레오티드는 cDNA일 수 있다. spFv 발현을 구동하는 프로모터는 강한 프로모터, 약한 프로모터, 조직-특이적 프로모터, 유도성 프로모터, 또는 발생-특이적(developmental-specific) 프로모터일 수 있다. 프로모터의 비제한적인 예에는 하이포잔틴 포스포리보실 트랜스퍼라제(HPRT), 아데노신 데아미나제, 피루베이트 키나제, 베타-액틴, 인간 미오신, 인간 헤모글로빈, 인간 근육 크레아틴 등이 포함된다. 게다가, 많은 바이러스성 프로모터가 진핵 세포에서 구성적으로 기능하고, 기재된 실시 형태와 함께 사용하기에 적합하다. 그러한 바이러스성 프로모터는 거대세포바이러스(CMV) 극초기 프로모터, SV40의 초기 및 후기 프로모터, 마우스 유선 종양 바이러스(MMTV) 프로모터, 말로니(Maloney) 백혈병 바이러스의 긴 말단 반복부(LTR), 인간 면역결핍 바이러스(HIV), 엡스타인 바 바이러스(Epstein Barr Virus, EBV), 라우스 육종 바이러스(Rous Sarcoma Virus, RSV), 및 다른 레트로바이러스, 및 단순 헤르페스 바이러스의 티미딘 키나제 프로모터를 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 유도성 프로모터, 예컨대, 메탈로티오네인 프로모터, 테트라사이클린-유도성 프로모터, 독시사이클린-유도성 프로모터, 하나 이상의 인터페론-자극 반응 요소(ISRE), 예컨대 단백질 키나제 R 2',5'-올리고아데닐레이트 합성효소, Mx 유전자 및 ADAR1을 함유하는 프로모터. 본 발명의 벡터는 또한 하나 이상의 내부 리보솜 진입 부위(들)(IRES)를 함유할 수 있다. 융합 벡터 내로의 IRES 서열의 포함은 일부 단백질의 발현을 향상시키는 데 유익할 수 있다. 본 발명의 벡터는 원형 또는 선형일 수 있다. 이들은 원핵생물 또는 진핵생물 숙주 세포에서 기능하는 복제 시스템을 포함하도록 제조될 수 있다. 복제 시스템은 예를 들어, ColE1, SV40, 2μ 플라스미드, λ, 소 유두종 바이러스 등으로부터 유래될 수 있다. 발현 벡터는 일시적 발현을 위해, 안정적인 발현을 위해, 또는 둘 모두를 위해 설계될 수 있다. 발현 벡터는 구성적 발현을 위해 또는 유도성 발현을 위해 제조될 수 있다.

[0658] 사용될 수 있는 예시적인 벡터는 다음과 같다: 세균 벡터: pBs, 파지스크립트, PsiX174, pBluescript SK, pBs KS, pNH8a, pNH16a, pNH18a, pNH46a(미국 캘리포니아주 라호야 소재의 Stratagene); pTrc99A, pKK223-3, pKK233-3, pDR540, 및 pRIT5(스웨덴 웁살라 소재의 Pharmacia). 진핵세포 벡터: pWLneo, pSV2cat, pOG44, PXR1, pSG(Stratagene), pSVK3, pBPV, pMSG 및 pSVL(Pharmacia), pEE6.4(Lonza) 및 pEE12.4(Lonza). 추가의 벡터는 pUC 시리즈(미국 메릴랜드주 글렌 버니 소재의 Fermentas Life Sciences), pBluescript 시리즈(미국 캘

리포니아주 라호야 소재의 Stratagene), pET 시리즈(미국 위스콘신주 매디슨 소재의 Novagen), pGEX 시리즈(스웨덴 웁살라 소재의 Pharmacia Biotech), 및 pEX 시리즈(미국 캘리포니아주 팔로 알토 소재의 Clontech)를 포함한다. 박테리오파지 벡터, 예컨대 λGT10, λGT11, λEMBL4, 및 λNM1149, λZapII(Stratagene)가 사용될 수 있다. 예시적인 식물 발현 벡터는 pBI01, pBI01.2, pBI121, pBI101.3, 및 pBIN19(Clontech)를 포함한다. 예시적인 동물 발현 벡터는 pEUK-C1, pMAM, 및 pMAMneo(Clontech)를 포함한다. 발현 벡터는 바이러스 벡터, 예를 들어 레트로바이러스 벡터, 예를 들어 감마 레트로바이러스 벡터일 수 있다.

[0659] 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 벡터를 포함하는 숙주 세포를 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 숙주 세포는 원핵 세포이다. 일부 실시 형태에서, 상기 숙주 세포는 진핵 세포이다.

[0660] "숙주 세포"는 벡터가 내부에 도입된 세포를 지칭한다. 용어 숙주 세포는 특정 대상 세포뿐만 아니라 그러한 세포의 자손, 그리고 또한 특정 대상 세포로부터 생성된 안정한 세포주도 지칭하고자 함이 이해된다. 돌연변이 또는 환경적 영향으로 인해 후세대에서 소정의 변형이 일어날 수 있기 때문에, 그러한 자손은 모 세포와 동일하지 않을 수 있지만, 여전히 본 명세서에 사용되는 바와 같은 용어 "숙주 세포"의 범주 내에 포함된다. 그러한 숙주 세포는 진핵 세포, 원핵 세포, 식물 세포 또는 고세균(archeal) 세포일 수 있다. 에스케리키아 콜라이(*Escherichia coli*), 간균강(bacilli), 예컨대 바실루스 수브틸리스(*Bacillus subtilis*), 및 다른 장내세균과(enterobacteriaceae), 예컨대 살모넬라(Salmonella), 세라티아(Serratia), 및 다양한 슈도모나스(Pseudomonas) 종이 원핵 숙주 세포의 예이다. 다른 미생물, 예컨대 효모가 또한 발현에 유용하다. 사카로미세스(Saccharomyces)(예를 들어, S. 세레비시아이(*S. cerevisiae*)) 및 피키아(Pichia)가 적합한 효모 숙주 세포의 예이다. 예시적인 진핵 세포는 포유류, 곤충, 조류 또는 다른 동물 기원의 것일 수 있다. 포유류 진핵 세포는 불멸화 세포주, 예컨대 하이브리도마 또는 골수종 세포주, 예컨대 SP2/0(미국 버지니아주 머내서스 소재의 ATCC(American Type Culture Collection), CRL-1581), NS0(영국 윌트셔주 솔즈베리 소재의 ECACC(European Collection of Cell Cultures), ECACC No. 85110503), FO(ATCC CRL-1646) 및 Ag653(ATCC CRL-1580) 뮤린 세포주를 포함한다. 예시적인 인간 골수종 세포주는 U266(ATTC CRL-TIB-196)이다. 다른 유용한 세포주는 중국 햄스터 난소(CHO) 세포, 예를 들어 CHO-K1SV(미국 메릴랜드주 워커스빌 소재의 Lonza Biologics), CHO-K1(ATCC CRL-61) 또는 DG44로부터 유래되는 것들을 포함한다.

[0661] 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 spFv를 제조하는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 spFv가 생성되도록 하는 조건 하에서 본 명세서에 개시된 숙주 세포를 배양하는 단계 및 숙주 세포에 의해 생성된 spFv를 회수하는 단계를 포함한다. scFv의 제조 방법 및 그의 정제 방법은 알려져 있다. 일단 (화학적으로 또는 재조합적으로) 합성되면, spFv는 황산암모늄 침전, 친화성 컬럼, 컬럼 크로마토그래피, 고성능 액체 크로마토그래피(HPLC) 정제, 겔 전기영동 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는 표준 절차에 따라 정제될 수 있다(전반적으로 문헌[Scopes, Protein Purification (Springer-Verlag, N.Y., (1982))] 참조). scFv는 실질적으로 순수할 수 있으며, 예를 들어 적어도 약 80% 내지 85% 순도, 적어도 약 85% 내지 90% 순도, 적어도 약 90% 내지 95% 순도, 또는 적어도 약 98% 내지 99% 순도, 또는 그 이상일 수 있으며, 예를 들어 대상 단백질 이외의 세포 잔해, 거대분자 등과 같은 오염물이 없다.

[0662] 본 발명의 spFv를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드는 표준 분자 생물학 방법을 사용하여 벡터 내로 도입될 수 있다. 숙주 세포 형질전환, 배양, 항체 발현 및 정제는 잘 알려진 방법을 사용하여 행해진다.

[0663] **4.7. 약제학적 조성물 및 투여**

[0664] 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 spFv 또는 분자를 포함하는 조성물을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 조성물은 약제학적으로 허용가능한 담체를 추가로 포함하는 약제학적 조성물이다.

[0665] "담체"는 spFv 또는 분자와 함께 투여되는 희석제, 애쥬번트(adjuvant), 부형제, 또는 비히클을 지칭한다. 그러한 비히클은 석유, 동물, 식물 또는 합성 기원의 것들, 예컨대 낙화생유, 대두유, 광유, 참기름 등을 포함하는, 물 및 오일과 같은 액체일 수 있다. 예를 들어, 0.4% 염수 및 0.3% 글리신이 사용될 수 있다. 이들 용액은 무균성이고 일반적으로 미립자 물질이 없다. 이들은 통상적인 잘 알려진 멸균 기법(예를 들어, 여과)에 의해 멸균될 수 있다. 조성물은 pH 조절제 및 완충제, 안정화제, 증점제, 윤활제, 및 착색제 등과 같은 생리학적 조건에 근접시키기 위해 필요에 따라 약제학적으로 허용가능한 보조 물질을 포함할 수 있다. 그러한 조성물 중의 spFv 또는 분자의 농도는 약 0.5 중량% 미만으로부터, 통상 약 1 중량% 이상 내지 많게는 15 또는 20 중량%까지 변동될 수 있으며, 선택된 투여 방법에 따라, 주로 필요 용량, 유체 부피, 점도 등에 기초하여 선택될 수 있다. 다른 인간 단백질, 예를 들어 인간 혈청 알부민을 포함하는 적합한 비히클 및 제형이, 예를 들어 문헌[Remington: The Science and Practice of Pharmacy, 21st Edition, Troy, D.B. ed., Lipincott Williams and

Wilkins, Philadelphia, PA 2006, Part 5, Pharmaceutical Manufacturing pp 691-1092, 특히 pp. 958-989 참조]에 기재되어 있다.

[0666] 본 명세서에 개시된 spFv, 분자 또는 조성물의 투여 방법은 비경구 투여, 예를 들어 피내, 근육내, 복막내, 정맥내 또는 피하, 경점막(구강, 비강내, 질내, 직장) 또는 당업자에 의해 이해되는 다른 수단을 포함하지만, 이에 한정되지 않는 임의의 적절한 경로일 수 있다.

[0667] **4.8. 본 발명의 spFv를 제조하는 방법**

[0668] 본 발명은 또한 본 명세서에 개시된 spFv(예를 들어, 섹션 4.1.1에 개시된 것)를 제조하는 방법을 제공한다. 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 항원 결합 부위를 형성하는 중쇄 가변 영역(VH) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 제공하는 단계; 제1 L Cys를 포함하거나 이를 포함하도록 조작된 링커(L)를 제공하는 단계; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치에 VH Cys를 포함하도록 상기 VH를 조작하는 단계; 및 VH Cys와 제1 L Cys 사이에 다이설파이드 결합을 형성하여, 안정화된 scFv를 제조하는 단계를 포함한다.

[0669] 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 항원 결합 부위를 형성하는 VH 및 VL을 제공하는 단계; 제2 L Cys를 포함하거나 이를 포함하도록 조작된 L을 제공하는 단계; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치에 VL Cys를 포함하도록 상기 VL를 조작하는 단계; 및 VL Cys와 제2 L Cys 사이에 다이설파이드 결합을 형성하여, 안정화된 scFv를 제조하는 단계를 포함한다.

[0670] 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 항원 결합 부위를 형성하는 중쇄 가변 영역(VH) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 제공하는 단계; 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하거나 이를 포함하도록 조작된 링커(L)를 제공하는 단계; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치에 VH Cys를 포함하도록 상기 VH를 조작하는 단계; 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치에 VL Cys를 포함하도록 상기 VL를 조작하는 단계; 및 VH Cys와 제1 L Cys 사이에 다이설파이드 결합을 형성하고, VL Cys와 제2 L Cys 사이에 다이설파이드 결합을 형성하여, 안정화된 scFv를 제조하는 단계를 포함한다.

[0671] 일부 실시 형태에서, 다이설파이드 결합은 scFv의 발현 동안 형성된다.

[0672] 항원 결합 도메인을 형성하는 scFv의 임의의 공지된 VH/VL 쌍은 안정화된 scFv 내로 조작될 수 있다. 대안적으로, 관심 항원 결합 VH/VL 쌍은 알려진 방법을 사용하여 드 노보로 확인될 수 있고, 생성된 VH/VL 쌍은 spFv 포맷 내로 조작될 수 있다.

[0673] 예를 들어, kohler 및 Milstein의 하이브리도마 방법이 관심 항원에 결합하는 VH/VL 쌍을 확인하는데 사용될 수 있고, 생성된 VH/VL 쌍은 spFv로서 조작될 수 있다. 대안적으로, 인간 면역글로불린(Ig) 유전자좌를 그의 게놈 내에 담지하는 마우스, 래트 또는 닭과 같은 유전자도입 동물을 사용하여 항원 결합 단편을 생성할 수 있으며, 이는 예를 들어 미국 특허 제6,150,584호, 국제 특허 출원 공개 WO1999/45962호, 국제 특허 출원 공개 WO2002/066630호, WO2002/43478호, WO2002/043478호 및 WO1990/04036호에 기재되어 있다. 그러한 동물 내의 내인성 면역글로불린 유전자좌는 파괴 또는 결실될 수 있고, 적어도 하나의 완전한 또는 부분적인 인간 면역글로불린 유전자좌가 상동적 또는 비상동적 재조합을 사용하거나, 도입염색체(transchromosome)를 사용하거나, 또는 미니유전자(minigene)를 사용하여 동물의 게놈 내로 삽입될 수 있다. 레제네론(Regeneron) (http://_www_regeneron_com), 하버 안티바디스(Harbour Antibodies) (http://_www_harbourantibodies_com), 오픈 모노클로날 테크놀로지, 인코포레이티드(Open Monoclonal Technology, Inc.) (OMT) (http://_www_omtinc_net), 키맙(KyMab) (http://_www_kymab_com), 트리아니(Trianni) (http://_www_trianni_com) 및 아블렉시스(Ablexis) (http://_www_ablexis_com)와 같은 회사들이 상술한 바와 같은 기술을 사용하여 선택된 항원에 대한 인간 항체를 제공하는 데에 관여할 수 있다. 파지 디스플레이가 또한 spFv로서 조작될 수 있는 항원 결합 단편을 생성하는 데 사용될 수 있다.

[0674] 일부 실시 형태에서, spFv는 인간화된다. 일부 실시 형태에서, spFv는 인간이다. 일부 실시 형태에서, spFv는 비인간이다.

[0675] 일부 실시 형태에서, 상기 방법은 본 명세서에 개시된 폴리뉴클레오티드(예를 들어, 섹션 4.6에 개시된 것)를 숙주 세포에서 발현하여, 안정화된 scFv를 제조하는 단계를 포함한다.

[0676] 하기 실시예는 본 명세서에 개시된 실시 형태 중 일부를 추가로 설명하기 위해 제공된다. 실시예는 개시된 실시 형태를 예시하고자 하는 것으로서, 이를 제한하고자 하는 것은 아니다.

[0677] **4.9. 예시적인 spFv, 분자 및 링커**

[0678] 일부 실시 형태에서, 본 명세서에 개시된 spFv 또는 분자는 표 4에 기재된 하나 이상의 아미노산 서열을 포함한다.

[0679] [표 4]

개시된 분자의 단백질 서열

분자명	단백질 서열	서열 번호
Cris7a VL-VH scFv	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGKVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGGGSG GGGSGGGGSGGGGSEVQLVQSGAEVKKPGESLKISCKGSGYSFTRSTMHWVRQM PGKGLEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMY YCASPQVHYDYNGFPYWGQGTMVTVSSGHHHHHH	125
Cris7a VL-VH spFv	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGCVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGSGGS GGCPPCGSGGEVQLVQSGAEVKKPGESLKISCKGSGYSFTRSTMHWVRQMPGKG LEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMYYCASP QVHYDYNGFPYWGCGTMVTVSSGHHHHHH	126
Cris7b VL-VH scFv	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGKVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGGGSG GGGSGGGGSGGGGSQVQLLQSAAEVKKPGESLKISCKGSGYTFTRSTMHWVRQT PGKGLEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMY YCARPQVHYDYNGFPYWGQGTLVTVSSGHHHHHH	127
Cris7b VL-VH spFv	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGCVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGSGGS GGCPPCGSGGQVQLLQSAAEVKKPGESLKISCKGSGYTFTRSTMHWVRQTPGKG LEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMYYCAR PQVHYDYNGFPYWGCGTLVTVSSGHHHHHH	128
BCMB749_VL	DIVMTQSQKFMSTTVGDRVSITCKASQNVGTAVAWYQQKPGQSPKLLIYSASN RYTGVPDRFTGTGSGTDFTLTIINVQSEDLADYFCQQYGSSPWTFGGGTKLEIK	129
인간_CL	RTVAAPSVFIFPPSDEQLKSGTASVVCLLNNFYPREAKVQWKVDNALQSGNSQES VTEQDSKDSTYSLSSTLTLSKADYEKHKVYACEVTHQGLSSPVTKSFNRGEC	130
BCMB749 LC	DIVMTQSQKFMSTTVGDRVSITCKASQNVGTAVAWYQQKPGQSPKLLIYSASNR YTGVPDRFTGTGSGTDFTLTIINVQSEDLADYFCQQYGSSPWTFGGGTKLEIKRTV AAPSVFIFPPSDEQLKSGTASVVCLLNNFYPREAKVQWKVDNALQSGNSQESVTE QDSKDSTYSLSSTLTLSKADYEKHKVYACEVTHQGLSSPVTKSFNRGEC	131
BCMB749_VH	QVQLQQSGAELVKPGASVKLSCKASGYTFTNNVMHWVRQKPGQGLEWIGYILPY NDGTKYNEKFKGKATLTSDKSSSTAYMELSSLTSEDSAVYYCARYDYDGYFDYW GQGTTLTVSS	132
인간_HC_불변 도메인 1	ASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAV LQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTQTYICNVNHKPSNTKVDKKVEPKSCDKTHTCPPC PAPEAAGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKFNWYVDGVEV HNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISK AKGQPREPQVYTLPPSREEMTKNQVSLSCAVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKT TPPVLDSDGSFFLVSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNRFTQKSLSLSPGK	133
BCMB749 HC1	QVQLQQSGAELVKPGASVKLSCKASGYTFTNNVMHWVRQKPGQGLEWIGYILPY NDGTKYNEKFKGKATLTSDKSSSTAYMELSSLTSEDSAVYYCARYDYDGYFDYW GQGTTLTVSSASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGAL TSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTQTYICNVNHKPSNTKVDKKVEPKS CDKTHTCPPCPAPEAAGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKF NWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKA LPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSREEMTKNQVSLSCAVKGFYPSDIAVEWES NGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLVSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNRFT QKSLSLSPGK	134
BCMB749h_VL	DIQMTQSPSSVSASVGDRVTITCKASQNVGTAVAWYQQKPGQSPKLLIYSASN RYTGVPSRFSGSGSGTDFTLTISSLQPEDFATYFCQQYGSSPWTFGGGTKVEIK	135
BCMB749h LC	DIQMTQSPSSVSASVGDRVTITCKASQNVGTAVAWYQQKPGQSPKLLIYSASNRY TGVPSRFSGSGSGTDFTLTISSLQPEDFATYFCQQYGSSPWTFGGGTKVEIKRTVAA PSVFIFPPSDEQLKSGTASVVCLLNNFYPREAKVQWKVDNALQSGNSQESVTEQD SKDSTYSLSSTLTLSKADYEKHKVYACEVTHQGLSSPVTKSFNRGEC	136
BCMB749h_VH	QVQLVQSGAEVKKPGASVKVSCKASGYTFTNNVMHWVRQAPGQGLEWMGYIL PYNDGTKYNQKFQGRVTLTSDKSASTAYMELSSLRSEDTAVYYCARYDYDGYFD YWGQGTTVTVSS	137

[0680]

분자명	단백질 서열	서열 번호
BCMB749h HC1	QVQLVQSGAEVKKPGASVKVSCKASGYTFTNNVMHWVRQAPGQGLEWMGYIL PYNDGTKYNQKFQGRVTLTSDKSASTAYMELSSLRSEDTAVYYCARYDYDGYFD YWGQGTTVTVSSASTKGPSVFPLAPSSKSTSGGTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNS GALTSGVHTFPAVLQSSGLYSLSSVVTVPSSSLGTQTYICNVNHKPSNTKVDKKVE PKSCDKTHTCPPCPAPEAAGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEV KFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSN KALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSREEMTKNQVSLSCAVKGFYPSDIAVEW ESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLVSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNR FTQKSLSLSPGK	138
인간_HC_불변 도메인 2	EPKSCDKTHTCPPCPAPEAAGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPE VKFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVS NKALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSRDELTKNQVSLWCLVKGFYPSDIAVE WESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHN HYTQKSLSLSPGK	139
Cris7b VL-VH scFv HC2	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGKVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGSEGKS SGSGSESKSTGGSQVQLLQSAAEVKKPGESLKISCKGSGYTFTRSTMHWVRQTPG KGLEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMYYC ARPQVHYDYNGFPYWGCGTLVTVSSEPKSCDKTHTCPPCPAPEAAGGPSVFLFPP KPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNST YRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPS RDELTKNQVSLWCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLYSK LTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK	140
Cris7b VL-VH spFv HC2	EIVLTQSPSAMSASVGDRVTITCSASSSVSYMNWYQQKPGCVPKRLIYDSSKLASG VPSRFSGSGSGTEYTLTISSLQPEDFATYYCQQWSRNPPTFGQGTMLEIKGGGSGG SGGCPPCGGSGGQVQLLQSAAEVKKPGESLKISCKGSGYTFTRSTMHWVRQTPGK GLEWMGYINPSSAYTNYNQKFKDQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMYYCA RPQVHYDYNGFPYWGCGTLVTVSSEPKSCDKTHTCPPCPAPEAAGGPSVFLFPPK PKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQYNSTY RVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISKAKGQPREPQVYTLPPSR DELTKNQVSLWCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVLDSDGSFFLYSKL TVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK	141
CD3B219a99v scFv HC2	QTVVTQEPSLTVSPGGTVTLTCRSSTGAVTTSNYANWVQQKPGQAPRGLIGGTNK RAPGTPARFSGSLLGGKAALTLSGVQPEDEAEYYCALWYSNLWVFGGGTKLTVL GGSEGKSSGSGSESKSTGGSEVQLVESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFTFNTYAMN WVRQAPGKGLEWVARIRSKYNNYATYYAASVKGRFTISRDDSKNSLYLQMNSLK TEDTAVYYCVRHGNFGNSYVSWFAYWGQGTLVTVSSEPKSCDKTHTCPPCPAPE AAGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAK TKPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISKAKGQP REPQVYTLPPSRDELTKNQVSLWCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVL DSDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK	142
CD3B219a99v spFv HC2	QTVVTQEPSLTVSPGGTVTLTCRSSTGAVTTSNYANWVQQKPGCAPRGLIGGTNK RAPGTPARFSGSLLGGKAALTLSGVQPEDEAEYYCALWYSNLWVFGGGTKLTVL GGGSGGSGGCPPCGGSGGEVQLVESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFTFNTYAMNW VRQAPGKGLEWVARIRSKYNNYATYYAASVKGRFTISRDDSKNSLYLQMNSLKT EDTAVYYCVRHGNFGNSYVSWFAYWGCGTLVTVSSEPKSCDKTHTCPPCPAPEA AGGPSVFLFPPKPKDTLMISRTPEVTCVVVSVSHEDPEVKFNWYVDGVEVHNAKT KPREEQYNSTYRVVSVLTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKALPAPIEKTISKAKGQPR EPQVYTLPPSRDELTKNQVSLWCLVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTPPVLD SDGSFFLYSKLTVDKSRWQQGNVFSCSVMHEALHNHYTQKSLSLSPGK	143

[0681]

[0682] 일부 실시 형태에서, "Cris7a VL-VH scFv"는 서열 번호 125의 아미노산 서열을 포함한다.

[0683] 일부 실시 형태에서, "Cris7a VL-VH spFv"는 서열 번호 126의 아미노산 서열을 포함한다.

[0684] 일부 실시 형태에서, "Cris7b VL-VH scFv"는 서열 번호 127의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, "Cris7b VL-VH spFv"는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함한다. 일부 실시 형태에서, "BCMB749_VL"은 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함한다.

[0685] 일부 실시 형태에서, "인간 CL"은 서열 번호 130의 아미노산 서열을 포함한다.

[0686] 일부 실시 형태에서, "BCMB749 LC"는 서열 번호 131의 아미노산 서열을 포함한다.

[0687] 일부 실시 형태에서, "BCMB749_VH"는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함한다.

[0688] 일부 실시 형태에서, "인간_HC_불변 도메인 1"은 서열 번호 133의 아미노산 서열을 포함한다.

[0689] 일부 실시 형태에서, "BCMB749 HC1"은 서열 번호 134의 아미노산 서열을 포함한다.

[0690] 일부 실시 형태에서, "BCMB749h_VL"은 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함한다.

[0691] 일부 실시 형태에서, "BCMB749h LC"는 서열 번호 136의 아미노산 서열을 포함한다.

[0692] 일부 실시 형태에서, "BCMB749h_VH"는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함한다.

[0693] 일부 실시 형태에서, "BCMB749h HC1"은 서열 번호 138의 아미노산 서열을 포함한다.

[0694] 일부 실시 형태에서, "인간_HC_불변 도메인 2"는 서열 번호 139의 아미노산 서열을 포함한다.

[0695] 일부 실시 형태에서, "Cris7b VL-VH scFv HC2"는 서열 번호 140의 아미노산 서열을 포함한다.

[0696] 일부 실시 형태에서, "Cris7b VL-VH spFv HC2"는 서열 번호 141의 아미노산 서열을 포함한다.

[0697] 일부 실시 형태에서, "CD3B219a99v scFv HC2"는 서열 번호 142의 아미노산 서열을 포함한다.

[0698] 일부 실시 형태에서, "CD3B219a99v spFv HC2"는 서열 번호 143의 아미노산 서열을 포함한다.

[0699] 추가의 실시 형태에서, 본 발명의 scFv 링커는 **표 5**에 기재된 아미노산 서열을 포함한다.

[0700] [표 5]

scFv 및 spFv 링커의 단백질 서열

분자명	링커 타입	단백질 서열	서열 번호
GLk1 scFv VL-VH	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
GLk1 spFv VL-VH	9+4+5	GGGSGGSGGCPPCGGSGG	3
GLk1 scFv VH-VL	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
GLk1 spFv VH-VL	9+4+5	GGGSGGSGGCPPCGGSGG	3
GLk2 scFv VL-VH	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
GLk2 spFv VL-VH	9+4+5	GGGSGGSGGCPPCGGSGG	3
GLk2 scFv VH-VL	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
GLk2 spFv VH-VL	6+4+6	GGGSGGCPPCGGGSGG	4
CAT2200a scFv VL-VH	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
CAT2200a spFv VL-VH	8+4+4	GGSGGSGGCPPCGSGG	5
CAT2200b scFv VL-VH	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
CAT2200a spFv VL-VH	9+4+4	GGGSGGSGGCPPCGSGG	6
CAT2200a scFv VH-VL	4× G4S	GGGGSGGGGSGGGGSGGGGS	2
CAT2200b spFv VH-VL	9+4+4v2	GGGSGGGSGCPPCGGGG	7

[0701]

[0702] 일부 실시 형태에서, "GLk1 scFv VL-VH" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0703] 일부 실시 형태에서, "GLk1 spFv VL-VH" 링커는 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다.

[0704] 일부 실시 형태에서, "GLk1 scFv VH-VL" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0705] 일부 실시 형태에서, "GLk1 spFv VH-VL" 링커는 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다.

[0706] 일부 실시 형태에서, "GLk2 scFv VL-VH" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0707] 일부 실시 형태에서, "GLk2 spFv VL-VH" 링커는 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함한다.

[0708] 일부 실시 형태에서, "GLk2 scFv VH-VL" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0709] 일부 실시 형태에서, "GLk2 spFv VH-VL" 링커는 서열 번호 4의 아미노산 서열을 포함한다.

[0710] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200a scFv VL-VH" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0711] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200a spFv VL-VH" 링커는 서열 번호 5의 아미노산 서열을 포함한다.

[0712] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200b scFv VL-VH" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0713] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200a spFv VL-VH" 링커는 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함한다.

[0714] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200a scFv VH-VL" 링커는 서열 번호 2의 아미노산 서열을 포함한다.

[0715] 일부 실시 형태에서, 본 발명의 "CAT2200b spFv VH-VL" 링커는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함한다.

[0716] **5. 실시 형태**

[0717] 본 발명은 하기의 비제한적인 실시 형태를 제공한다.

[0718] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[0719] A1. 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하는 분자로서, scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는

[0720] a) 시스테인(Cys)으로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[0721] b) Cys로 돌연변이된 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 위치와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[0722] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하며, 임의로 상기 분자는 다이설파이드 결합이 없는 비교가능한 분자, 예를 들어 제1 다이설파이드 결합 및 제2 다이설파이드 결합이 없는 비교가능한 분자와 비교하여, 향상된 안정성, 발현 수율 및/또는 품질을 갖는 분자.

[0723] A2. 실시 형태 A1에 있어서,

[0724] a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[0725] b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[0726] c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 분자.

[0727] A3. 실시 형태 A1 또는 실시 형태 A2에 있어서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 분자.

[0728] A4. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A3 중 어느 하나에 있어서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 분자.

[0729] A5. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A4 중 어느 하나에 있어서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 분자.

[0730] A6. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A5 중 어느 하나에 있어서,

[0731] a) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0732] b) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0733] c) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0734] d) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0735] e) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0736] f) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0737] g) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0738] h) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0739] i) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0740] j) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0741] k) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0742] l) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0743] m) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0744] n) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0745] o) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0746] p) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0747] q) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0748] r) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0749] s) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0750] t) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0751] u) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0752] v) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0753] w) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0754] x) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0755] y) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0756] z) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0757] aa) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0758] bb) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0759] cc) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0760] dd) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0761] ee) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0762] ff) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0763] gg) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0764] hh) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0765] ii) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0766] jj) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0767] kk) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0768] ll) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0769] mm) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0770] nn) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0771] oo) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0772] pp) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0773] qq) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 분자.

[0774] A7. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A6 중 어느 하나에 있어서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0775] A8. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A7 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 분자.

[0776] A9. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A8 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 분자.

[0777] A10. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A9 중 어느 하나에 있어서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 분자.

[0778] A11. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A10 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수인 분자.

[0779] A12. 실시 형태 A11에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수인 분자.

[0780] A13. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A12 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함하는 분자.

[0781] A14. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A13 중 어느 하나에 있어서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함하고/하거나; L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는 분자.

[0782] A15. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A14 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0783] A16. 실시 형태 A15에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 분자.

[0784] A17. 실시 형태 A16에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 분자.

[0785] A18. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A17 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0786] A19. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0787] A20. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0788] A21. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0789] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0790] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[0791] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0792] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0793] A22. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0794] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0795] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[0796] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0797] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0798] A23. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0799] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0800] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[0801] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산

서열을 포함하고;

[0802] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0803] A24. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0804] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[0805] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[0806] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0807] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0808] A25. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0809] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[0810] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[0811] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0812] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0813] A26. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0814] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[0815] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[0816] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0817] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0818] A27. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0819] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[0820] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[0821] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0822] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0823] A28. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0824] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[0825] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[0826] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0827] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0828] A29. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A19 중 어느 하나에 있어서,

[0829] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[0830] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[0831] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0832] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0833] A30. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0834] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[0835] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[0836] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0837] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0838] A31. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0839] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[0840] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[0841] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0842] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0843] A32. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0844] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[0845] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[0846] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0847] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0848] A33. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0849] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[0850] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[0851] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0852] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0853] A34. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0854] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[0855] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[0856] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0857] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0858] A35. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0859] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[0860] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[0861] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0862] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0863] A36. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0864] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[0865] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[0866] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0867] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0868] A37. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0869] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[0870] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[0871] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0872] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0873] A38. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0874] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[0875] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[0876] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0877] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0878] A39. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0879] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[0880] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[0881] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0882] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0883] A40. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0884] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[0885] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[0886] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0887] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0888] A41. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A18 및 실시 형태 A20 중 어느 하나에 있어서,

[0889] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[0890] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[0891] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0892] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[0893] A42. 실시 형태 A21 내지 실시 형태 A41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0894] A43. 실시 형태 A21 내지 실시 형태 A41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0895] A44. 실시 형태 A21 내지 실시 형태 A41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0896] A45. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A44 중 어느 하나에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

[0897] 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

[0898] 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

[0899] 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 분자.

[0900] A46. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A45 중 어느 하나에 있어서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3인 분자.

[0901] A47. 실시 형태 A46에 있어서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[0902] A48. 실시 형태 A46 또는 실시 형태 A47에 있어서, (i) Fab는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하거나; (ii) Fab는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 분자.

[0903] A49. 실시 형태 A47 또는 실시 형태 A48에 있어서,

[0904] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0905] b) VL은 L43의 Cys를 포함하며;

[0906] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0907] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[0908] A50. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A49 중 어느 하나의 분자 또는 이의 단편, 또는 이의 폴리펩티드를 인코딩하는 폴리뉴클레오티드.

[0909] A51. 실시 형태 A50의 폴리뉴클레오티드를 포함하는 벡터.

[0910] A52. 실시 형태 A51의 벡터를 포함하는 숙주 세포.

[0911] A53. 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 실시 형태 A52의 숙주 세포를 배양하는 단계 및 결합 분자를 정제하는 단계를 포함하는 결합 분자의 제조 방법.

[0912] A54. 실시 형태 A53에 있어서, 숙주 세포는 원핵 세포인 방법.

[0913] A55. 실시 형태 A53에 있어서, 숙주 세포는 진핵 세포인 방법.

[0914] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[0915] B1. 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A49 중 어느 하나의 분자를 포함하는 조성물로서, 임의로 상기 조성물은 약제학적으로 허용가능한 부형제를 추가로 포함하는 약제학적 조성물이고, 임의로 상기 분자는 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하며, 여기서 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는

[0916] a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[0917] b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[0918] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하는 조성물.

[0919] B2. 실시 형태 B1에 있어서,

[0920] a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를

포함하거나;

[0921] b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[0922] c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 조성물.

[0923] B3. 실시 형태 B1 또는 실시 형태 B2에 있어서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 조성물.

[0924] B4. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B3 중 어느 하나에 있어서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 조성물.

[0925] B5. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B4 중 어느 하나에 있어서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 조성물.

[0926] B6. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B5 중 어느 하나에 있어서,

[0927] a) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0928] b) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0929] c) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0930] d) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0931] e) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0932] f) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0933] g) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0934] h) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0935] i) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0936] j) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0937] k) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0938] l) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0939] m) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0940] n) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0941] o) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0942] p) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0943] q) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0944] r) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0945] s) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0946] t) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0947] u) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0948] v) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0949] w) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0950] x) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0951] y) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0952] z) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0953] aa) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0954] bb) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0955] cc) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0956] dd) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0957] ee) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0958] ff) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0959] gg) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[0960] hh) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0961] ii) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0962] jj) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0963] kk) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[0964] ll) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[0965] mm) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[0966] nn) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[0967] oo) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[0968] pp) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[0969] qq) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며,

[0970] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[0971] B7. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B6 중 어느 하나에 있어서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[0972] B8. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B7 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 조성물.

[0973] B9. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B8 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 조성물.

[0974] B10. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B9 중 어느 하나에 있어서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 조성물.

[0975] B11. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B10 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수인 조성물.

[0976] B12. 실시 형태 B11에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수인 조성물.

[0977] B13. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B12 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC

(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함하는 조성물.

[0978] B14. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B13 중 어느 하나에 있어서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함하는 조성물.

[0979] B15. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B14 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[0980] B16. 실시 형태 B15에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 조성물.

[0981] B17. 실시 형태 B16에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 조성물.

[0982] B18. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B17 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[0983] B19. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[0984] B20. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[0985] B21. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[0986] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0987] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[0988] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0989] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[0990] B22. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[0991] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0992] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[0993] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0994] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[0995] B23. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[0996] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[0997] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[0998] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[0999] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1000] B24. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1001] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1002] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1003] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1004] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1005] B25. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1006] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1007] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1008] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1009] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1010] B26. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1011] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1012] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1013] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1014] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1015] B27. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1016] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1017] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1018] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1019] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1020] B28. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1021] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1022] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1023] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1024] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1025] B29. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B19 중 어느 하나에 있어서,

[1026] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1027] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1028] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1029] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1030] B30. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1031] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1032] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1033] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1034] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1035] B31. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1036] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1037] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1038] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1039] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1040] B32. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1041] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1042] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1043] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1044] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1045] B33. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1046] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1047] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1048] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1049] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1050] B34. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1051] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1052] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1053] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1054] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1055] B35. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1056] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1057] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1058] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1059] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1060] B36. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1061] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1062] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1063] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1064] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1065] B37. 실시 형태 B1에 있어서,

[1066] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1067] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1068] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1069] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1070] B38. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1071] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1072] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1073] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1074] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1075] B39. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1076] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1077] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1078] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1079] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1080] B40. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1081] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1082] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1083] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1084] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1085] B41. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B18 및 실시 형태 B20 중 어느 하나에 있어서,

[1086] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1087] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1088] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1089] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 조성물.

[1090] B42. 실시 형태 B21 내지 실시 형태 B41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[1091] B43. 실시 형태 B21 내지 실시 형태 B41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[1092] B44. 실시 형태 B21 내지 실시 형태 B41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[1093] B45. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B43 중 어느 하나에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

[1094] 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

[1095] 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

[1096] 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 조성물.

[1097] B46. 실시 형태 B1 내지 실시 형태 B45 중 어느 하나에 있어서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3인 조성물.

[1098] B47. 실시 형태 B46에 있어서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 조성물.

[1099] B48. 실시 형태 B46 또는 실시 형태 B47에 있어서, (i) Fab는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하거나; (ii) Fab는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 조성물.

[1100] B49. 실시 형태 B47 또는 실시 형태 B48에 있어서,

[1101] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1102] b) VL은 L43의 Cys를 포함하며;

[1103] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1104] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 조성물.

[1105] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[1106] C1. 결합 분자의 제조 방법으로서, 상기 분자 또는 이의 단편을 인코딩하는 폴리뉴클레오티드를 숙주 세포에 도입하는 단계; 상기 분자가 생성되도록 하는 조건 하에서 숙주 세포를 배양하는 단계 및 결합 분자를 정제하는 단계를 포함하며, 상기 분자는 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하며, 여기서 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는

[1107] a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[1108] b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[1109] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하는 방법.

[1110] C2. 실시 형태 C1에 있어서,

[1111] a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1112] b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1113] c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 조성물.

[1114] C3. 실시 형태 C1 또는 실시 형태 C2에 있어서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 방법.

[1115] C4. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C3 중 어느 하나에 있어서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 방법.

[1116] C5. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C4 중 어느 하나에 있어서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 방법.

[1117] C6. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C5 중 어느 하나에 있어서,

[1118] a) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1119] b) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1120] c) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1121] d) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1122] e) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1123] f) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1124] g) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1125] h) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1126] i) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1127] j) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1128] k) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1129] l) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1130] m) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1131] n) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1132] o) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1133] p) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1134] q) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1135] r) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1136] s) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1137] t) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1138] u) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1139] v) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1140] w) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1141] x) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1142] y) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1143] z) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1144] aa) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1145] bb) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1146] cc) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1147] dd) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1148] ee) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1149] ff) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1150] gg) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1151] hh) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1152] ii) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1153] jj) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1154] kk) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1155] ll) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1156] mm) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1157] nn) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1158] oo) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1159] pp) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1160] qq) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며;

[1161] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[1162] C7. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C6 중 어느 하나에 있어서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1163] C8. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C7 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 방법.

[1164] C9. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C8 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 방법.

[1165] C10. 실시 형태 C9에 있어서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 방법.

[1166] C11. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C10 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수인 방법.

[1167] C12. 실시 형태 C11에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수인 방법.

[1168] C13. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C12 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함하는 방법.

[1169] C14. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C13 중 어느 하나에 있어서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함하고/하거나; L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는 방법.

[1170] C15. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C14 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[1171] C16. 실시 형태 C15에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 방법.

[1172] C17. 실시 형태 C16에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 방법.

[1173] C18. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C17 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1174] C19. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1175] C20. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1176] C21. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1177] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1178] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1179] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1180] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1181] C22. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1182] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1183] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1184] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1185] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1186] C23. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1187] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1188] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1189] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1190] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1191] C24. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1192] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1193] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1194] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1195] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1196] C25. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1197] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1198] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1199] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1200] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1201] C26. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1202] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1203] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1204] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1205] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1206] C27. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1207] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1208] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1209] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1210] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1211] C28. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1212] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1213] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1214] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1215] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1216] C29. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C19 중 어느 하나에 있어서,

[1217] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1218] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1219] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1220] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1221] C30. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1222] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1223] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1224] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1225] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1226] C31. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1227] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1228] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1229] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1230] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1231] C32. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1232] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1233] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1234] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1235] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1236] C33. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1237] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1238] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1239] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1240] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1241] C34. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1242] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1243] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1244] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1245] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1246] C35. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1247] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1248] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1249] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1250] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1251] C36. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1252] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1253] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1254] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1255] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1256] C37. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1257] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1258] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1259] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1260] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1261] C38. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1262] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1263] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1264] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1265] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1266] C39. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1267] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1268] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1269] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1270] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1271] C40. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1272] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1273] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1274] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1275] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1276] C41. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C18 및 실시 형태 C20 중 어느 하나에 있어서,

[1277] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1278] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1279] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1280] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1281] C42. 실시 형태 C21 내지 실시 형태 C41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1282] C43. 실시 형태 C21 내지 실시 형태 C41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1283] C44. 실시 형태 C21 내지 실시 형태 C41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1284] C45. 실시 형태 C1에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

[1285] 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

[1286] 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

[1287] 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 방법.

[1288] C46. 실시 형태 C1 내지 실시 형태 C45 중 어느 하나에 있어서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3인 방법.

[1289] C47. 실시 형태 C46에 있어서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1290] C48. 실시 형태 C46 또는 실시 형태 C47에 있어서, (i) Fab는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하거나; (ii) Fab는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 방법.

[1291] C49. 실시 형태 C47 또는 실시 형태 C48에 있어서,

[1292] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1293] b) VL은 L43의 Cys를 포함하며;

[1294] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1295] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1296] C50. 실시형태 C1 내지 실시형태 C49 중 어느 하나에 있어서, 숙주 세포는 원핵 세포인 방법.

[1297] C51. 실시형태 C1 내지 실시형태 C49 중 어느 하나에 있어서, 숙주 세포는 진핵 세포인 방법.

[1298] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[1299] D1. 세포를 표적 세포로 유도하거나 결합시키는 방법으로서, 표적 세포를 결합 분자와 접촉시키는 단계를 포함하며,

[1300] 상기 분자는 항원 결합 단편(Fab), 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하고, 여기서 scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv는

[1301] a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[1302] b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[1303] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하며;

[1304] Fab는 표적 세포 상의 제1 항원에 결합하고, scFv는 세포 상의 제2 항원에 결합하는 방법.

[1305] D2. 실시 형태 D1에 있어서,

[1306] a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1307] b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1308] c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 방법.

[1309] D3. 실시 형태 D1 또는 실시 형태 D2에 있어서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 7 Å 내지 약 9 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 방법.

[1310] D4. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D3 중 어느 하나에 있어서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 방법.

[1311] D5. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D4 중 어느 하나에 있어서, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 방법.

[1312] D6. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D5 중 어느 하나에 있어서,

[1313] a) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1314] b) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1315] c) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1316] d) VH Cys는 H3에 존재하고 VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1317] e) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1318] f) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1319] g) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1320] h) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1321] i) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1322] j) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1323] k) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1324] l) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1325] m) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1326] n) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1327] o) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1328] p) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1329] q) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1330] r) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1331] s) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1332] t) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1333] u) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1334] v) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1335] w) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1336] x) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1337] y) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1338] z) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1339] aa) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1340] bb) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1341] cc) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1342] dd) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1343] ee) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1344] ff) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1345] gg) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1346] hh) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1347] ii) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1348] jj) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1349] kk) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1350] ll) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1351] mm) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1352] nn) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1353] oo) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1354] pp) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1355] qq) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며,

[1356] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 방법.

[1357] D7. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D6 중 어느 하나에 있어서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1358] D8. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D7 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 방법.

[1359] D9. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D8 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 방법.

[1360] D10. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D9 중 어느 하나에 있어서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 방법.

[1361] D11. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D10 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수인 방법.

[1362] D12. 실시 형태 D11에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수인 방법.

[1363] D13. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D12 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함하는 방법.

[1364] D14. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D13 중 어느 하나에 있어서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함하고/하거나; L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산의 길이, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산의 길이를 갖는 방법.

[1365] D15. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D14 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[1366] D16. 실시 형태 D15에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 방법.

[1367] D17. 실시 형태 D16에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 방법.

[1368] D18. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D17 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1369] D19. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1370] D20. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1371] D21. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1372] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1373] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1374] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1375] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1376] D22. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1377] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1378] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1379] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1380] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1381] D23. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1382] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1383] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1384] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1385] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1386] D24. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1387] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1388] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1389] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1390] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1391] D25. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1392] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1393] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1394] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1395] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1396] D26. 실시 형태 D1에 있어서,

[1397] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1398] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1399] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1400] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1401] D27. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1402] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1403] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1404] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1405] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1406] D28. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1407] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1408] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1409] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1410] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1411] D29. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D19 중 어느 하나에 있어서,

[1412] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1413] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1414] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1415] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1416] D30. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1417] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1418] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1419] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1420] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1421] D31. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1422] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1423] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1424] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1425] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1426] D32. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1427] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1428] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1429] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1430] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1431] D33. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1432] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1433] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1434] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1435] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1436] D34. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1437] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1438] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1439] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1440] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1441] D35. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1442] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1443] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1444] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1445] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1446] D36. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1447] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1448] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1449] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1450] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1451] D37. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1452] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1453] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1454] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1455] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1456] D38. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1457] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1458] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1459] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1460] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1461] D39. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1462] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1463] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1464] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1465] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1466] D40. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1467] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1468] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1469] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1470] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1471] D41. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D18 및 실시 형태 D20 중 어느 하나에 있어서,

[1472] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1473] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1474] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1475] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 방법.

[1476] D42. 실시 형태 D21 내지 실시 형태 D41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1477] D43. 실시 형태 D21 내지 실시 형태 D41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1478] D44. 실시 형태 D21 내지 실시 형태 D41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1479] D45. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D44 중 어느 하나에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

[1480] 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

[1481] 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

[1482] 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 방법.

[1483] D46. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D45 중 어느 하나에 있어서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3인 방법.

[1484] D47. 실시 형태 D46에 있어서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 방법.

[1485] D48. 실시 형태 D46 또는 실시 형태 D47에 있어서, (i) Fab는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하거나; (ii) Fab는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 방법.

[1486] D49. 실시 형태 D47 또는 실시 형태 D48에 있어서,

[1487] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1488] b) VL은 L43의 Cys를 포함하며;

[1489] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1490] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 방법.

[1491] D50. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D49 중 어느 하나에 있어서, 표적 세포는 종양 세포이므로, 종양 세포를 제거하는 방법.

[1492] D51. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D50 중 어느 하나에 있어서, 대상의 질환 또는 장애를 치료하기 위한 방법.

[1493] D52. 실시 형태 D51에 있어서, 상기 질환 또는 장애는 종양이고, 임의로 질환 또는 장애는 암인 방법.

[1494] D53. 실시 형태 D51에 있어서, 상기 대상은 인간 대상인 방법.

[1495] D54. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D53 중 어느 하나에 있어서, 상기 세포는 면역 세포인 방법.

[1496] D55. 실시 형태 D1 내지 실시 형태 D53 중 어느 하나에 있어서, 상기 세포는 T 세포인 방법.

[1497] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[1498] E1. 제1 항원에 결합하는 항원 결합 단편(Fab), 제2 항원에 결합하는 단일쇄 가변 단편(scFv) 및 단편 결정화 가능 영역(Fc 영역)을 포함하는 분자로서, 상기 scFv는 scFv를 안정화시키는 수단을 포함하는 분자.

[1499] E2. 실시 형태 E1에 있어서, scFv는 중쇄 가변 영역(VH), 링커(L) 및 경쇄 가변 영역(VL)을 포함하고, scFv를 안정화시키는 수단은

[1500] a) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 시스테인(Cys)과 L Cys 사이의 다이설파이드 결합;

[1501] b) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 L Cys 사이의 다이설파이드 결합; 또는

[1502] c) 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH Cys와 제1 L Cys 사이의 제1 다이설파이드 결합 및 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL Cys와 제2 L Cys 사이의 제2 다이설파이드 결합을 포함하는 분자.

[1503] E3. 실시 형태 E2에 있어서,

[1504] a) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1505] b) 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하고, 상기 L은 L Cys를 포함하거나;

[1506] c) 상기 VH는 구조적으로 보존된 표면 노출된 VH 프레임워크 잔기 위치의 VH Cys를 포함하고, 상기 VL은 구조적으로 보존된 표면 노출된 VL 프레임워크 잔기 위치의 VL Cys를 포함하며, 상기 L은 제1 L Cys 및 제2 L Cys를 포함하고, 여기서 상기 VH Cys 및 상기 제1 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있고, 상기 VL Cys 및 상기 제2 L Cys는 다이설파이드 결합을 형성할 수 있는 분자.

[1507] E4. 실시 형태 E2 또는 실시 형태 E3에 있어서, VH Cys와 VL Cys 사이의 거리는 약 5 Å 내지 약 10 Å, 또는 약 7 Å 내지 약 9 Å인 분자.

[1508] E5. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E3 중 어느 하나에 있어서, VH Cys는 H3, H5, H40, H43, H46 또는 H105에 존재하고/하거나, VL Cys는 L3, L5, L39, L42, L43, L45, L100 또는 L102에 존재하며, 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따르는 분자.

[1509] E6. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E5 중 어느 하나에 있어서,

[1510] a) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1511] b) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1512] c) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1513] d) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1514] e) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1515] f) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1516] g) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1517] h) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1518] i) VH Cys는 H3에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1519] j) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1520] k) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1521] l) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1522] m) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1523] n) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1524] o) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1525] p) VH Cys는 H5에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1526] q) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1527] r) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1528] s) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1529] t) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1530] u) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1531] v) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1532] w) VH Cys는 H40에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1533] x) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1534] y) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1535] z) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1536] aa) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1537] bb) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1538] cc) VH Cys는 H43에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1539] dd) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1540] ee) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1541] ff) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1542] gg) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L42에 존재하거나;

[1543] hh) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1544] ii) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1545] jj) VH Cys는 H46에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1546] kk) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L3에 존재하거나;

[1547] ll) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L5에 존재하거나;

[1548] mm) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L39에 존재하거나;

[1549] nn) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L45에 존재하거나;

[1550] oo) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L100에 존재하거나;

[1551] pp) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L102에 존재하거나;

[1552] qq) VH Cys는 H105에 존재하고, VL Cys는 L43에 존재하며;

[1553] 여기서 잔기 넘버링은 초티아에 따른다.

[1554] E7. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E6 중 어느 하나에 있어서, L은 면역글로불린(Ig) 힌지 영역으로부터 유래된 연속 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1555] E8. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E7 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역 또는 비인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 분자.

[1556] E9. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E8 중 어느 하나에 있어서, Ig 힌지 영역은 인간 Ig 힌지 영역으로부터 유래되는 분자.

[1557] E10. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E9 중 어느 하나에 있어서, 인간 Ig 힌지 영역은 IgG1, IgG2, IgG3 또는 IgG4 아이소타입인 분자.

[1558] E11. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E10 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 23)를 포함하며, 여기서 X는 글리신(Gly), 세린(Ser), 프롤린(Pro), 알라닌(Ala), 아르기닌(Arg), 아스파라긴(Asn), 아스파르트산(Asp), 글루탐산(Glu), 글루타민(Gln), 히스티딘(His), 아이소류신(Ile), 류신(Leu), 라이신

(Lys), 페닐알라닌(Phe), 트레오닌(Thr), 트립토판(Trp) 또는 티로신(Tyr)이고, y는 1 내지 3의 정수인 분자.

[1559] E12. 실시 형태 E11에 있어서, L은 아미노산 서열 $C(X)_yC$(서열 번호 24)를 포함하며, 여기서 X는 Gly, Ser 또는 Pro이고, y는 1 내지 3의 정수인 분자.

[1560] E13. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E12 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 CPC, CGC, CSC, CPPC(서열 번호 1), CGPC(서열 번호 28), CPGC(서열 번호 29), CGGC(서열 번호 30), CSPG(서열 번호 31), CPSC(서열 번호 32), CSSC(서열 번호 33), CGSC(서열 번호 34), CSGC(서열 번호 35), CPPPC(서열 번호 36), CGPPC(서열 번호 37), CPGPC(서열 번호 38), CPPGC(서열 번호 39), CGGPC(서열 번호 40), CPGGC(서열 번호 41), CGGGC(서열 번호 42), CSPPC(서열 번호 43), CPSPC(서열 번호 44), CPPSC(서열 번호 45), CSSPC(서열 번호 46), CPSSC(서열 번호 47), CSSSC(서열 번호 48), CGSPC(서열 번호 49), CPGSC(서열 번호 50), CSGPC(서열 번호 51) 또는 CPSGC(서열 번호 52)를 포함하는 분자.

[1561] E14. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E13 중 어느 하나에 있어서, L은 약 14 내지 약 19개의 아미노산, 예컨대 약 14, 약 15, 약 16, 약 17, 약 18 또는 약 19개의 아미노산을 포함하는 분자.

[1562] E15. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E14 중 어느 하나에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 25)을 포함하며; 여기서, X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Phe, Thr, Trp 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이며, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수이다.

[1563] E16. 실시 형태 E15에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 26)을 포함하며; X는 Gly, Ser, Pro, Ala, Arg, Asn, Asp, Glu, Gln, His, Ile, Leu, Lys, Thr 또는 Tyr이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 분자.

[1564] E17. 실시 형태 E16에 있어서, L은 아미노산 서열 $(X)_mC(X)_yC(X)_n$(서열 번호 27)을 포함하며; X는 Gly 또는 Pro이고, m은 6 내지 9의 정수이고, y는 1 내지 3의 정수이고, n은 4 내지 6의 정수인 분자.

[1565] E18. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E17 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1566] E19. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1567] E20. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서, scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1568] E21. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E19 중 어느 하나에 있어서,

[1569] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1570] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1571] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1572] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1573] E22. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1574] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1575] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1576] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1577] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1578] E23. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1579] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1580] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1581] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산

서열을 포함하고;

[1582] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1583] E24. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1584] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1585] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1586] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1587] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1588] E25. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1589] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1590] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1591] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1592] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1593] E26. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1594] a) VH는 H5의 Cys를 포함하고;

[1595] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1596] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1597] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1598] E27. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1599] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1600] b) VL은 L42의 Cys를 포함하며;

[1601] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1602] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1603] E28. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1604] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1605] b) VL은 L45의 Cys를 포함하며;

[1606] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1607] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1608] E29. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 중 어느 하나에 있어서,

[1609] a) VH는 H3의 Cys를 포함하고;

[1610] b) VL은 L39의 Cys를 포함하며;

[1611] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1612] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1613] E30. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1614] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1615] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1616] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1617] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1618] E31. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1619] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1620] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1621] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1622] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1623] E32. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1624] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1625] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1626] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1627] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1628] E33. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1629] a) VH는 H43의 Cys를 포함하고;

[1630] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1631] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1632] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1633] E34. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1634] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1635] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1636] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1637] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1638] E35. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1639] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1640] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1641] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1642] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1643] E36. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1644] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1645] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1646] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1647] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1648] E37. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1649] a) VH는 H40의 Cys를 포함하고;

[1650] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1651] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1652] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1653] E38. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1654] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1655] b) VL은 L100의 Cys를 포함하며;

[1656] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1657] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1658] E39. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1659] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1660] b) VL은 L102의 Cys를 포함하며;

[1661] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1662] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1663] E40. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1664] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1665] b) VL은 L5의 Cys를 포함하며;

[1666] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1667] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1668] E41. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E18 및 실시 형태 E20 중 어느 하나에 있어서,

[1669] a) VH는 H46의 Cys를 포함하고;

[1670] b) VL은 L3의 Cys를 포함하며;

[1671] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1672] d) scFv는 VH-L-VL 배향으로 존재하는 분자.

[1673] E42. 실시 형태 E21 내지 실시 형태 E41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 3의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1674] E43. 실시 형태 E21 내지 실시 형태 E41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 6의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1675] E44. 실시 형태 E21 내지 실시 형태 E41 중 어느 하나에 있어서, L은 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1676] E45. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E44 중 어느 하나에 있어서, 결합 분자는 중쇄, 경쇄 및 폴리펩티드를 포함하고,

[1677] 중쇄 및 경쇄의 N 말단은 Fab를 형성하며;

[1678] 폴리펩티드는 N 말단의 scFv를 포함하고;

[1679] 폴리펩티드의 C 말단 및 중쇄의 C 말단은 Fc 영역을 형성하는 분자.

[1680] E46. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E45 중 어느 하나에 있어서, Fab는 종양 항원에 결합하고, scFv는 T 세포 항원에 결합하며; 임의로 종양 항원은 BCMA이고, T 세포 항원은 CD3인 분자.

[1681] E47. 실시 형태 E46에 있어서, scFv는 서열 번호 126 또는 서열 번호 128의 아미노산 서열을 포함하는 분자.

[1682] E48. 실시 형태 E46 또는 실시 형태 E47에 있어서, Fab는 서열 번호 132의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 129의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하거나; (ii) Fab는 서열 번호 137의 아미노산 서열을 포함하는 VH 및 서열 번호 135의 아미노산 서열을 포함하는 VL을 포함하는 분자.

[1683] E49. 실시 형태 E47 또는 실시 형태 E48에 있어서,

[1684] a) VH는 H105의 Cys를 포함하고;

[1685] b) VL은 L43의 Cys를 포함하며;

[1686] c) L은 서열 번호 2, 서열 번호 3, 서열 번호 4, 서열 번호 5, 서열 번호 6 또는 서열 번호 7의 아미노산 서열을 포함하고;

[1687] d) scFv는 VL-L-VH 배향으로 존재하는 분자.

[1688] E50. 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E49 중 어느 하나의 분자를 생성하는 수단.

[1689] E51. 세포를 표적 세포로 유도하거나 결합시키는 방법으로서, 표적 세포를 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E49 중 어느 하나의 분자와 접촉시키는 단계를 포함하는 방법.

[1690] E52. 표적 세포를 제거하거나 억제시키는 방법으로서, 표적 세포를 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E49 중 어느 하나의 분자와 접촉시키는 단계를 포함하는 방법.

[1691] E53. 대상의 질환 또는 장애를 치료하는 방법으로서, 실시 형태 E1 내지 실시 형태 E49 중 어느 하나의 분자를 대상에게 투여하는 단계를 포함하는 방법.

[1692] 일 세트의 실시 형태에서, 하기가 제공된다:

[1693] F1. 의약으로 사용하기 위한, 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A55 중 어느 하나의 분자.

[1694] F2. 질환 또는 장애를 치료하는데 사용하기 위한, 실시 형태 A1 내지 실시 형태 A55 중 어느 하나의 분자.

[1695] 본 발명의 특정 실시 형태가 본 명세서에 기재되어 있다. 전술한 설명의 해석 시, 개시된 실시 형태들의 변형이 당업자에게 명백해질 수 있으며, 당업자는 적절한 이러한 변형을 이용할 수 있음이 예상된다. 따라서, 본 발명은 본원에 구체적으로 기재된 것과 다른 방식으로 실시될 수 있으며, 본 발명은 적용 가능한 법에 의해 허용되는 본원에 첨부된 청구범위에 나열된 기술 요지의 모든 변경 및 등가물을 포함하는 것으로 의도된다. 또한, 본원에서 달리 명시되거나, 문맥 상 명백하게 모순되지 않는 한, 이의 모든 가능한 변형에서 상기 기재된 요소의 임의의 조합이 본 발명에 의해 포함된다. 본 발명의 다수의 실시 형태가 기재되었다. 그럼에도 불구하고, 다양한 변경이 본 발명의 사상 및 범주로부터 벗어나지 않으면서 이루어질 수 있음이 이해될 것이다. 따라서, 실시예 섹션에서의 설명은 청구범위에 기재된 본 발명의 범주를 예시하되, 제한하지 않도록 의도된다.

[1696] **6. 실시예**

[1697] **6.1 실시예 1: CD3/CRIS7A 및 CD3/CRIS7B SCFV 및 SPFV 안정성**

[1698] **6.1.1 항 CD3 Cris7a 및 Cris7b scFv/spFv의 발현 및 정제**

[1699] 모든 scFv 및 spFv 분자를 CMV 프로모터 구동된 포유류 발현 벡터 내로 클로닝하였다. 이러한 작제물을, 제조사 프로토콜을 사용하여 Expi293 세포에 형질감염시키고 세포를 5일 동안 배양하였다. AktaXpress 시스템(GE Healthcare)을 통해 1 ml His-TRAP HP 컬럼(GE Healthcare) 상에서 정제된 상청액으로부터 각각의 단백질을 정제하였다. 컬럼을 0 내지 100% 용출 완충액(세척 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 20mM 이미다졸; 용출 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 500 mM 이미다졸)의 구배를 사용하여 준비하여, 느슨하게 결합된 니켈을 제거한 다음에, DPBS에서 다시 평형을 이루었다. 제거된 상청액을 먼저 50 mM Tris, pH 7.5 및 20 mM 이미다졸로 조정한 다음, 4℃에서 0.8 mL/min으로 1 mL HisTRAP HP 컬럼 위로 로딩하였다. 이어서, 안정적인 기준선이 얻어질 때까지 컬럼을 PBS로 세척하였다. 이어서, 컬럼을 20 CV의 세척 완충액으로 추가로 세척하고, 용출 완충액으로 단일 주입 루프로 용출하여, 26/10 HiPrep 탈염 컬럼을 통해 1 x DPBS에서 탈염하고 분획을 수집하였다. 이어서, 정제된 단백질을 함유하는 분획을 풀링하고 농축시켰다. scFv 및 spFv 단백질을 열안정성 측정을 위해 DPBS로 투석하였다.

[1700] 시차 주사 열량측정법(DSC)에 의한 scFv/spFv 안정성

[1701] Cris7a 또는 Cris7b scFv 및 이들의 스테이플링된 spFv의 구조적 안정성(conformational stability)을 오토샘플러(autosampler)가 장착된 Microcal Capillary DSC 기기(Malvern Instruments)를 사용하여, 시차 주사 열량측정법(DSC)으로 측정하였다. 매칭 완충액을 함유한 샘플을 피드백 옵션 없이 25 내지100℃의 범위에서 60℃/hr의 속도로 스캔하였다. 단백질 샘플 전에 완충액-완충액 전용 스캔을 6회 수행하여, 열 이력과 안정적인 기준선을 설정하였다. 원시 DSC 데이터는 단백질 농도와 기준선 차감으로 정규화된 완충액 블랭크 차감 과정을 거쳤다. 처리된 데이터를 Origin 7 소프트웨어(버전 7.0552)를 사용하여, 비-2(non-2) 상태 전이 모델을 사용하여 피팅하였다. 반복 곡선 피팅을 행하여, 용융과 관련된 열역학적 파라미터, 예를 들어 열안정성, 엔탈피를 도출하였다.

[1702] **6.1.2 표면 플라즈몬 공명**

[1703] 재조합 CD3 항원에 대한 Cris7b scFv와 스테이플링된 spFv의 결합은 25℃에서 Biacore 8K 기기(Cytiva, 공식적으로 GE Healthcare)를 사용하여 표면 플라즈몬 공명으로 측정하였다. 염소 항 인간 Fcɣ 단백질(Jackson ImmunoResearch 109-005-098)을 표준 아민 커플링을 사용하여 CM4 칩(시리즈 S CM4 센서 칩, Cat# BR100534)에 직접 고정하였다. 최종 약 4000 Rus를 각 채널에 고정하였다. Cris7b scFv 또는 spFv 함유 이중특이체가 포함된 샘플을 100 내지 250 Rus 범위의 레벨로 항 인간 Fcɣ 표면에 포획한 다음에, 단일 사이클 동역학 방법을 사용하여 300 nM에서 시작하여 일련의 5가지 항원 농도의 인간 CD3E-CD3D 헤테로이량체 단백질(Acro Cat# CDDH52W1)을 3배 희석(300 nM 내지 3.7 nM)으로 결합시켰다. 결합 및 해리 시간은 각각, 150초 및 600초이었다. 다음 라운드의 상호작용 전에 포획/결합된 항체/항원 복합체를 제거하기 위해 50 μl/min 유량으로 각각 20초씩 3회의 짧은 펄스로 0.85% 인산을 사용하여 표면을 재생하였다. 러닝 완충액은 0.01 M HEPES pH 7.4, 0.15 M NaCl, 0.05% v/v 계면활성제 P20이었다. 원시 결합 데이터는 1) 항원 결합에서 빈 칩 표면으로의 신호(각 채널의 FC1) 및 2) 진행 완충액 블랭크 주입으로부터의 신호를 빼서 이중 참조하여 처리하였다. 그 다음에, 처리된 데이터는 Biacore Insight Evaluation 소프트웨어 버전 2(Cytiva)를 사용하여 동역학(ka, kd) 및 친화도(KD) 파라미터를 도출하기 위해 1:1 단순 Langmuir 결합 모델 분석을 거쳤다.

[1704] **6.1.3 항 CD3 Cris7a 및 Cris7b scFv/spFv의 안정성 비교**

[1705] Cris7a 및 Cris7b는 T 세포 방향 전환 가능성이 있는 CRIS7의 항 CD3 변이체로부터 유래되었다. 이들의 scFv 부분의 Tm은 Tm이 각각 59.7 및 57.1℃로 이상적인 열 안정성보다 낮았다(**도 2a**). **표 6**을 참조한다.

[1706] [표 6]

Cris7a 및 Cris7b scFv 및 spFv 의 Tm

[1707]

	비-2 상태 모델 분석			
단백질 ID	Tm(℃)	Tm 오차 (℃)	ΔH (kcal/mol)	ΔH 오차 (kcal/mol)
Cris7a scFv	59.7	0.04	1.17E+05	1.99E+03
Cris7a spFv (스테이플)	71.6	0.02	1.80E+05	2.25E+03
Cris7b scFv	57.1	0.05	1.19E+05	2.01E+03
Cris7b spFv (스테이플)	68.6	0.03	1.76E+05	3.09E+03

[1708] 스테이플링은 도 2a의 scFv 작제물에 VL-링커-VH 포맷으로 적용되었다. 이러한 scFv 분자의 SDS-PAGE는 비환원 spFv가 대응 scFv보다 빠르게 이동하는 반면, 환원 단백질은 동일하게 이동하는 것을 보여주었다. **도 2b**를 참

조한다. 이러한 데이터는 스테이플링 다이설파이드 결합이 형성되어, spFv의 구조가 더욱 컴팩트해졌음을 나타내었다. 대응 scFv와 비교하면, spFv의 Tm은 scFv에서 spFv까지 11℃ 이상 높았다(**도 2a** 및 **표 6**). 스테이플링된 scFv(spFv)는 또한 스테이플링되지 않은 모 scFv보다 약 50% 더 많은 엔탈피를 나타내었다(**표 6**). 용융 엔탈피의 증가는 더 강한 VL/VH 상호작용 및/또는 스테이플링으로 인한 VL/VH 상대 이동에 대한 제한으로 인해, 더 강한 VH/VL 상호 작용을 나타내었다.

[1709] **6.2 실시예 2: CD3/BCMA 이중특이성 작제물, 특성 및 활성**

[1710] **6.2.1 CD3/BCMA 이중특이체의 발현 및 정제**

[1711] 스테이플링된 scFv 분자의 활성 및 특성을 추가로 연구하기 위해, 노브-인-홀 Fc 헤테로이량체화 플랫폼을 사용하여 항 CD3 scFv/spFv를 항 BCMA Fab와 쌍을 이룬 여러 개념 증명 이중특이성 작제물을 생성하였다. 항 BCMA 아암인 BCMB749는 마우스 단일 클론 항체(Xie-fan Lin-Schmidt 제공)이었다. BCMB749h는 BCMB749 CDR(AbM 정의)이 여러가지 복귀 돌연변이를 갖는 인간 VH 및 VL에 이식된 인간화 변이체이었다(1개의 VH 및 VL 수용체가 선택되었음). 그 다음에, BCMB749 및 BCMB749h Fab를 2개의 서로 다른 항 CD3(Cris7b 및 CD3B219) scFv 및 spFv와 쌍을 이루어, 이중특이성 분자를 표적으로 하는 BCMA를 생성하였다. 다양한 작제물이 **표 7**에 나와 있다.

[1712] [표 7]

본 연구를 위해 생성된 CD3/BCMA 이중특이성 분자

명칭	설명	경쇄	중쇄 1	중쇄 2
BCMB1056	BCMB749 x Cris7b scFv	BCMB749 LC	BCMB749 HC1	Cris7b VL-VH scFv HC2
BCMB1052	BCMB749 x Cris7b spFv	BCMB749 LC	BCMB749 HC1	Cris7b VL-VH spFv HC2
BCMB1055	BCMB749h x Cris7b scFv	BCMB749h LC	BCMB749h HC1	Cris7b VL-VH scFv HC2
BCMB1050	BCMB749h x Cris7b spFv	BCMB749h LC	BCMB749h HC1	Cris7b VL-VH spFv HC2
BCMB1051	BCMB749 x CD3B219 spfv	BCMB749 LC	BCMB749 HC1	CD3B219a99v spFv HC2
BCMB1049	BCMB749h x CD3B219 spFv	BCMB749h LC	BCMB749h HC1	CD3B219a99v spFv HC2
BCMB1054	BCMB749 x CD3B219 scfv	BCMB749 LC	BCMB749 HC1	CD3B219a99v scFv HC2
BCMB1053	BCMB749h x CD3B219 scFv	BCMB749h LC	BCMB749h HC1	CD3B219a99v scFv HC2

[1713]

[1714] 모든 이중특이성 scFv 및 spFv 분자를 대응 Fab HC 및 LC 아암과 함께, CMV 프로모터 구동된 포유류 발현 벡터에 클로닝하였다. 이러한 작제물을, 제조사 프로토콜을 사용하여 ExpiCHO 세포에 형질감염시키고 세포를 7일 동안 배양하였다. 모든 샘플을 채취하여, 얻어진 상청액을 0.2 μm 필터를 통해 여과하여 정화하였다. 샘플을 2단계 과정을 통해 정제하였다. 정제된 상청액을 먼저HITRAP MABSELECT SURE(단백질 A) 1mL 컬럼(GE Healthcare)에 통과시켰다. 컬럼을 평형화하고,1X DPBS로 세척하여; 최종 샘플을 0.1 M 아세트산나트륨(pH 3.5)으로 용출시켰다. 단백질이 용출되면, 샘플을 즉시 2.5 M Tris-HCl pH 7.5로 중화한 다음에, 0.5 mL CaptureSelect CH1-XL Affinity Matrix(ThermoFisher)에 로딩하였다. CH1 컬럼을 평형화하고, 1X DPBS로 세척하여, 최종 샘플을 0.1 M 아세트산나트륨(pH 3.5)으로 용출시켰다. 샘플을 1X DPBS로 투석하여 보관하고, 30 μL의 샘플에 대하여 1X DPBS를 러닝 완충액으로 사용하여 Agilent ADVANCEBIO SEC 300A(Agilent)에서 샘플 품질 및 순도를 평가하였다. 최종 샘플을 평가하여, A280으로 농도를 측정하고, 4℃로 보관하였다.

[1715] **6.2.2 시차주사 형광측정법(NanoDSF)에 의한 Tm/Tagg**

[1716] 열적 풀림(thermal unfolding) 시에 트립토판의 고유 형광을 모니터링하여, 이중특이성 분자의 구조적 안정성을 고급 시차주사 형광측정법(nanoDSF) 기술을 사용하여 평가하였다. 풀림은 Prometheus NT.48 기기(NanoTemper Technologies GmbH)를 사용하여 20 내지 95℃에서 1℃/min의 가열 램프로, 384웰 샘플 플레이트(ThermoNunc, Cat# 264573)에서 각 샘플을 24웰 모세관(NanoTemper, Cat# PR-AC002)에 로딩하여 측정하였다. 각 샘플을 인산염 완충 식염수(PBS)에서 1 mg/ml로 중복하여 측정하였다. 330 및 350 nm에서의 각 샘플의 고유 형광을 사용하여 온도 램프(ramp) 동안 풀림을 모니터링하고 시간 경과에 따른 형광 강도의 변화로서 기록하였다. 열 용융 데이터를 PR.STABILITYANALYSIS v1.0.2 소프트웨어를 사용하여 처리하였다. 처리된 데이터에는 330 nm, 350 nm, 비율 330/350에 대한 통합 데이터와 1차 미분 분석 및 모든 샘플에 대한 산란 데이터가 포함되어 있다. 각 샘플에 대한 주석이 달린 전이 데이터가 포함된 최종 분석 결과를 엑셀 테이블 포맷으로 엑스포트하였다.

[1717] Cris7b 함유 이중특이체의 경우, 각각 뮤린 및 인간화 Fab 아암이 있는 spFv 함유 분자 B1052 및 B1050은 모두 99% 이상의 이중특이성 단량체를 갖는 반면, 이들의 scFv 함유 대응물인 B1056 및 B1055는 SEC 결과에 기초하여 60 내지 80%의 이중특이성 단량체 및 20 내지 40%의 이량체를 가졌다(**도 3a** 내지 **도 3d**). CD3B219를 갖는 이중특이성 작제물의 경우, scFv 함유 작제물 B1054 및 B1053의 정제 후에 발현 및 정제 수율이 낮았다. 이러한 결과는 여러 번 반복해도 마찬가지였다. 이는 scFv의 발현 또는 DNA 서열의 결과일 수 있다. 반면에, spFv 함유

작제물인 B1051 및 B1049는 높은 품질을 제공하고 최종 이중특이성 단량체 단백질을 생성하였다(**도 4a** 내지 **도 4d**). 이러한 데이터는 두 CD3 scFv 아암(Cris7b 및 CD3B219)에서의 스테이플링이 이중특이성 제품 수율과 품질을 크게 향상시켰음을 나타내었다.

[1718] 다음으로, 이중특이성 작제물의 열 안정성에 대한 스테이플링의 영향을 NanoDSF로 평가하였다(**도 5** 및 **표 8**). Cris7b의 경우, scFv 함유 작제물은 약 58.0℃의 Tm(B1056 및 B1055)에서 용융 전이를 나타내었으며, Tonset은 48.0 내지 50.0℃이었다. 대응 spFv 함유 이중특이체(B1052 및 B1050)의 경우, 이러한 낮은 Tm 전이가 사라졌으며, 제1 전이의 Tm은 약 68.5℃이었다. 게다가, 이들 두 spFv 이중특이성 단백질의 Tonset은 약 61℃이었다. 이들 둘 다는 spFv 부분에 대해 약 10℃ 이상의 안정성 개선을 나타내는 것으로 해석되었다. CD3B219 spFv 작제물의 경우, 비교를 위한 scFv 단백질이 없었기 때문에 차이를 측정할 수 없었다. 반면에, 이들 둘 다는 높은 Tm(약 69℃)과 Tonset(약 62℃)을 나타내었다.

[1719] [표 8]

CD3/BCMA 이중특이성 분자의 열 안정성

단백질 배치 명칭	BCMA Fab	CD3 아암	Tonset	Tm1	Tm2	Tm3	Tagg
BCMB1056.001	BCMB749, 뮤린	scfv cris7b	48.6	57.9	70.0	77.8	70.0
BCMB1052.001	BCMB749, 뮤린	스테이플링된 cris7b	60.9	68.3			70.3
BCMB1055.001	BCMB749, 인간화	scfv cris7b	50.2	58.3	70.9	78.1	70.5
BCMB1050.001	BCMB749, 인간화	스테이플링된 cris7b	61.4	68.9	76.9		69.8
BCMB1051.001	BCMB749, 뮤린	스테이플링된 CD3B219	62.3	68.3			70.2
BCMB1049.001	BCMB749, 인간화	스테이플링된 CD3B219	62.4	68.8	77.9		70.4

[1720]

[1721] 스테이플링은 SPR 측정을 통해 CD3 항원에 대한 항 CD3 결합을 변화시키지 않았다. scFv와 대응 spFv 단백질은 CD3에 대해 매우 유사한 결합 친화도를 나타내었다. **표 9**를 참조한다.

[1722] [표 9]

CD3 결합의 표면 플라즈몬 공명(SPR) 측정

	샘플 정보		BCMA 결합 (BCMW37.DB.001)			CD3W220.001 결합			CD3EG (Acro) 결합		
단백질 배치 명칭	BCMA Fab	CD3 아암	ka (1/Ms)	kd (1/s)	KD (M)	ka (1/Ms)	kd (1/s)	KD (M)	ka (1/Ms)	kd (1/s)	KD (M)
BCMB1056.001	BCMB749, 뮤린	scfv cris7b	1.49E+07	3.89E-02	**2.61E-09**	2.49E+05	2.37E-01	**9.51E-07**	5.20E+05	3.56E-01	**6.83E-07**
BCMB1052.001	BCMB749, 뮤린	스테이플링된 cris7b	1.42E+07	3.90E-02	**2.74E-09**	2.10E+05	1.05E-01	**5.02E-07**	8.18E+05	2.15E-01	**2.63E-07**
BCMB1055.001	BCMB749, 인간화	scfv cris7b	1.26E+07	2.23E-02	**1.77E-09**	2.67E+05	1.99E-01	**7.46E-07**	6.89E+05	4.40E-01	**6.39E-07**
BCMB1050.001	BCMB749, 인간화	스테이플링된 cris7b	1.20E+07	2.10E-02	**1.75E-09**	1.84E+05	1.21E-01	**6.57E-07**	4.53E+05	2.17E-01	**4.79E-07**
BCMB1051.001	BCMB749, 뮤린	스테이플링된 CD3B219	1.67E+07	4.13E-02	**2.47E-09**	7.95E+04	1.71E-03	**2.15E-08**	5.69E+05	1.49E-03	**2.61E-09**
BCMB1049.001	BCMB749, 인간화	스테이플링된 CD3B219	1.38E+07	2.19E-02	**1.59E-09**	8.69E+04	2.05E-03	**2.36E-08**	4.41E+05	1.96E-03	**4.45E-09**

[1723]

[1724] ### 6.2.3 BCMA/CD3 세포독성 분석

[1725] T 세포 활성화 및 종양 세포의 사멸 가능성에 대한 BCMA 표적화 시험 분자의 효과를 측정하기 위해, INTELLICYT IQUE3 및 FORECYT 소프트웨어(Sartorius)를 이용하였다. H929-Fluc-GFP 세포는 2개의 인간 공여자 Pan T 세포(Hemacare)에 대한 표적 세포로서 작용하였다. 분석은 3:1의 T 세포 대 표적 세포 비로 96웰 플레이트에 설정되었다. 시험 분자를 10 nM의 시작 농도로 첨가하고 완전 배지에 1:4로 연속 희석하였다. 모든 분자를 최소한 이중실험으로 시험하였다.

[1726] 사멸 및 T 세포 활성화 상태의 검출을 72시간 후에 유세포 분석에 의해 평가하였다. H929에서 발현된 내인성 GFP를 사용하여, T 세포를 표적 세포로부터 분리하였다. 세포독성은 근적외선 Live/Dead 염색제(ThermoFisher, CatL34976)을 사용하여 측정하고, CD4 및 CD8 T 세포의 활성화는 항 인간 CD25-BV650(BD Biosciences), 항 인간 CD4-BV510(Biolegend) 및 항 인간 CD8-PE/Cy7(Biolegend)로 평가하였다. 세포독성 및 CD25 MFI 데이터를 엑스포트하여, PRISM(GRAPHPAD)으로 분석하였다. 데이터를 로그 변환하고, 4개의 파라미터를 로지스틱 피팅시켜 EC50 보고를 위한 회귀 곡선을 생성하였다.

[1727] 모든 이중특이성 단백질은 매우 유사한 EC50을 사용한 세포독성 분석에서 $BCMA^+$ H929-GFP^+ 세포를 강력하게 사멸시킨 반면에(**도 6**), Cris7b scFv/비표적화 Fab(CD8B24)를 사용한 음성 대조군 이중특이체는 사멸 활성을 나타내지 않았다. Cris7b spFv와 인간화 B647을 포함하는 B1050은 이러한 CD3 방향 전환 분자 중에서 가장 높은 사멸 활성을 갖는 것으로 나타났다. 이러한 작제물은 또한 유사한 EC50으로 $CD4^+$ 및 $CD8^+$ T 세포를 활성화시키는 반면에(**도 7** 및 **도 8**), 음성 대조군 분자는 T 세포를 활성화시키지 않았으며, 이는 H929 세포 사멸이 CD3 방향 전환에 의한 T 세포 활성화의 결과임을 나타낸다. 모든 EC50 값은 **표 10**에 나타나 있다.

[1728] [표 10]

CD3/BCMA 이중특이성 분자 세포독성 분석의 EC50 값

EC50/Cmax %세포용해	CD8B24 (널(null))	BC3B190 (W245 KiH)	BCMB1055	BCMB1056	BCMB1050	BCMB1052	BCMB1049	BCMB1051
하부	16.68	15.97	16.06	17.17	17	15.44	16.46	16.68
상부	피팅 없음	91	93.19	92.74	94.58	93.38	92.71	92.42
EC50 (nM)	피팅 없음	0.05224	0.03013	0.07582	0.01413	0.04893	~0.03485	0.05942
EC50/CD4/CD25+ Cmax	**CD8B24 (널)**	**BC3B190 (W245 KiH)**	**BCMB1055**	**BCMB1056**	**BCMB1050**	**BCMB1052**	**BCMB1049**	**BCMB1051**
하부	7.583	7.521	7.455	8.294	8.053	8.118	8.584	8.666
상부	피팅 없음	90	87.4	82.69	86.38	80.86	86.84	84.91
EC50 (nM)	피팅 없음	0.1093	0.04474	0.1052	0.02216	0.06274	0.04093	0.08699
EC50/CD8/CD25+ Cmax	**CD8B24 (널)**	**BC3B190 (W245 KiH)**	**BCMB1055**	**BCMB1056**	**BCMB1050**	**BCMB1052**	**BCMB1049**	**BCMB1051**
하부	피팅 없음	1.209	0.9695	1.417	1.317	0.9409	1.645	1.672
상부	피팅 없음	86.54	81.24	75.32	80.06	73.52	76.97	73.98
EC50 (nM)	피팅 없음	0.1718	0.08588	0.1502	0.03431	0.1169	0.07442	0.1443

[1729]

[1730] **6.2.4 대규모 단백질 발현 및 정제**

[1731] 3개의 이중특이성 단백질(TD01B46, TD01B48 및 TD01B49)은 소량에 대해 기술된 바와 같이 (500 ml 또는 1L)에서 보다 큰 규모 발현으로 추가로 발현되었다. 이들 단백질은 다음과 같이 약간 다른 공정을 사용하여 높은 균질성으로 정제되었다. 선택된 샘플의 정제된 세포 배양 상청액 0.5 리터를 AKTA PURE 시스템(GE Healthcare)에서 1xdPBS(pH 7.2)를 사용하여 사전 평형화된 5 mL 사전 포장된 HITRAP MABSELECT PRISMA 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 컬럼을 1 × dPBS(pH 7.2)의 5개의 컬럼 부피(CV)로 세척하였다. 세척 후, 100 mM 아세트산나트륨(pH 3.5)의 3 내지 5개의 CV를 사용하여 결합된 항체를 용출시켰다. 용출 후 농축된 분획의 수집과 함께, Akta Pure 시스템의 혼합 밸브를 사용하여 단백질을 15%(v/v) 2.5 M Tris-HCl(pH 7.5)로 중화시켰다. 수집된 물질을 각 단백질별로 모아서, 0.2 μm 필터로 주사기 여과하였다. 샘플을 Akta Xpress 시스템(Amersham Biosciences Corp.)의 사전 평형화된 5 mL CAPTURESELECT CH1-XL 사전 포장된 친화성 컬럼(Thermo Scientific)에 로딩하고, 4개의 CV의 1xdPBS(pH 7.2)로 세척하였다. 그 다음에, 결합된 항체를 5개의 CV의 100 mM 아세트산나트륨(pH 3.5)을 사용하여 컬럼에서 용출시키고, 농축된 분획을 수집하였다. 수집된 물질을 최종 부피의 15%(v/v) 2.5 M Tris-HCl(pH 7.5)로 중화시키고, 0.2 μm 필터로 주사기 여과하였다. 샘플을 20 mM MES(pH 5.5)로 8 내지 10배 희석하고, 20 mM MES(pH 5.5)로 평형화된 AKTA PURE 시스템(GE Healthcare)을 사용하여 180 mL CAPTO S IMPACT 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 컬럼을 1개의 CV의 20 mM MES(pH 5.5) 및 3개의 CV의 20 mM MES(pH 6.5)로 세척하여, 느슨하게 결합된 불순물을 제거하였다. 단백질은 선형 구배(0 내지 30% 완충액 B)를 통해 15개의 CV의 완충액 B(20 mM MES, 1M 염화나트륨, pH 6.5)로 용출되었다. 분획을 모아서 0.2 μm 필터를 통과시켰다. 모든 샘플을 AKTA AVANT 시스템(GE Healthcare)을 사용하여 1xdPBS(pH 7.2)로 사전 평형화된 120 mL Superdex 200 pg SEC 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 단백질을 1.5개의 CV의 1 x dPBS(pH 7.2)를 사용하여 컬럼에서 용출시켰다. 정제된 단백질의 농도를 DROPSENSE 분광광도계에서 경로 길이가 0.1 및 0.7 mm인 280 nm에서의 흡광도로 측정하였다. 정제된 단백질의 품질은 200 mM 인산나트륨(pH 6.8)을 러닝 완충액으로 사용하여 20분간 1 mL/min으로 SDS-PAGE (3.5 μg의 샘플, Invitrogen, NuPage 4-12% Bis-Tris) 및 분석적 크기 배제 HPLC(20 μg의 샘플; 컬럼: TSKgel BioAssist G3SW×l, 7.8 mm ID × 30cm H, 5 μm, TOSOH; 가드 컬럼: TSKgel BioAssist SWxl 가드 컬럼, 6 mm ID × 4cm H, 7 μm, TOSOH; Agilent HPLC system)에 의해 평가하였다. 내독소 수준은 비탁(turbidometric) LAL 분석(PYROTELL®-T, Associates of Cape Cod; 미국 매사추세츠주 팰머스 소재)을 사용하여 측정하였다.

[1732] 한 세트의 작제물을 선택하여, 보다 큰 규모의 발현 및 정제로 이동시키고, 분석 패널에 사용할 수 있는 고도로 정제된 재조합 항체의 대규모 배치를 생성하여, 스테이플링 기술을 추가로 테스트하였다. 상술한 데이터에 기초하여, TD01B46(BCMB749 x Cris7b spFv), TD01B48(BCMB749 x Cris7b scFv G4S) 및 TD01B49(BCMB749 x Cris7b scFv Bird)의 세 가지 Cris7b 함유 분자를 선택하였다. Expi-CHO에서의 대규모 발현과 이러한 항체 샘플의 보다 철저한 정제는 소규모 정제된 샘플에서 볼 수 있듯이 제품 품질 및 수율에서 보다 뚜렷한 경향을 나타내었다 (**도 9**). scFv 함유 이중특이성 샘플(B48, B49)의 생산은 CH1 후 정제된 샘플을 지배하는 것으로 크고 더 높은 분자량의 올리고머 피크("O")를 나타내었다. 이에 비해, spFv 함유 이중특이체(B46)는 원하는 단량체 피크에 대응하는 우세한 피크로 남아 있었다. 이러한 데이터는 스테이플링 기술이 구현되었을 때 단백질 생산 및 품질이 개선되었음을 함께 강조한다.

[1733] **6.2.5 고농도 및 열 스트레스 연구**

[1734] 본 연구를 위해, 10 kDa MWCO Amicon 여과 유닛(Cat#UFC803024)을 6분간 4200g로 물로 세척하였다. TD01B46(2 mg/ml) 및 TD01B49 단백질(0.5 mg/ml)을 각각 미리 세척된 필터에 로딩하여, 한 번에 15분간 4200 rpm으로 원

심분리하였다. 단백질 농도를 SoloVPE 기기(미국 뉴저지 소재의 C Technologies)를 사용하여 측정하였다. 스테이플링된 이중특이성 단백질과 스테이플링되지 않은 이중특이성 단백질의 최종 농도는 각각, 68 mg/ml 및 48 mg/ml이었다. 각 단백질 샘플을 2개의 동일한 부분으로 나누어, 하나는 4℃로, 다른 하나는 40℃로 보관하였다. 2주마다 각각의 배양된 샘플에서 50 μl의 단백질을 채취하여, 1x dPBS로 1 mg/ml로 희석하고; 분취된 샘플 20 μg을 분석적 크기 배제 HPLC(TSKgel BioAssist G3SWxl, 7.8mm ID × 30cm H, 5um, TOSOH; 가드 컬럼: TSKGEL BIOASSIST SWxl 가드 컬럼, 6mm ID × 4cm H, 7um, TOSOH; Agilent HPLC system)에 로딩하여, 200 mM 인산나트륨(pH 6.8)을 러닝 완충액으로 사용하여 20분간 1 mL/min으로 UV 280 nm에서 샘플 분리를 위해 모니터링하였다.

[1735] 열 스트레스에 의해 유도된 응집에 대한 spFv의 영향은 4℃에서 단백질 보관 안정성의 예측 지표로서 추가로 평가되었다(Bailly et al, (2020); mAbs; Volume 12, Issue 1). 고도로 정제된 Cris7b scFv/spFv 이중특이체(각각, TD01B49 및 TD01B46)(순도 > 98.5%)를 DPBS에서 약 60 mg/ml로 농축시켰다. 그 다음에, 농축된 샘플을 4 및 40℃에서 인큐베이션하였다. 2주 간격으로, 각 샘플의 작은 분취량을 1 mg/ml로 희석한 다음에, SEC에서 실행하였다. 그 결과는 **도 10**에 나타나 있다. 4℃에서 6주간의 배양 기간에 걸쳐, spFv 이중특이성 TD01B46(왼쪽 패널)은 단량체로 존재하는 반면에, 40℃에서는 6주에 약 5% 응집체 종으로 완만하게 증가한 것으로 나타났다. 대조적으로, 4℃ 또는 40℃에서 동일한 기간 동안, scFv 이중특이성 TD01B49(오른쪽 패널)는 각각, 약 18% 및 32% 응집체 종으로 큰 증가를 나타내었다. 이러한 데이터는 spFv 함유 이중특이체가 높은 단백질 농도에서 열에 의한 응집에 훨씬 더 저항력이 있었음을 보여준다.

[1736] **6.2.6 Cris7 이중특이성 분자의 생물층 간섭계**

[1737] 재조합 CD3 항원(인간 CD3 엡실론 및 CD3 델타 헤테로이량체 단백질, Acro Biosystems) 및 재조합 BCMA 항원에 대한 Cris7b scFv 및 스테이플링된 spFv 이중특이성 분자의 결합은 Octet HTX 기기(Sartorius, 이전에는 ForteBio)를 사용하여 생물층 간섭계(BLI)로 측정되었다. BCMA 결합을 평가하기 위해, 스트렙트아비딘(SA) 캡처 센서(Sartorius)에 비오틴화 BCMA 단백질을 PBS에서 약 1 nm 신호로 로딩하였다. 이중특이성 샘플을 2배 희석(100 nM 내지 1.5 nM)으로 100 nM에서 시작하여 7가지 항체 농도로 항원 코팅된 SA 센서에 로딩하고, 비특이적 상호작용을 방지하기 위해 0.05% tween-20을 포함한 1x DPBS로 희석하였다. 결합 및 해리 시간은 각각, 900초이었다. CD3 결합을 평가하기 위해, 항 인간 IgG Fc(AHC) 포획 바이오센서(Sartorius)에 PBS 중의 3 μg/mL 관심 이중특이성 샘플을 로딩하였다. 로딩 후에, 센서 팁을 차단을 위해 1x DPBS + 0.02% Tween 20 + 1 mg/mL 소 혈청 알부민(BSA)으로 세척하였다. 재조합 CD3 항원을 2배 희석(100 nM 내지 1.5 nM)으로 100 nM에서 시작하여 7가지 농도로 항체 코팅된 센서에 로딩하고, 비특이적 상호작용을 방지하기 위해 0.02% tween 20 및 1 mg/mL BSA를 포함한 1x DPBS로 희석하였다. 각각, 결합은 1800초 동안, 해리는 900초 동안 모니터링되었다. 모든 측정은 30℃에서 1,200 rpm으로 교반하면서 수행되었다. 완충 효과를 위해 센서그램을 참조한 다음에, FORTEBIO 데이터 분석 HT 소프트웨어(버전 12.0.1.55)를 사용하여 분석하였다. 동적 반응은 결합(Kon), 해리(Koff) 속도 상수 및 평형 해리 상수(KD)에 대한 값을 얻기 위해 1:1 피팅 모델 또는 2:1 이종 리간드 결합 모델을 사용하여 기준선을 빼고 정렬하고 전체적으로 피팅하였다.

[1738] 스테이플링이 scFv 또는 Fab 함유 아암에서 관심 표적 항원에 대한 결합에 영향을 미치는지 여부를 결정하기 위해, 고도로 정제된 이중특이성 샘플(TD01B46, B48 및 B49)을 사용하여 생물층 간섭계(BLI) 및 ELISA를 사용하여 결합을 수행하였다. 재조합 CD3E/D 헤테로이량체 단백질을 사용하여, scFv/spFv 항 CD3 아암의 결합을 평가하였다. 결합 측정으로부터, scFv 및 spFv 이중특이체가 CD3에 유사하게 결합하는 것으로 나타났으며, 이는 scFv에 '스테이플링'을 추가해도 CD3 결합에 변화가 없었음을 나타낸다(**도 11**, BLI 센서그램). BLI의 센서그램은 이종 결합 모드에는 잘 맞았지만, 단순한 1:1 결합 모드에는 잘 맞지 않았다. 동역학 값(KD1/KD2, ka1/ka2, kd1/kd2)은 스테이플링된 항 CD3 분자가 어느 하나의 scFv 분자에 대해 약간 향상되지는 않더라도 유사한 친화도를 나타냄을 보여주었다(**표 11**). 이러한 데이터는 spFv가 대응 scFv 단백질의 결합 친화도를 유지함을 나타낸다.

[1739] [표 11]

2:1 이종 리간드 피팅 모델을 사용한 BLI에 의한 scFv 및 spFv 이중특이성 분자의 CD3 결합

샘플명	KD1 (M)	KD2 (M)	ka1 (1/Ms)	ka2 (1/Ms)	kdis (1/s)	kdis2 (1/s)
Cris7 scFv Bird (B49)	1.27E-10	3.42E-09	1.60E+05	1.64E+04	2.04E-05	5.61E-05
Cris7 spFv (B46)	2.22E-11	2.99E-09	1.58E+05	1.56E+04	3.49E-06	4.65E-05
Cris7 scFv B48 G4S	2.38E-10	4.62E-09	1.47E+05	1.61E+04	3.49E-05	7.45E-05

[1740]

[1741] 6.2.7 세포독성 분석

[1742] T 세포 활성화 및 종양 세포의 사멸 가능성에 대한 BCMA 표적화 시험 분자의 효과를 측정하기 위해, Intellicyt iQue3 및 ForeCyt 소프트웨어(Sartorius)를 이용하였다. H929-Fluc-GFP 세포는 2개의 인간 공여자 Pan T 세포(Hemacare)에 대한 표적 세포로서 작용하였다. 분석은 3:1의 T 세포 대 표적 세포비로 96웰 플레이트에 설정되었다. 시험 분자를 10 nM의 시작 농도로 첨가하고 완전 배지에 1:4로 연속 희석하였다. 모든 분자를 최소한 이중실험으로 시험하였다. 사멸 및 T 세포 활성화 상태의 검출을 72시간 후에 유세포 분석에 의해 평가하였다. H929에서 발현된 내인성 GFP를 사용하여, T 세포를 표적 세포로부터 분리하였다. 세포독성은 근적외선 Live/Dead 염색제(ThermoFisher)를 사용하여 측정하고, CD4 및 CD8 T 세포의 활성화는 항 인간 CD25-BV650(BD Biosciences), 항 인간 CD4-BV510(Biolegend) 및 항 인간 CD8-PE/Cy7(Biolegend)로 평가하였다. Prism 소프트웨어(Graphpad)를 사용하여, 세포독성 및 CD25 MFI 데이터를 엑스포트하고, 로그 변환하고, 4개의 파라미터를 로지스틱 피팅시켜 EC50 보고를 위한 회귀 곡선을 생성하였다.

[1743] T 세포 활성화 및 종양 세포의 사멸 가능성에 대한 BCMA 표적화 이중특이성 분자의 효과를 측정하기 위해, H929-Fluc-GFP 세포는 2개의 인간 공여자 Pan T 세포에 대한 표적 세포로서 작용하였다. 사멸 및 T 세포 활성화 상태의 검출을 72시간 후에 유세포 분석에 의해 평가하였다. 모든 이중특이성 단백질은 매우 유사한 EC50을 사용한 세포독성 분석에서 BCMA+ H929-GFP+ 세포를 강력하게 사멸시킨 반면에(데이터는 표시되지 않음), Cris7b scFv/비표적화 Fab(CD8B24)를 사용한 음성 대조군 이중특이체는 사멸 활성을 나타내지 않았다. scFv 또는 spFv 도메인을 포함하는 모든 이중특이성 작제물은 또한 유사한 EC50으로 $CD4^+$ 및 $CD8^+$ T 세포를 활성화시키는 반면에, 음성 대조군 분자는 T 세포를 활성화시키지 않았다(데이터는 표시되지 않음). 이는 H929 세포 사멸이 CD3 방향 전환에 의한 T 세포 활성화의 결과임을 뒷받침한다. 종합하면, spFv는 치료용 작제물에서 scFv 기능을 완전히 유지하였다. **도 12**에 나타낸 바와 같이, scFv 및 spFv 이중특이체는 유사한 CD3 매개 사멸 특성을 나타내었다.

[1744] 6.3 실시예 3: 우수한 특성을 지닌 바이오치료제(biotherapeutics)용 "스테이플링" scFv

[1745] 본 예에서는 스테이플링되지 않은 버전에 비해 안정성을 크게 향상시키는 간단하고 널리 적용 가능한 scFv "스테이플링" 전략이 제공되었다. "스테이플링된" scFv 분자(spFv)는 일반적으로 카파 및 람다 경쇄가 있는 scFv 분자의 경우 Tm이 약 10℃ 증가한다. 항 CD3 scFv/spFv 및 항 BCMA Fab 이중특이성 분자의 세트에서, 결과는 항 CD3 scFv를 스테이플링하면 이중특이성 단량체의 수율과 품질이 크게 향상되는 반면에, 일부의 scFv 함유 이중특이체는 단량체와 올리고머의 혼합물임을 보여주었다. spFv는 대응 scFv 함유 이중특이체와 비교하여, CD3에 대한 결합 친화도를 유지하였다. scFv 및 spFv 이중특이성 단백질은 BCMA+ 종양 세포를 유사하게 사멸시키면서 CD4+ 및 CD8+를 동일하게 활성화하였다. spFv 함유 이중특이체는 또한 고농도에서 열 스트레스 시에 최소한의 응집을 나타낸 반면에, 대응 scFv 분자는 상당한 응집을 나타내었다. 이는 다수의 다른 spFv 함유 이중특이성 및 삼중특이성 단백질에서도 마찬가지였다. 따라서, spFv는 개발 가능성이 크게 향상된 이중특이체, 다중특이체와 같은 동등하게 강력한 바이오치료제로 이어질 수 있다. 또한, 스테이플링은 scFv 전환의 성공률을 높일 수 있으므로, 더 많은 scFv 분자를 치료용 작제물의 분자 빌딩 블록으로 사용할 수도 있다.

[1746] 6.3.1 재료 및 방법

[1747] 6.3.1.1 CAT2200 scFv/spFv의 발현 및 정제

[1748] CAT2200a scFv LH를 제외한 모든 scFv 및 spFv 분자를 CMV 프로모터 구동된 포유류 발현 벡터 내로 클로닝하였다. 이러한 작제물을, 제조사 프로토콜을 사용하여 Expi293 세포에 형질감염시키고 세포를 5일 동안 배양하였다. AKTAXPRESS 시스템(GE Healthcare)을 통해 1 ml His-TRAP HP 컬럼(GE Healthcare) 상에서 정제된 상청액으로부터 각각의 단백질을 정제하였다. 컬럼을 0 내지 100% 용출 완충액(세척 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 20mM 이미다졸; 용출 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 500 mM 이미다졸)의 구배를 사용하여 준비하여, 느슨하게 결합된 니켈을 제거한 다음에, DPBS에서 다시 평형을 이루었다. 제거된 상청액을 먼저 50 mM Tris, pH 7.5 및 20 mM 이미다졸로 조정한 다음, 4℃에서 0.8 mL/min으로 1mL HisTrap HP 컬럼 위로 로딩하였다. 이어서, 안정적인 기준선이 얻어질 때까지 컬럼을 PBS로 세척하였다. 이어서, 컬럼을 20 CV의 세척 완충액으로 추가로 세척하고, 용출 완충액으로 단일 주입 루프로 용출하여, 26/10 HIPREP 탈염 컬럼을 통해 1 x DPBS에서 탈염하고 분획을 수집하였다. 이어서, 정제된 단백질을 함유하는 분획을 풀링하고 농축시켰다. B18 scFv 및 spFv 단백질을 열 안정성 측정(DSC 및 NanoDSF)을 위해 DPBS로 투석하고 다른 연구를 위해 25 mM Tris, pH 7.5 및 100 mM NaCl로 투석하였다. 다른 scFv 및 spFv 단백질을 25 mM MES, pH 6.0 및

100 mM NaCl로 투석하였다.

[1749] HEK293에서 생산된 CAT2200a scFv LH를 Sino Biological에서 구입하였다. 농도는 DPBS(pH 7.2) 중에서 0.77 mg/mL이었다. IL-17의 돌연변이체(K70Q A132Q C106S 돌연변이를 갖는 12-132, 이하에서 간단하게 IL-17)는 Accelagen(미국 캘리포니아 소재)으로부터 구입하였다. 단백질은 그의 고유한 재접힘 프로토콜에 따라 대장균(*E. coli*)봉입체로부터 재접힘되었고, 20 mM NaCl, 20 mM MES, pH 6.0 중에서 1.50 mg/mL로 제공되었다.

[1750] **6.3.1.2 항 CD3 Cris7a 및 Cris7b scFv/spFv의 발현 및 정제**

[1751] 모든 scFv 및 spFv 분자를 CMV 프로모터 구동된 포유류 발현 벡터 내로 클로닝하였다. BCMB749 Fab 아암 서열을 '인간화'하기 위해, AbM 정의를 사용하여, CDR을 마우스 모 서열에 복귀 돌연변이가 통합된 인간 VL 및 VH에 이식하였다. 이러한 작제물을, 제조사 프로토콜을 사용하여 Expi293 세포에 형질감염시키고 세포를 5일 동안 배양하였다. AKTAXPRESS 시스템(GE Healthcare)을 통해 1 ml His-TRAP HP 컬럼(GE Healthcare) 상에서 정제된 상청액으로부터 각각의 단백질을 정제하였다. 컬럼을 0 내지 100% 용출 완충액(세척 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 20mM 이미다졸; 용출 완충액: 50 mM Tris, pH 7.5, 500 mM NaCl, 500 mM 이미다졸)의 구배를 사용하여 준비하여, 느슨하게 결합된 니켈을 제거한 다음에, DPBS에서 다시 평형을 이루었다. 제거된 상청액을 먼저 50 mM Tris, pH 7.5 및 20 mM 이미다졸로 조정한 다음, 4℃에서 0.8 mL/min으로 1 mL HisTrap HP 컬럼 위로 로딩하였다. 이어서, 안정적인 기준선이 얻어질 때까지 컬럼을 PBS로 세척하였다. 이어서, 컬럼을 20 CV의 세척 완충액으로 추가로 세척하고, 용출 완충액으로 단일 주입 루프로 용출하고, 26/10 HiPrep 탈염 컬럼을 통해 1 x DPBS에서 탈염하고 분획을 수집하였다. 이어서, 정제된 단백질을 함유하는 분획을 풀링하고 농축하였다. scFv 및 spFv 단백질을 열 안정성 측정을 위해 DPBS로 투석하였다.

[1752] **도 23**은 BCMB749의 인간화 및 서열 정렬을 나타낸다. 각각의 서열 정렬은 모(위), 선택된 인간 수용체 생식세포계열 서열(가운데) 및 이탤릭체로 된 복귀 돌연변이가 이식된 CDR(아래)을 포함한다. CDR은 밑줄이 그어져 있다. 볼드체: 프레임워크 영역의 CDR 지원 위치. 박스형: VL/VH 인터페이스 잔기. 인간화 방법의 경우, VH 및 VL 도메인의 마우스 모 서열에 **도 23**의 서열 정렬에 나타낸 바와 같이 주석을 달았다. CDR은 AbM 관례에 따라 정의되었으며, 밑줄이 그어져 있다. 프레임워크 위치는 CDR 지원(굵은 글꼴)과 VL/VH 인터페이스(박스형)로 분류되었다. 모 서열은 인간 생식세포계열 서열에 대해 정렬되었으며, 서열 동일성에 따라 하나의 VH 및 하나의 VL이 선택되었다. VL의 경우, 인간 IGKV1-12*01이 선택되었고, VH의 경우 IGHV1-3*01이 선택되었다. 선택된 J 세그먼트는 서열 동일성에 따라 회색으로 강조 표시되었다. 서열 정렬(VL 상부 패널 및 VH 하부 패널)에서, 첫 번째 서열은 마우스 모 서열이고, 중간 서열은 선택된 인간 생식세포계열 수용체이고, 맨 아래 서열은 인간화 변이체이었다. 인간화 변이체를 생성하기 위해, 상기에서 정의한 CDR을 수용체 인간 GL의 대응 영역에 이식하였다. CDR 지원 및/또는 VL/VH 인터페이스로 분류된 위치는 모 수용체와 인간 수용체 간에 다른 경우에 모 아미노산으로 복귀 돌연변이되었다. 인간화 VL 및 VH 도메인에는 각각, 3개 및 5개의 복귀 돌연변이가 있었다.

[1753] **6.3.1.3 단백질 샘플의 SDS-PAGE 분석**

[1754] Cris7a 및 Cris7b scFv 및 spFv 도메인 단백질은 1× NuPAGE LDS 샘플 완충액(Invitrogen)을 첨가하여 1× dPBS에서 0.3 mg/mL로 준비되었다. 샘플을 반으로 나누고, 한 세트에 1 mM DTT를 첨가하여 샘플을 환원시켰다. 모든 샘플을 로딩 전에 90℃에서 5분간 가열하였다. 모든 샘플의 20 마이크로리터를 SEEBLUE PLUS2 Pre-stained Ladder(Invitrogen)와 함께, 4 내지 12% Bis-Tris NuPAGE Gel(Invitrogen)에 로딩하여, 180V에서 45분간 실행하였다. 최종 겔을 SIMPLYBLUE SafeStain(Invitrogen)으로 RT에서 1시간 동안 염색한 다음에, ddH20에서 하룻밤 동안 탈염색하였다.

[1755] **6.3.1.4 CD3/BCMA 이중특이체의 소규모 발현 및 정제**

[1756] 모든 이중특이성 scFv 및 spFv 분자를 대응 Fab HC 및 LC 아암과 함께, CMV 프로모터 구동된 포유류 발현 벡터에 클로닝하였다. 이러한 작제물을, 제조사 프로토콜을 사용하여 ExpiCHO 세포에 형질감염시키고 세포를 7일 동안 배양하였다. 모든 샘플을 채취하여, 얻어진 상청액을 0.2 μm 필터를 통해 여과하여 정화하였다. 샘플을 2단계 과정을 통해 정제하였다. 정제된 상청액을 먼저 HITRAP MABSELECT SURE(단백질 A) 1mL 컬럼(GE Healthcare)에 통과시켰다. 컬럼을 평형화하고,1X DPBS로 세척하여; 최종 샘플을 0.1 M 아세트산나트륨(pH 3.5)으로 용출시켰다. 단백질이 용출되면, 샘플을 즉시 2.5 M Tris-HCl pH 7.5로 중화한 다음에, 0.5 mL CAPTURESELECT CH1-XL Affinity Matrix(ThermoFisher)에 로딩하였다. CH1 컬럼을 평형화하고, 1× DPBS로 세척하여, 최종 샘플을 0.1 M 아세트산나트륨(pH 3.5)으로 용출시켰다. 샘플을 1× DPBS로 투석하여 보관하고,

30 μL의 샘플에 대하여 1X DPBS를 러닝 완충액으로 사용하여 Agilent AdvanceBio SEC 300A(컬럼) (Agilent)에서 샘플 품질 및 순도를 평가하였다. 최종 샘플을 평가하여, A280으로 농도를 측정하고, 4℃로 보관하였다.

[1757] **6.3.1.5 대규모 단백질 발현 및 정제**

[1758] 3개의 이중특이성 단백질(TD01B46, TD01B48 및 TD01B49)을 더 큰 규모의 발현(500 ml 또는 1L)으로 추가로 발현시켜, 농축 및 응집 연구를 위한 충분한 단백질을 생성하였다. 단백질을 상술한 바와 같이 보다 큰 부피로 발현시켰다. 이들 단백질은 다음과 같이 약간 다른 공정을 사용하여 높은 균질성으로 정제되었다. 선택된 샘플의 정제된 세포 배양 상청액 0.5 리터를 Akta Pure 시스템(GE Healthcare)에서 1xdPBS(pH 7.2)를 사용하여 사전 평형화된 5 mL 사전 포장된 HITRAP MABSELECT PRISMA 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 컬럼을 1 × dPBS(pH 7.2)의 5개의 컬럼 부피(CV)로 세척하였다. 세척 후, 100 mM 아세트산나트륨(pH 3.5)의 3 내지 5개의 CV를 사용하여 결합된 항체를 용출시켰다. 용출 후 농축된 분획의 수집과 함께, AKTA PURE 시스템의 혼합 밸브를 사용하여 단백질을 15%(v/v) 2.5 M Tris-HCl(pH 7.5)로 중화시켰다. 수집된 물질을 각 단백질별로 모아서, 0.2 μm 필터로 주사기 여과하였다. 샘플을 AKTA XPRESS 시스템(Amersham Biosciences Corp.)의 사전 평형화된 5 mL CaptureSelect CH1-XL 사전 포장된 친화성 컬럼(Thermo Scientific)에 로딩하고, 4개의 CV의 1×dPBS(pH 7.2)로 세척하였다. 그 다음에, 결합된 항체를 5개의 CV의 100 mM 아세트산나트륨(pH 3.5)을 사용하여 컬럼에서 용출시키고, 농축된 분획을 수집하였다. 수집된 물질을 최종 부피의 15%(v/v) 2.5 M Tris-HCl(pH 7.5)로 중화시키고, 0.2 μm 필터로 주사기 여과하였다. 샘플을 20 mM MES(pH 5.5)로 8 내지 10배 희석하고, 20 mM MES(pH 5.5)로 평형화된 AKTA PURE 시스템(GE Healthcare)을 사용하여 180 mL CAPTO S IMPACT 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 컬럼을 1개의 CV의 20 mM MES(pH 5.5) 및 3개의 CV의 20 mM MES(pH 6.5)로 세척하여, 느슨하게 결합된 불순물을 제거하였다. 단백질은 선형 구배(0 내지 30% 완충액 B)를 통해 15개의 CV의 완충액 B(20 mM MES, 1M 염화나트륨, pH 6.5)로 용출되었다. 분획을 모아서 0.2 μm 필터를 통과시켰다. 모든 샘플을 AKTA AVANT 시스템(GE Healthcare)을 사용하여 1×dPBS(pH 7.2)로 사전 평형화된 120 mL SUPERDEX 200 pg SEC 컬럼(Cytiva)에 로딩하였다. 단백질을 1.5개의 CV의 1xdPBS(pH 7.2)를 사용하여 컬럼에서 용출시켰다. 정제된 단백질의 농도를 DROPSENSE 분광광도계에서 경로 길이가 0.1 및 0.7 mm인 280 nm에서의 흡광도로 측정하였다. 정제된 단백질의 품질은 200 mM 인산나트륨(pH 6.8)을 러닝 완충액으로 사용하여 20분간 1 mL/min으로 SDS-PAGE(3.5 μg의 샘플, Invitrogen, NuPage 4-12% Bis-Tris) 및 분석적 크기 배제 HPLC(20 μg의 샘플; 컬럼: TSKgel BIOASSIST G3SWxl, 7.8 mm ID × 30 cm H, 5 μm, TOSOH; 가드 컬럼: TSKgel BIOASSIST SW×l 가드 컬럼, 6 mm ID × 4 cm H, 7 μm, TOSOH; Agilent HPLC system)에 의해 평가하였다. 내독소 수준은 비탁 LAL 분석(PYROTELL-T, Associates of Cape Cod; 미국 매사추세츠주 팰머스 소재)을 사용하여 측정하였다.

[1759] **6.3.1.6 시차 주사 열량측정법(DSC)**

[1760] scFv 및 spFv 단백질을 GLk1의 경우 1X DPBS(Gibco) 및 GLk2의 경우 CAT2200a/CAT2200b 또는 MES(25 mM MES, pH 6.0, 100 mM NaCl)에 대해 하룻밤 동안 투석하였다. 이어서, 투석 완충액을 0.22 마이크로미터로 여과하고 DSC 실험에서 기준 용액으로서 그리고 완충액-완충액 블랭크용으로 사용하였다. 단백질을 여과된 완충액 중에 약 0.5 mg/mL로 희석하고 각각의 단백질 또는 완충액 샘플 400 μL을 96-웰 플레이트(MicroLiter Analytical Supplies, 07-2100)에 로딩하고 실험 과정에 걸쳐 오토샘플러 서랍 내에 4℃에서 유지하였다. 오토샘플러가 장착된 MICROCAL Capillary DSC(Malvern)를 사용하여, DSC 실험을 수행하였다. 샘플 재스캔 없이 60℃/h 스캔 속도로 25 내지 95℃에서 DSC 스캔을 수행하였다. 피드백을 선택하지 않았고 여과 기간을 15초로 설정하였다. 각 샘플 후, 세포를 10% Contrad-70 용액으로 세척하고 완충액-완충액 블랭크를 실행하였다. MICROCAL VP-Capillary DSC Automated Analysis add-on(Malvern)과 함께 Origin 7.0을 사용하여 데이터 분석을 수행하였다. 기준선 범위 및 유형을 수동으로 선택한 다음 차감하였다. 샘플 곡선에서 이전의 완충액 블랭크를 차감한 후에 농도 의존성 정규화를 수행하였다. 열 용융 프로파일을 비-2-상태 전이 모델을 사용하여 분석하였다. 반복 곡선 피팅을 행하여, 표 12에 기록된, 용융과 관련된 열역학적 파라미터, 예를 들어 열 안정성, 엔탈피를 도출하였다.

[1761] [표 12]

시험 분자 Glk1, Glk2, CAT2200 및 Cris7 변이체의 scFv 및 spFv 의 열 안정성(DSC) ΔTm = Tm(spFv)- Tm(scFv).

분자명	배향	링커 (n+4+m)	Tm (℃)	Tm 오차 (℃)	ΔTm	ΔH (kcal/mol)	ΔH 오차 (kcal/mol)	ΔH 비
GLk1 scFv	LH	4x G4S	71.2	0.07		124.5	2.7	
GLk1 spFv	LH	9+4+5	80.2	0.05	9.0	160.5	3.2	1.29
GLk1 scFv	HL	4x G4S	70.1	0.05		134.5	2.0	
GLk1 spFv	HL	9+4+5	79.1	0.04	9.1	160.5	2.6	1.19
Glk2 scFv	LH	4x G4S	57.9	0.03		129.5	1.6	
Glk2 spFv	LH	9+4+5	68.6	0.02	10.7	148.0	1.7	1.14
Glk2 scFv	HL	4x G4S	57.3	0.03		130.0	1.5	
Glk2 spFv	HL	6+4+6	64.7	0.02	7.5	140.5	1.7	1.08
CAT2200b scFv	LH	4x G4S	57.2	0.04		91.2	1.6	
CAT2200a spFv	LH	9+4+4	68.8	0.04	11.6	143.5	2.5	1.57
CAT2200a scFv	HL	4x G4S	55.9	0.08		97.4	2.7	
CAT2200b spFv	HL	9+4+4	67.4	0.04	11.5	151.5	2.7	1.56
Cris7a scFv	LH	4x G4S	59.7	0.04		124.0	2.4	
Cris7a spFv	LH	8+4+4	71.6	0.03	11.9	177.0	2.4	1.43
Cris7b scFv	LH	4x G4S	57.0	0.05		112.0	2.3	
Cris7b spFv	LH	8+4+4	68.6	0.03	11.5	176.0	2.5	1.57

[1762]

[1763] **6.3.1.7 UNCLE에 의한 열 안정성**

[1764] UNCLE 기기(Unchained Labs, 미국 캘리포니아주 플레전턴 소재)에서 고유 형광 및 정적 광산란(SLS) 분석을 통합하여 여러 scFv/spFv 쌍을 이루는 샘플의 단백질 안정성을 평가하였다. 열 용융 중간점(Tm)은 청색 파장 획득(청색 - 473 nm, 필터 4)을 통해 측정한 고유 형광과 UV 획득(UV - 226 nm, 필터 3) 설정을 통한 SLS에 의한 열 응집(Tagg)으로 측정하였다. 샘플 농도는 DPBS에서 0.1 내지 0.5 mg/mL 범위이었으며, 분석은 UNCLE Uni 큐벳에서 8.8 μL 샘플 부피를 사용하여 중복으로 수행하였다. 열 용융 프로파일은 20 내지 85℃에서 0.3℃/min의 선형 가열 램프를 사용하여 60초의 배양 기간과 30초의 플레이트 유지 기간으로 수집되었다. 데이터 수집과 분석은 Uncle 소프트웨어로 동시에 이루어졌으며, Tm 및 Tagg(Tonset) 값은 직접 엑스포트하였다.

[1765] **6.3.1.8 비결합 scFv 및 spFv의 결정화**

[1766] 단백질을 각각의 완충액 중에서 농축시켰다: GLk1 spFv VL-VH를 25 mM MES, pH 6.0, 100 mM NaCl 중에 8.67 mg/ml로; GLk1 spFv VH-VL을 25 mM MES, pH 6.0, 100 mM NaCl 중에 5 mg/ml로; GLk2 spFv VH-VL을 25 mM Tris, pH7.5, 100 mM NaCl 중에 8.66 mg/ml로; cat2200b spFv VH-VL을 25 mM MES, pH 6.0, 100 mM NaCl 중에서 농축시켰다. MOSQUITO 로봇을 사용하여 Corning 3550 크리스탈 트레이에서 시팅 드롭 포맷(sitting drop format)으로 각각의 단백질에 대한 결정화를 설정하였다. 각각의 웰은 100 nl의 단백질 및 100 nl의 저장 용액을 함유하고, 20℃에서 70 μl의 저장 용액에 대해 인큐베이션되었다. 저장 용액은 IH1 및 IH2 맞춤 조건뿐만 아니라 PEG 이온 스크린 HT(Hampton Research)이었다. 최적화 시도에서 저장 용액 성분을 변화시킴으로써 일부 초기 조건을 개량(refine)하였다. scFv 및 spFv 단백질 중 일부에 대해 회절 품질 결정을 얻었다. 결정을 20% 글리세롤이 보충된 모액 중에 몇 초 동안 담그고 액체 N2 중에서 급속 동결시켰다. Argonne National Lab에서 IMCA-CAT Beamline 17ID에서 X선 데이터를 수집하였다.

[1767] **6.3.1.9 IL-17과 복합체를 형성하는 CAT2200a scFv VL-VH 및 CAT2200a spFv VL-VH의 결정화**

[1768] 333 μL의 IL17(1.5 mg/ml)을 1.74 ml의 Cat2200a scFv(0.69 mg/mL)와 혼합하고 4℃에서 3시간 동안 인큐베이션하여, IL-17/ CAT2200a scFv VL-VH 복합체를 생성하였다. 혼합물을 10 kDa 컷오프 AMICON Ultra 농축기로 약 400 μL로 농축시키고 250 mM NaCl, 20 mM HEPES, pH 7.5 중에서 평형화된 SUPERDEX75 컬럼 상에 로딩하였다. 복합체에 해당하는 분획을 모아서 150 μL의 부피로 농축시켰다. 샘플을 4회 희석하고 농축시켰다: 350 μL 50 mM NaCl, 20 mM HEPES, pH 7.5를 첨가하여, 바로 150 μL 미만으로 농축시켰다. 부피는 약 105 μL가 되고, 농도는 2.69 mg/mL로 결정되었다. 결정화는 80 μL 저장 용액에 대한 Corning3550 플레이트에서 150 nL 단백질 + 150 nL 저장 용액을 사용하는, 사내에서 미리 배합된 완충액 및 침전제 조건의 세트인, MOSQUITO 결정화 로봇을 사용하여 시팅 드롭 포맷으로 설정되었다. 플레이트를 20℃에서 인큐베이션하였다. 조건들 중 하나(아세트산나트륨, pH 4.5, 25% PEG 3K, 0.2 M 아세트산암모늄)가 매우 작은 결정을 생성하였다. 이들을 채취하여, Hampton Seed Bead 튜브에서 100 μL 27% PEG 3350, 200 mM 아세트산암모늄, 100 mM 아세트산나트륨, pH 4.5 중의 Hampton Seed Bead를 사용하여 결정화 시드로 변화시켰다.

[1769] 상기 시드의 첨가를 제외하고는 동일한 절차에 의해 회절 품질 결정을 얻었다: 150 nL 단백질 + 100 nL 저장 용

액 + 50 μL 시드. 결정은 0.1 M Tris 8.5, 18% PEG3K, 0.2M $LiSO_4$로부터 성장하였고, 합성 모액(0.1 M Tris, pH 8.5, 10% PEG 3350, 0.2 M $LiSO_4$ 및 20% 글리세롤)으로 옮겨지고 액체 질소 중에서 급속 동결되었다. Argonne National Laboratory에서 IMCA-CAT ID17에서 X선 회절 데이터를 수집하였다.

[1770] 167 μl의 IL-17(250 μg)을 154 μl의 MSCW274(250 mM NaCl, 20 mM MES, pH 6.5 중 467 μg)와 혼합하고 4℃에서 하룻밤 동안 인큐베이션하여 IL-17/ CAT2200a spFv VL-VH 복합체를 생성하였다. 혼합물을 10 kDa MWCO Amicon Ultra 0.5 mL 농축기에서 약 100 μL로 농축한 다음, 희석 및 농축을 5회 반복하였다: 약 150 μL로 농축하고 350 μL 50 mM NaCl, 20 mM HEPES, pH 7.5를 첨가함. 최종 부피는 100 μL이었고 복합체의 농도는 6.0 mg/ml인 것으로 결정되었다. 결정화는 MOSQUITO 로봇을 사용하여 시팅 드롭에서 scFv/IL-17 복합체에 대해서와 유사하게 설정되었다. 시팅 드롭은 150 nL 단백질 + 120 nL 저장 용액 + 30 nL 시드(상기 scFv/IL-17)로 구성되었다. 저장 용액은 PEG 3350 농도 및 염을 변화시키는 조건의 세트였다. 결정화 플레이트를 20℃에서 인큐베이션하였다. 15.5% PEG 3350, 0.4 M NaH_2PO_4로부터 작은 결정을 얻었다. 결정을 16% PEG 3350, 0.2 M NaH_2PO_4, 20% 글리세롤로 옮기고, LN2에서 급속 동결시켰다. Argonne National Laboratory에서 IMCA-CAT ID17에서 X선 회절 데이터를 수집하였다.

[1771] 모든 X선 회절 데이터를 XDS(문헌[Kabsch *et al.* Acta crystallographica. Section D, Biological crystallography 66, 125-132 (2010)]) 및 CCP4(문헌[Collaborative Computational Project, N. The CCP4 suite: programs for protein crystallography. Acta crystallographica. Section D, Biological crystallography 53, 240-255 (1994)])로 처리하였다. 모든 결정 구조는 pdb id 2vxs(문헌[Gerhardt *et al.* Journal of molecular biology 394, 905-921 (2009)])의 구조를 검색 모델로 사용한 scFv CAT2200a scFv VL-VH/IL-17 복합체를 제외하고는, MOE(캐나다 몬트리올 소재)에서 생성된 상동성 모델과 함께, Phaser(문헌[Read *et al.* Acta crystallographica. Section D, Biological crystallography 57, 1373-1382 (2001)])를 사용하여 분자 치환(MR)으로 해결하였다. 구조 모델은 PHENIX(문헌[Adams *et al.* J Synchrotron Radiat 11, 53-55 (2004)])에서 정밀화되었으며, COOT(문헌[Emsley *et al.* Acta crystallographica. Section D, Biological crystallography 66, 486-501 (2010)])에서 수동으로 조정되었다. 분자 그래픽 도면을 PyMol(schrodinger 웹사이트)에서 생성하였다. X선 회절 데이터 및 정밀화 통계가 **표 13**에 제시되어 있다. Glk1spFv_LH(mscg380) 및 Glk1spFv_HL(mscg385)에 대한 원자 좌표는 각각, **표 18** 및 **표 19**에 나와 있다. Glk2spFv_HL(mscg274)에 대한 원자 좌표가 **표 20**에 나와 있다. CATspFv_HL(mscg379)에 대한 원자 좌표가 **표 21**에 나와 있다. CATscFv_LH/IL-17(scFv-Cat2200a)에 대한 원자 좌표가 **표 22**에 나와 있다. CATspFv_LH/IL-17(mscw374)에 대한 원자 좌표가 **표 23**에 나와 있다.

[1772] [표 13]

X 선 데이터 수집 및 정밀화 통계

데이터 수집	**Glk1spFv_LH(mscg380)**	**Glk1spFv_HL(mscg385)**
X 선 발생원	APS 17-ID	APS 17 ID
파장 (Å)	1.000	1.000
공간군	$P2_12_12_1$	P1
단위 셀 축 (Å),	45.63, 78.94, 257.30	37.94, 50.74, 63.20
각도 (º)	90, 90, 90	76.35, 89.20, 69.16
분해능 (Å) [a]	128.65-1.65 (1.84-1.65)*	61.23-2.10 (2.15-2.10)
측정 반사 수	338,834 (14,700)	123,954 (6,230)
고유 반사 수 [a]	54,237 (2,712)	24,805 (1,840)
<I/σ>	13.9 (2.0)	7.4 (2.3)
완전성 (%) [a]	47.8 (8.8)*	99.5 (99.2)
중복성 [a]	9.5 (9.9)	5.0 (3.5)
R_{sym} [a, c]	0.081 (0.955)	0.167 (0.721)
R_{pim} [a, d]	0.035 (0.431)	0.069 (0.390)
$CC_{1/2}$ [a, e]	1.00 (0.67)	0.99 (0.83)
ASU 당 분자 수 [f]	4	2
구조 정밀화		
분해능 (Å)	48.80-1.65 (1.68-1.65)*	35.35-2.10 (2.80-2.10)
정밀화에서의 반사 수	54,216 (139)	24,789 (2,592)
원자수	7,544	3,744
용매 원자 수	425	180
R_{cryst} [a, g]	0.211 (0.441)	0.182 (0.257)
R_{free} [a, h]	0.248 (0.666)	0.224 (0.328)
RMSD 결합 길이 (Å)	0.011	0.007
RMSD 결합각 (º)	1.37	0.93
평균 B 인자 ($Å^2$)		
단백질	28.9	34.6
용매	32.8	37.1
라마찬드란 플롯(Ramachadran plot) [i]		
선호 (%)	96.7	97.5
이상치(outlier) (%)	0.5	0.0
모든 원자 충돌 점수	6.9	5.2
PDB ID	8DY2	8DY0

* Staraniso(예를 들어, staraniso.globalphasing.org 참조)에 기초하여 보고된 분해능 한계는 각각, a*, b* 및 c*에서 2.82, 1.84, 1.65 Å 이다. 타원체 완전성은 각각, 88.6%(75.8%)이다.

[1773]

(계속)

데이터 수집	**Glk2spFv_HL(mscg274)**	**CATspFv_HL(mscg379)**
X 선 발생원	APS 17-ID	APS 17 ID
파장 (Å)	1.000	1.000
공간군	$P4_12_12$	$P3_121$
단위 셀 축 (Å),	63.03, 63.03, 124.96	63.34, 63.34, 104.58
각도 (º)	90, 90, 90	90, 90, 120
분해능 (Å) [a]	56.28-1.51 (1.65-1.51)*	48.59-2.40 (2.49-2.40)
측정 반사 수	381,408 (13,980)	95,063 (9,273)
고유 반사 수 [a]	30,532 (1,527)	9,925 (980)
<I/σ>	17.3 (1.5)	13.2 (2.0)
완전성 (%) [a]	75.5 (16.0)**	99.8 (99.6)
중복성 [a]	12.5 (9.2)	9.6 (9.5)
R_{sym} [a, c]	0.097 (1.777)	0.081 (1.294)
R_{pim} [a, d]	0.039 (0.776)	0.026 (0.417)
$CC_{1/2}$ [a, e]	1.00 (0.51)	1.00 (0.99)
ASU 당 분자 수 [f]	1	1
구조 정밀화		
분해능 (Å)	56.28-1.51 (1.56-1.51)	34.86-2.40 (2.75-2.40)
정밀화에서의 반사 수	30,529 (166)	9,683 (2,967)
원자수	2,096	1,743
용매 원자 수	289	0
R_{cryst} [a, g]	0.183 (0.209)	0.262 (0.507)
R_{free} [a, h]	0.274 (0.431)	0.328 (0.623)
RMSD 결합 길이 (Å)	0.007	0.002
RMSD 결합각 (º)	0.92	0.49
평균 B 인자 (Å^2)		
단백질	22.7	123.3
용매	34.4	
라마찬드란 플롯 [i]		
선호 (%)	97.5	93.4
이상치 (%)	0.0	0.0
모든 원자 충돌 점수	2.3	7.1
PDB ID	8DY3	8DY4

* Staraniso(예를 들어, staraniso.globalphasing.org 참조)에 의해 보고된 분해능 한계는 a*, b* 및 c*에서 1.70, 1.70, 1.51 Å 이다. 타원체 완전성은 각각, 94.2%(68.8%)이다.

[1774]

(계속)

데이터 수집	CATscFv_LH/IL-17 (scFv-Cat2200a)	CATspFv_LH/IL-17 (mscw374)
X 선 발생원	APS 17-ID	APS 17 ID
파장 (Å)	1.000	1.000
공간군	$P2_1$	$C222_1$
단위 셀 축 (Å),	51.93, 62.05, 111.71	82.43, 226.38, 75.35
각도 (º)	90, 99.69, 90	90, 90, 90
분해능 (Å) [a]	43.70-2.68 (2.74-2.68)	45.26-2.20 (2.28-2.20)
측정 반사 수	59,277 (4,148)	179,538 (18,221)
고유 반사 수 [a]	18,382 (1,214)	36,090 (3,572)
<I/σ>	11.7 (2.2)	7.2 (0.9)
완전성 (%) [a]	92.3 (91.6)	99.5 (99.7)
중복성 [a]	3.2 (3.4)	5.0 (5.1)
R_{sym} [a, c]	0.080 (0.669)	0.134 (1.148)
R_{pim} [a, d]	0.044 (0.358)	0.058 (0.494)
$CC_{1/2}$ [a, e]	1.00 (0.91)	1.00 (0.72)
ASU 당 분자 수 [f]	1	1
구조 정밀화		
분해능 (Å)	43.69-2.68 (2.85-2.68)	45.25-2.20 (2.26-2.20)
정밀화에서의 반사 수	18,344 (3,002)	36,069 (2,599)
원자수	4,933	5,326
용매 원자 수	61	295
R_{cryst} [a, g]	0.222 (0.311)	0.188 (0.260)
R_{free} [a, h]	0.266 (0.395)	0.234 (0.301)
RMSD 결합 길이 (Å)	0.002	0.007
RMSD 결합각 (º)	0.51	0.90
평균 B 인자 (Å^2)		
단백질	48.8	43.5
용매	45.3	43.6
라마찬드란 플롯 [i]		
선호 (%)	96.6	94.7
이상치 (%)	0.0	0.2
모든 원자 충돌 점수	6.1	3.6
PDB ID	8DY1	8DY5

[a] 괄호는 외부 쉘 통계를 나타낸다.
[b] 이방성 서버(services.mbi.ucla.edu/anisoscale)를 기반으로 한 분해능은 a*, b* 및 c* 방향에 대해 각각 3.05, 3.1 및 4.0 Å 이다. 여기서 회절 데이터 통계는 이 웹 서버에서 이방성 데이터 처리 후의 값을 나타내었다.
[c] $R_{sym} = \Sigma_{hkl}\Sigma_i |I_{hkl,i} - \langle I_{hkl}\rangle| / \Sigma_{hkl}\Sigma_{ihkl,i}$ 및 [d] $R_{pim} = \Sigma_{hkl}[1/(N\text{-}1)]^{1/2}\Sigma_i |I_{hkl,i} - \langle I_{hkl}\rangle| / \Sigma_{hkl}\Sigma_{ihkl,i}$, 여기서 $I_{hkl,i}$ 는 반사 h, k, l 의 i 번째 측정값의 스케일링된 강도이고, $\langle I_{hkl}\rangle$은 해당 반사의 평균 강도이며, N 은 중복성이다.
[e] $CC_{1/2}$ = 2 개의 무작위 절반 데이터 세트 간의 피어슨 상관 계수.
[f] 분자수는 비대칭 유닛(ASU)당 scFv/spFv 분자 또는 scFv/spFv/항원 복합체의 수를 나타낸다.
[g] $R_{cryst} = \Sigma_{hkl} |F_o - F_c| / \Sigma_{hkl} |F_o|$, 여기서 F_o 및 F_c 는 각각, 관측 및 계산된 구조 인자이다.
[h] R_{free} 는 R_{cryst} 와 같이 계산되었지만, 정밀화 전 또는 최대 2000 회의 반사 전에 데이터의 5%를 제외하였다.
[i] 라마찬드란 플롯 및 모든 원자 충돌 점수는 MolProbity(Zhang and Snyder J Biol Chem 264, 18472-18479 (1989))로 계산되었다.

[1775]

[1776] **6.3.1.10 다이설파이드 매핑 분석: 샘플 준비, 기기 파라미터 및 데이터 분석**

[1777] 이중특이성 분자의 비환원성 분해는 재조합 LysC(rLysC)와 PROALANASE(Promega, Cat. #VA2161)의 효소 조합을 사용하여 수행되었다. 사용된 분해 프로토콜은 비환원성 다이설파이드 매핑 프로토콜을 위한 Promega ACCUMAP 저 pH 단백질 분해 프로토콜의 수정된 버전이었다. 이중특이성 항체(40 µg)를 8M 구아니딘 HCl을 사용하여 변성시키고, 37℃에서 30분간 0.2 M N-에틸말레이미드(NEM, Promega, Cat#VB102A)를 사용하여 알킬화하여, 40 µg의 변성 및 알킬화 단백질을 rLysC와 직접 혼합하였다. 변성 및 알킬화 항체(43 µl)를 25 µL의 rLysC(Promega 저 pH 저항성 rLysC, Promega, Cat. # V167A)와 혼합하고, 37℃에서 1시간 동안 배양하였다. 샘플을 인서트가 있는 Thermo Scientific 일회용 RED 플레이트를 사용하여 0.1% TFA(aq)(pH 1.8)에서 탈염시켰다. 샘플을 샘플 홀딩 웰(약 67 µL)에 옮기고, 투석액 웰에 0.1% TFA 325 µL를 첨가하여, 투석 플레이트를 37℃에서 40분간 진탕기에 두었다. 이 단계를 3회 수행하고, 샘플을 동일한 농도(약 40 µg)로 회수하였다. ProAlanase 분해를 위해, 효소를 1:40(w/w)의 효소 대 단백질 비율로 첨가하여, 분해물을 37℃에서 하룻밤 동안 배양하였다. 샘플의 pH를 고 pH [44, 45]에서의 단백질 분해에 의해 유도된 잠재적인 다이설파이드 스크램블링을 최소화하기 위해 분해 전반에 걸쳐 약 2로 유지하였다.

[1778] LC/MS 펩티드 매핑 데이터를 ORBITRAP Eclipse 질량분석기에 연결된 ThermoFisher Scientific(미국 캘리포니아주 산호세 소재) VANQUISH Dual UHPLC에서 획득하였다. 사용된 HPLC 컬럼은 60℃의 온도에서 가열된 Waters Acquity Premier CSH C18 2.1 × 150 mm이었다. 2-효소(two-enzyme) 분해로부터의 펩티드(샘플의 약 15 µg)를 0.4 ml/min의 유량으로 120분 구배로 분리하였다. LC 구배는 114분 내에 2% B(0.1% 포름산/아세토니트릴)에

서 42% B의 초기 설정으로 구성되었다. ORBITRAP Eclipse 기기는 Ion Max NG H-ESI 소스를 사용하여 ESI 포지티브 모드에서 작동되었다. 소스 설정은 스프레이 전압 3500V, 쉬스 가스(arb 단위) 35, 보조 가스(arb 단위) 7, 스윕 가스(arb 단위) 1이었다. 이온 전달 튜브 온도와 기화기 온도는 275℃이었다. 기기를 DDA(Data Dependent Acquisition) 모드에서 작동시켰다. MS1 파라미터는 120,000의 오비트랩(orbitrap) 분해능, 30%의 RF 렌즈를 사용한 350 내지 2000m/z의 스캔 범위이었다. 의존성 스캔 1은 ddMS2 OT HCD(고에너지 C-트랩 해리)이었으며, 격리 창 1.6 m/z, 충돌 에너지 29%로 고정, 오비트랩 감지, 분해능은 15,000, 최대 주입 시간은 50 msec이었다. 의존성 스캔 2는 ddMS2 OT ETD(전자 전달 해리)이었으며, 격리 창 1.6 m/z, ETD 반응 시간 110 ms, ETD 시약 타겟 2.0e5, 최대 ETD 시약 주입 시간은 200 ms이었다. DDMS2 검출은 분해능 15,000 및 최대 주입 시간 50 msec의 오비트랩으로 설정되었다.

[1779] 다이설파이드 매핑 실험의 LC-MS/MS 파일을 Byonic(Protein Metrics, San Carlos, CA) 소프트웨어의 다이설파이드 워크플로우를 사용하여 분석하였다. 각 사슬의 서열 및 예상되는 다이설파이드 결합을 수동으로 입력하였다. 라이신, 아르기닌, 알라닌, 프롤린, 세린 및 글리신을 포함한 LysC 및 ProAlanase의 절단 부위를 고려하여 3가지 오류절단이 있는 반특이적(semi-specific) 검색을 사용하였다. 기기 파라미터의 경우, 전구체 질량 허용 오차로 5 ppm, 단편 질량 허용오차로 20 ppm을 사용하였으며, 단편화 유형에는 Thermo 스캔 헤더가 사용되었다. 메티오닌 및 트립토판에 대한 산화, 아스파라긴 탈아미드화, NEM을 사용한 유리 시스테인 캡핑 또는 시스테이닐화(cysteinylation)와 같은 변형을 희귀한 1 미세 대조군으로 사용하였다. N 말단 글루타민의 피로글루타메이트에 대한 글루타민을 일반적인 1 미세 대조군으로 사용하였다. 글리칸 변형을 사용하지 않고, 최대 전구체 질량을 10 kDa로 설정하였다. 1%의 FDR(False discovery rate)을 사용하고, 데이터 검색에는 무거운 멀티코어 옵션을 사용하였다. 검색 파라미터는 예상되는 모든 다이설파이드를 식별하도록 최적화되었다. 적절하게 절단된 다이설파이드 연결 펩티드와 반특이적 절단된 버전은 LC/MS 총 이온 크로마토그램(TIC)에서 관찰된 여러 피크를 생성한다. 추출된 이온 크로마토그램(XIC)의 고강도 피크, 다이설파이드 복합체의 MS1 확인 및 MS2 서열 범위와 같은 다수의 기준을 사용하여 진양성(true positive)을 확인하였다.

[1780] **6.3.1.11 이중특이성 변이체의 시차주사 형광측정법(DSF)**

[1781] 2개의 항 BCMA Fab 아암과 결합된 Cris7b/CD3B219a99v scFv/spFv를 갖는 이중특이성 단백질의 구조적 안정성은 열 풀림 시에 트립토판의 고유 형광을 모니터링하여,고급 시차주사 형광측정법(nanoDSF) 기술을 사용하여 측정되었다. 풀림은 Prometheus NT.48 기기(NanoTemper Technologies GmbH)를 사용하여 20 내지 95℃에서 1℃/min의 가열 램프로, 384웰 샘플 플레이트(ThermoNunc, Cat# 264573)에서 각 샘플을 24웰 모세관(NanoTemper, Cat# PR-AC002)에 로딩하여 측정하였다. 각 샘플을 인산염 완충 식염수(PBS)에서 0.5 mg/ml로 중복하여 측정하였다. 330 및 350 nm에서의 각 샘플의 고유 형광을 사용하여 온도 램프(ramp) 동안 풀림을 모니터링하고 시간 경과에 따른 형광 강도의 변화로서 기록하였다. 데이터를 수집하고, PR.STABILITYANALYSIS v1.0.2 소프트웨어를 사용하여 처리된 프로젝트로 저장하였다. 처리된 데이터에는 통합된 열 용융 프로파일, 330 nm, 350 nm, 비율 330/350의 형광에 대한 1차 도함수 및 모든 샘플에 대한 광 산란 데이터가 포함되어 있다. 열 용융 중간점(Tm) 값과 응집 개시(Tagg)가 확인되고 보고되었다.

[1782] **6.3.1.12 Cris7 이중특이성 분자의 생물층 간섭계**

[1783] 재조합 CD3 항원(인간 CD3 엡실론 및 CD3 델타 헤테로이량체 단백질, Acro Biosystems) 및 재조합 BCMA 항원에 대한 Cris7b scFv 및 스테이플링된 spFv 이중특이성 분자의 결합은 OCTET HTX 기기(Sartorius, 이전에는 ForteBio)를 사용하여 생물층 간섭계(BLI)로 측정되었다. BCMA 결합을 평가하기 위해, 스트렙트아비딘(SA) 캡처 센서(Sartorius)에 비오틴화 BCMA 단백질을 PBS에서 약 1 nm 신호로 로딩하였다. 이중특이성 샘플을 2배 희석(100 nM 내지 1.5 nM)으로 100 nM에서 시작하여 7가지 항체 농도로 항원 코팅된 SA 센서에 로딩하고, 비특이적 상호작용을 방지하기 위해 0.05% tween-20을 포함한 1x DPBS로 희석하였다. 결합 및 해리 시간은 각각, 900초이었다. CD3 결합을 평가하기 위해, 항 인간 IgG Fc(AHC) 포획 바이오센서(Sartorius)에 PBS 중의 3 μg/mL 관심 이중특이성 샘플을 로딩하였다. 로딩 후에, 센서 팁을 차단을 위해 1x DPBS + 0.02% Tween 20 + 1 mg/mL 소 혈청 알부민(BSA)으로 세척하였다. 재조합 CD3 항원을 2배 희석(100 nM 내지 1.5 nM)으로 100 nM에서 시작하여 7가지 농도로 항체 코팅된 센서에 로딩하고, 비특이적 상호작용을 방지하기 위해 0.02% tween 20 및 1 mg/mL BSA를 포함한 1x DPBS로 희석하였다. 각각, 결합은 1800초 동안, 해리는 900초 동안 모니터링되었다. 모든 측정은 30℃에서 1,200 rpm으로 교반하면서 수행되었다. 완충 효과를 위해 센서그램을 참조한 다음에, ForteBio 데이터 분석 HT 소프트웨어(버전 12.0.1.55)를 사용하여 분석하였다. 동적 반응은 결합(Kon), 해리(Koff) 속도 상수 및 평형 해리 상수(KD)에 대한 값을 얻기 위해 1:1 피팅 모델 또는 2:1 이종 리간드 결합 모

델을 사용하여 기준선을 빼고 정렬하고 전체적으로 피팅하였다.

[1784] **6.3.1.13 이중특이성 분자의 ELISA**

[1785] 이중특이성 항체를 재조합 비오틴화 BCMA 또는 재조합 비오틴화 CD3 항원(인간 CD3 엡실론 및 CD3 델타 헤테로이량체 단백질, Acro Biosystems)에 대한 결합에 대해 분석하였다. ELISA를 표준 프로토콜에 따라 수행하고, 플레이트를 각 인큐베이션 단계 사이에 0.05% Tween 20을 함유한 TBS(TBS-T)로 3회 세척하였다. 96웰 MAXISORP 플레이트(Nunc)를 스트렙트아비딘 1 μg/mL로 코팅하고, 4℃에서 18시간 동안 1X dPBS에 희석하였다. 모든 플레이트를 실온에서 1시간 동안 20 nM의 관심 항원으로 코팅한 다음에, 실온에서 1시간 동안 PBS-T(0.05% tween 20을 함유하는 1x dPBS) 중의 3% BSA로 블로킹하였다. 블로킹 후에, 정제된 이중특이성 샘플을 PBS-T에서 실온에서 1시간 동안 연속 희석하여 플레이트를 배양한 후에, 염소 항 인간 IgG F(ab'2)2 HRP(Jackson ImmunoResearch)로 실온에서 1시간 동안 배양하였다. 세척 후에, BM 화학발광 ELISA 기질(POD)을 첨가하고(Millipore), 초고감도 일루미네선스를 사용하여 ENVISION 플레이트 리더(Perkin Elmer)에서 플레이트를 즉시 리딩하였다. 원시 데이터를 GRAPHPAD PRISM으로 엑스포트하여, 곡선을 생성하고, 비선형 회귀 곡선 피트로 분석하였다.

[1786] **6.3.1.14 고농도 및 열 스트레스 연구**

[1787] 농축능(Concentratability)도 연구를 30 kDa MWCO 멤브레인을 갖춘 Amicon Ultra 4 원심 여과 장치(Catalog# UFC803096. MilliporeSigma, 미국 매사추세츠주 버링턴 소재)를 사용하여 수행하였다. 먼저, 스핀 컬럼을 물로 채우고 4200 g로 6분간 회전시켜, 멤브레인을 평형화시켰다. TD01B46(2 mg/ml) 및 TD01B49 단백질(0.5 mg/ml)을 각각 사전 세척된 스핀 컬럼에 로딩하여, 15분 시간 간격으로 4200 g로 원심분리하였다. 각각의 15분간의 원심분리 단계의 종료 시에, 농축기를 원심분리기로부터 제거하고 잔류하는 샘플 부피의 시각적 추정값을 기록하였다. 순도 분석을 위해 SEC에 의한 프로파일링에 충분한 양의 농축된 샘플을 사용할 수 있을 때까지 농축 단계를 반복하였다. 원심분리 과정의 종료 시에, 농축된 샘플을 회수하고, 단백질 농도를 NANODROP ND1000(ThermoFisher Scientific, Waltham MA)을 사용하여 측정하였다. TD01B46(스테이플링됨) 및 TD01B49(스테이플링되지 않음) 이중특이성 단백질의 최종 농도는 각각, 68 mg/ml 및 54 mg/ml이었다. 농축된 샘플을 2개의 동일한 부분으로 나누어, 하나는 4℃로, 다른 하나는 40℃로 보관하였다. 배양된 샘플의 분취액을 서로 다른 시점(t0, t-1wk, t-2wk 및 t-6wk)에서 채취하여, SEC에 의한 순도 분석을 위해 1x dPBS로 1 mg/mL로 희석하였다. SEC의 경우, 20 μg의 1 mg/mL 샘플을 분석적 크기 배제 HPLC(TSKgel BioAssist G3SWxl, 7.8 mm ID × 30 cm H, 5 μm, TOSOH; 가드 컬럼: TSKGEL BIOASSIST SWxl 가드 컬럼, 6 mm ID × 4 cm H, 7 μm, TOSOH; Agilent HPLC system)에 로딩하여, 200 mM 인산나트륨(pH 6.8)을 러닝 완충액으로 사용하여 20분간 1 mL/min으로 UV 280 nm에서 샘플 분리를 위해 모니터링하였다.

[1788] **6.3.1.15 세포독성 분석**

[1789] T 세포 활성화 및 종양 세포의 사멸 가능성에 대한 BCMA 표적화 시험 분자의 효과를 측정하기 위해, INTELLICYT IQUE3 및 FORECYT 소프트웨어(Sartorius)를 이용하였다. H929-Fluc-GFP 세포는 2개의 인간 공여자 Pan T 세포(Hemacare)에 대한 표적 세포로서 작용하였다. 분석은 3:1의 T 세포 대 표적 세포비로 96웰 플레이트에 설정되었다. 시험 분자를 10 nM의 시작 농도로 첨가하고 완전 배지에 1:4로 연속 희석하였다. 모든 분자를 최소한 이중실험으로 시험하였다. 사멸 및 T 세포 활성화 상태의 검출을 72시간 후에 유세포 분석에 의해 평가하였다. H929에서 발현된 내인성 GFP를 사용하여, T 세포를 표적 세포로부터 분리하였다. 세포독성은 근적외선 Live/Dead 염색제(ThermoFisher)를 사용하여 측정하고, CD4 및 CD8 T 세포의 활성화는 항 인간 CD25-BV650(BD Biosciences), 항 인간 CD4-BV510(Biolegend) 및 항 인간 CD8-PE/Cy7(Biolegend)로 평가하였다. PRISM 소프트웨어(GRAPHPAD)를 사용하여, 세포독성 및 CD25 MFI 데이터를 엑스포트하고, 로그 변환하고, 4개의 파라미터를 로지스틱 피팅시켜 EC50 보고를 위한 회귀 곡선을 생성하였다.

[1790] **6.3.1.16 세포 결합**

[1791] 간략하게, H929 WT 및 KO 세포를 계수하고, CFSE(BD Pharmingen, cat# C34554) 및/또는 CELL TRACE 바이올렛 증식 염료(BD Pharmingen, cat# C34557) 및 근적외선 Live/Dead 염색제(Thermofisher, cat# L10119)로 염색하였다. 각 세포 집단을 FBS(Gibco, cat# 16000-036)로 켄칭하고, 인간 TRUSTAIN FcX 블로킹제(Biolegend, cat# 422301)로 Fc 블로킹한 다음에, 웰당 총 50K 세포가 포함된 96웰 플레이트에 함께 플레이팅하였다. 그 다음에, 세포를 37℃에서 1시간 동안 시험 분자의 연속 희석액(2 μM에서 시작하는 1/2 로그 연속 희석액)을 사용하여 배양하였다. 세포를 FACS 완충액(Becton Dickinson, cat# 554657)으로 2회 세척한 다음에, 4℃에서 30분간 1

μg/mL AF647 표지된 염소 항 인간 Fc(Jackson IR, cat# 109-606-098) 검출 시약을 사용하여 배양하였다. 세포를 다시 FACS 완충액으로 2회 세척한 후에, INTELLICYT IQUE 3 (Sartorius) 고처리량 유세포 분석기에서 분석하였다. 원시 데이터를 엑스포트하여, GRAPHPAD PRISM으로 분석하였다.

[1792] **6.3.2 결과**

[1793] **6.3.2.1 "스테이플링" scFv 개념 및 설계**

[1794] scFv 불안정성 및 "호흡"으로 인한 응집을 최소화하기 위한 scFv "스테이플링" 전략이 **도 13a**에 나타나 있다. 스테이플링 설계가 **도 13b**에 개략적으로 예시되어 있다. 본 전략에서는, 유연한 링커에 배치된 2개의 Cys 잔기와 VL 및 VH 도메인에 도입된 Cys 잔기(각각 하나씩) 사이에 다이설파이드 결합(SS)을 조작하려고 시도하였다. 링커-앵커 포인트 다이설파이드 결합의 계획은 스테이플의 효과를 모방하므로, "스테이플링"으로 명명하였다(**도 13a** 및 **도 13b**). 이론에 구속되는 것은 아니지만, 이러한 SS 결합은 일시적이고 가역적인 "호흡"과 분자간 교환을 제한하지만, 항원 결합에 중요할 수 있는 두 가변 도메인 사이의 작은 움직임에는 부정적인 영향을 미치지 않을 것이라고 가정하였다(문헌[Fransson *et al.* Journal of molecular biology 398, 214-231 (2010)]). 또한, 스테이플링은 스테이플링된 scFv(또는 spFv)의 전체 구조적 엔트로피와 유연한 링커의 것도 감소시킬 것이다. 이는 spFv 안정성의 개선으로 이어질 것이다.

[1795] 스테이플링이 정확하게 형성되기 위해서는, 여러 가지 구조적 조건이 충족되어야 한다: (1) 두 도메인 Cys 잔기(앵커 위치)는 그들 사이의 거리(d_{AP})가 좁은 분포를 갖지만 VL/VH 간 다이설파이드 결합을 직접 형성할 확률이 낮도록 선택되어야 함; (2) 두 링커 Cys 잔기($d_{스테이플}$) 사이의 거리는 (d_{AP})와 호환되고, 이들 Cys 잔기는 다이설파이드 루프를 형성할 확률이 낮아야 함; 및 (3) 링커 Cys 잔기는 각각의 앵커 Cys에 동시에 가깝게 위치해야 하며, 이는 링커 세그먼트 **L1**(선행 도메인의 C 말단에서 제1 링커 Cys까지) 및 **L2**(제2 링커 Cys에서 후행 도메인 N 말단까지)의 결과인 조건임.

[1796] 스테이플링 방식이 광범위하게 적용가능하기 위해서는, 앵커 포인트가 구조적으로 보존되고, VL 및 VH 둘 다의 표면에 노출되고, Cys 잔기로의 그의 돌연변이가 VL 및 VH의 접힘 또는 항원에 대한 결합에 영향을 미치지 않도록 선택되었다. **도 19a**는 spFv의 2개의 상이한 배향에 대한 위치 중 하나의 선택을 예시하였다. LH 배향에서, 선택된 앵거 포인트는 서열이 초티아 체계(Chothia and Lesk, Journal of molecular biology 196, 901-917 (1987))에 따라 넘버링되었을 때 VL의 경우 위치 42이고 VH의 경우 위치 105이며(**도 19a**); HL 배향에서, 선택된 앵커 포인트는 VH의 경우 초티아 위치 43이고, VL의 경우 위치 100이었다(**도 19a**). 앵커 위치는 또한 여러 항체 서열에서 예시되었다(**도 19b**). 앵커 위치와 도메인 말단의 거리와 기하학적 구조가 **도 13c**에 예시되었다. 이들 위치의 Cα ($d_{AP,Cα}$) 및 Cβ ($d_{AP,Cβ}$) 원자 사이의 거리는 현재 PDB에 있는 2501 Fv의 조사로부터 결정되었다(데이터는 **도 20b** 내지 **도 20e**에 나타냄). 두 거리 모두 항체 구조에서 다소 좁고 비슷한 분포를 보였다. LH 및 HL Cα 거리는 각각, 평균 8.2 Å (7 내지 9 Å 범위) 및 6.9 Å (6 내지 8 Å 범위)를 가졌다(**도 20b**, 주황색 및 녹색 곡선). 대응 Cβ 거리는 각각 8.2 Å (7 내지 10.0 Å의 범위) 및 8.7 Å (7 내지 10.0 Å의 범위)이었다(**도 20c**, 주황색 및 녹색 곡선). 이러한 거리는 직접 다이설파이드 결합을 형성하는 두 위치의 전형적인 Cα 및 Cβ 거리(각각, 흑색 곡선으로 나타낸 바와 같이, **도 20b**에서 4 내지 6.8 Å 및 **도 20c에서** 3.5 내지 4.8 Å)보다 훨씬 더 넓었다. 이러한 거리는 평균적으로 거리가 서로 너무 멀기 때문에 두 앵커 위치가 서로 다이설파이드 결합을 효과적으로 형성할 가능성이 낮다는 것을 나타내었다. 따라서, 이들 두 앵커 잔기는 스테이플링에 사용가능했을 가능성이 높았다. d_{AP} 거리는 범위가 좁고 구조적 보존으로 인해 카파 또는 람다 경쇄를 포함하는 항체에서 유사했기 때문에, 이러한 앵커 포인트 세트는 대부분의 Fv 분자에 대해 호환될 가능성이 높을 것이다.

[1797] 링커의 경우 "CPPC"(Cys-Pro-Pro-Cys)의 짧은 서열이 하나의 가능한 스테이플링 모티프로 선택되었는데, 이 서열은 인간 IgG1 힌지뿐만 아니라 일부 설치류 IgG에서도 자연적으로 발생하기 때문이다. 인간(문헌[Scapin *et al.* Nat Struct Mol Biol 22, 953-958 (2015)]) 및 마우스 IgG(문헌[Harris *et al.* Biochemistry 36, 1581-1597 (1997)]) mAb분자의 구조는 인간 및 마우스 IgG 힌지의 Cβ(Cys1)-Cβ(Cys2) 거리가 7 내지 9Å 범위임을 보여주었다(**도 13d** 및 **도 13e**). 이러한 범위는 LH 및 HL 배향 모두에서 2개의 앵커 포인트 사이의 거리와 유사하였다(**도 13c** 및 **도 20c**). 또한, CPPC 모티프는 Pro-Pro 잔기의 상대적 구조적 강성으로 인해, SS 루프 폐쇄 속도가 가장 느린 것으로 밝혀졌다(문헌[Zhang and Snyder, J Biol Chem 264, 18472-18479 (1989)]). 따라서, CPPC 스테이플은 스테이플링에 적합한 기하학적 구조, 즉, 앵커 포인트 Cys 잔기에 적절한 다이설파이드 결합을 정확하게 형성할 가능성이 높을 것이다.

[1798] 링커 내에 스테이플링 모티프(CPPC)를 배치하는 것은 설계된 대로 적절한 스테이플링 다이설파이드 형성을 가능하게 할 뿐만 아니라, 스크램블링, 즉 의도하지 않은 Cys 잔기 사이에 SS가 형성되는 것을 방지하는 데 중요하였다. 적절한 스테이플링을 위해서는, 첫 번째 Cys 잔기는 선행 도메인(LH의 VL 도메인 또는 HL의 VH 도메인)의 앵커 포인트에 다이설파이드 결합을 하고, 두 번째 Cys 잔기는 후행 도메인(LH의 VH 도메인 또는 HL의 VL 도메인)의 앵커 포인트에 다이설파이드 결합해야 한다. 앵커 위치에 대한 CPPC Cys 잔기의 적절한 병치는 각각, 스테이플링 모티프의 앞뒤에 있는 링커 세그먼트(**L1** 및 **L2**)의 잔기의 길이 또는 수뿐만 아니라, VL 및 VH 도메인의 앵커 포인트와 말단 사이의 기하학적 구조 및 거리(d_{AP} 및 **d1-d4**)에 의해 결정되었다(**도 13c** 및 **도 21a**). PDB에서 동일한 Fv 세트에 대한 이들 위치 사이의 거리 분포가 **도 21b**(Cα-Cα) 및 S3C(Cβ-Cβ)에 나타나 있다. 최적의 L1 및 L2 길이는 링커 Cys와 반대측 앵커 Cys 잔기 사이의 거리를 가능한 한 멀리 유지하면서, 링커 Cys를 의도한 앵커 Cys의 짧은 거리(약 5 내지 6 Å의 Cα 원자간 거리) 내에 가져올 것이다. 제1 스테이플링 다이설파이드 쌍의 경우, 이들 두 거리는 **L1**, d_{AP}, **d1** 및 **d2**, 선행 도메인의 C 말단과 2개의 앵커 Cys 위치 사이의 거리에 의해 결정되었다(**도 13c** 및 **도 21a**). **d1**과 **d2** 거리 사이에 분명한 차이가 있었기 때문에, 링커 세그먼트 **L1** 길이가 최적이면, 제1 링커 Cys와 제2 도메인 상의 후행 앵커 위치 Cys는 원치않는 SS 결합을 형성하기에는 너무 멀리 떨어져 있을 것이다(**도 21a**). 링커 세그먼트 **L2**, d_{AP} 및 거리 **d3** 및 **d4**가 결정 인자이라는 점을 제외하고는, 두 번째 스테이플링 SS 결합에 대해서도 마찬가지이었다. 분자 모델링에 따르면, 이러한 거리는 스테이플링 모티프 이전의 **L1**에 대해 7 내지 9개의 잔기 길이와 **L2** 이후에 대해 4 내지 5개의 잔기 길이의 유연한 서열에 의해 확장될 수 있음을 시사한다. 이러한 링커 길이는 n+4+m으로 표시되었으며, 여기서 n=7 내지 9 및 m=4 내지 5이다(**도 19a**). 이러한 길이는 "스테이플링"을 허용할 수 있을 만큼 충분히 길지만, 상기 거리 고려 사항에 따라 SS 스크램블링을 허용하기에는 너무 짧을 것으로 예측되었다. 그러나, 정확한 **L1** 및 **L2** 길이는 Fv 구조적 변동성으로 인해 정확하게 예측하기 어려웠으며, 최적의 길이를 정의하기 위해 범위를 실험적으로 샘플링하였다(하기 참조). 반면에, LH 및 HL 배향 모두에 대해 선택된 앵커 위치 세트에 대한 거리 및 기하학적 구조는 매우 유사했기 때문에(**도 21b** 및 **도 21C**), 모델링에 기초하여 선택되고 추가로 실험적으로 확인된 동일한 구성의 링커는 LH 및 HL 작제물 모두에 대해 작동할 가능성이 높았다. **도 19b**는 CPPC 스테이플을 갖는 제안된 첫 번째 링커 설계 세트를 보여준다.

[1799] **6.3.2.2 모델 및 치료용 spFv 분자는 훨씬 더 안정적이었다**

[1800] "스테이플링" 설계를 평가하기 위해, 여러 항체를 선택하여, scFv 및 대응 spFv를 생성하였다: 합성 파지 항체 라이브러리(문헌[Shi *et al.* Journal of molecular biology 397, 385-396 (2010)])의 카파 경쇄(GLk1 및 GLk2)가 있는 2개의 항체 및 간행물(문헌[Gerhardt *et al.* Journal of molecular biology 394, 905-921 (2009)])에서 얻은 람다 함유 항체(CAT2200), 및 항 CD3 mAb Cris7(문헌[Alberola-Ila *et al.* J Immunol 146, 1085-1092 (1991)])로부터 유래된 2개의 scFv 변이체, Cris7a 및 Cris7b - CD3 기반 T 세포 방향 전환에 사용할 가능성이 있음 -. 이들 항체 중 몇몇의 VH 및 VL 도메인의 앵커 포인트 및 아미노산 서열은 **도 19b**에 나타내었다. LH 및 HL 배향 모두에서 scFv 및 spFv 분자를 구성하고 발현시켰다. scFv 작제물의 경우, 표준 $(G_4S)_4$ 링커를 사용하였다. spFv의 경우, 상기 **n** 및 **m** 범위 내의 상이한 링커 길이를 드물게 샘플링하였다. 이들 scFv 및 spFv 단백질은 방법에 기재된 바와 같이 Expi293 세포로부터 발현되고 정제되었다. SDS-PAGE는 환원성 scFv 및 spFv가 동일하게 이동하는 것을 나타내지만, 비환원성 SDS-PAGE는 spFv 분자가 대응 scFv보다 더 빠르게 이동하는 것으로 나타났는데(**도 2b**에 나타낸 Cris7a/b scFv/spFv의 결과), 이는 spFv의 추가의 다이설파이드 결합이 예상대로 형성되었음을 나타낸다.

[1801] scFv 및 spFv 분자의 열 안정성은 시차 열량계(DSC)에 의해 조사되었다. 데이터는 **도 2a**에 도시된 Cris7a/b에 대한 선택된 DSC 프로파일과 함께 **표 12** 및 **표 14**에 제시되어 있다. 대응 scFv 및 spFv 단백질의 비교는 시작 scFv의 Tm에 관계없이 스테이플링 시에 Tm이 대략 10℃ 증가함을 나타내었다(**표 12** 및 **표 14**). 예를 들어, Cris7a/b LH scFv의 Tm은 각각, 59.7℃ 및 57.1℃이었다(**도 2a**). 대응 spFv 단백질은 Tm이 각각, 71.6℃ 및 68.6℃이었다. 이는 11℃ 이상의 안정화(ΔTm)를 나타내었다(**도 2a**, **표 12** 및 **표 14**). Glk1 spFv는 Tm이 약 80℃로, 이의 scFv보다 9℃ 증가하였다(**표 12** 및 **표 14**). 이는 Fab 대응물의 Tm과 유사하였다(문헌[Teplyakov *et al.* mAbs 8, 1045-1063 (2016)]). 이러한 scFv의 경우, 스테이플링이 CH1/CL 도메인의 손실로 인해 열 안정성을 거의 회복한 것으로 보인다. GLk2 scFv 및 HL spFv의 경우에, 열 안정성의 증가가 약 7℃에 불과한 단 하나의 예외가 있었다. 이는 6+4+6 링커의 선행 세그먼트가 짧아서 스테이플링 기하학적 구조에 약간의 변형이 발생했기 때문일 가능성이 높았다. Tm 변화 외에도, spFv 단백질의 열 용융은 20% 이상의 엔탈피 변화(ΔH)를 수반하였다(**표 12** 및 **표 14**). 반면에, 동일한 VL/VH 쌍의 LH 및 HL 구성의 Tm 및 ΔH 값은 매우 유사하였으며

(**표 12** 및 **표 14**), 이는 scFv 구성이 열 안정성에 큰 영향을 미치지 않았음을 나타낸다. 큰 양의 ΔTm 및 ΔH는 도메인 안정성에 영향을 미치지 않을 것으로 예상되는 앵커링 위치를 제외하고는, VH 또는 VL에 돌연변이가 없더라도 VL 및 VH 도메인이 명백하게 안정화되었음을 나타내었다. 그 결과는 또한 선행 및 후행 링커 세그먼트의 길이가 열 안정성 향상에 영향을 미치지 않음을 보여주었다(9+4+4를 가진 CAT2200의 경우 약11℃, 8+4+4를 갖는 Cris7의 경우 약 11℃, 9+4+5를 갖는 Glk2 HL spFv의 경우 약 11℃, 9+4+5를 갖는 Glk1 HL 및 LH spFv의 경우 9℃). 전반적으로, 이러한 결과는 각각, 8-9 및 4-5 잔기의 선행 링커 및 후행 링커 세그먼트 길이가 이의 scFv 대응물과 비교하여, 스테이플링된 scFv의 상당한 안정화에 적합하다는 것을 나타내었다.

[1802] 가장 널리 적용할 수 있는 스테이플링 링커를 선택하기 위해, 링커 세그먼트 길이가 spFv 작제물의 열 안정성에 미치는 영향을 추가로 조사하였다. 2개의 VH/VL 쌍을 사용하여, **L1**(7, 8 및 9개의 잔기) 및 **L2**(4, 5개의 잔기) 세그먼트 길이를 LH에서만 모든 조합으로 변경시켰다. 이러한 scFv/spFv 분자의 열 안정성은 UNCLE(Unchain Labs, CA)를 사용하여 형광으로 평가하였다. Tm 데이터는 **표 14**에 나타나 있다. 결과는 Tm과 ΔTm이 8 및 9 잔기 **L1**을 갖는 작제물에 대해 본질적으로 동일하다는 것을 나타낸다. 7 잔기 **L1**을 갖는 여러 spFv 단백질의 경우, Tm은 약간 더 낮은 것으로 나타났으며, 이는 L1이 짧을수록 열 안정화에 덜 유리할 수도 있음을 시사한다. 잔기 4 및 5의 후행 세그먼트 **L2** 길이는 Tm에서 유의한 차이를 일으키지 않았다. 따라서, 보다 긴 버전 9+4+5가 광범위한 scFv 분자와의 더 나은 호환성을 위해 선택되었다.

[1803] [표 14]

2 개의 VH/VL 쌍에 대해 서로 다른 링커를 사용한 scFv/spFv 의 열 안정성

분자명	배향	링커	Tm	ΔTm
MSCW250	LH	4x G4S	**55.0**	
MSCW258	LH	9+4+5	**66.4**	11.4
MSCW259	LH	8+4+5	**66.8**	11.8
MSCW260	LH	7+4+5	**66.1**	11.1
MSCW261	LH	9+4+4	**66.8**	11.8
MSCW262	LH	8+4+4	**66.2**	11.2
MSCW263	LH	7+4+4	**64.8**	9.8
CE158A	LH	4x G4S	**55.3**	
MSCW270	LH	9+4+5	**66.6**	11.3
MSCW271	LH	8+4+5	**66.6**	11.3
MSCW272	LH	7+4+5	**65.7**	10.3
MSCW273	LH	9+4+4	**67.1**	11.7
MSCW274	LH	8+4+4	**67.2**	11.8
MSCW275	LH	7+4+4	**65.1**	9.8

[1804]

[1805] **6.3.2.3 spFv의 구조는 적절한 "스테이플링" 및 VL/VH 페어링을 나타냄**

[1806] "스테이플링 다이설파이드 결합"의 적절한 형성을 확인하고 구조적 영향을 밝히기 위해, 여러 scFv 및 spFv 분자를 결정화하여 구조를 결정하려고 시도했으며, 일부는 표적 단백질과 복합체를 이루고 있었다(**표 13**). 흥미롭게도, scFv 단백질 단독으로는 어떤 결정도 생성하지 않았다. 비결합 spFv 및 일부 scFv/spFv:항원 복합체의 전체 구조가 **도 14**에 도시되어 있다. 구조는 VL 도메인 및 VH 도메인 둘 모두가 서로 패킹된 전형적인 Fv 구조와 일치하였다. 모든 spFv 구조에서, 링커의 일부 잔기는 전자 밀도 맵에서 정렬되고, 분해되었다. "스테이플"과 앵커 포인트 사이의 다이설파이드 결합은 일반적으로 LH 및 HL 배향 모두에서 잘 정렬되었다(**도 14a** 내지 **도 14e**). Glk2에 대한 스테이플링 링커 영역의 대표적인 전자 밀도 맵이 **도 14d**에 도시되어 있다. 2개의 스테이플링 SS 결합과 링커 CPPC 모티프는 잘 정렬되어 있는데, 이는 스테이플링이 실제로 설계된 대로 발생했음을 나타낸다. 대조적으로, scFv 함유 CAT2200/IL-17 복합체에서만 링커 잔기가 정렬되지 않았다(**도 14f**).

[1807] Glk1의 경우, LH 및 HL spFv의 구조(**도 14a** 및 **도 14b**)를 얻었다. LH 결정에는 4개의 독립적인 spFv 카피가 있으며, HL 결정에는 2개의 독립적인 카피가 있었다. LH 내에서, spFv 카피 사이의 스테이플링 링커를 포함하는 쌍별 Cα rmsd는 0.22 Å 내지 0.40 Å 범위이었다. 두 HL spFv 분자 사이의 쌍별 Cα rmsd는 0.20 Å이었다. LH 및 HL spFv 구조를 비교했을 때, 195 내지 219개의 Cα 원자(평균 213)에 대한 링커를 제외하고는, 쌍별 Cα rmsd는 약간 더 높았다(0.53 내지 0.77 Å, 평균 0.61 Å). LH 및 HL spFv를 대응 Fab(PDB ID 5I19)의 Fv 단편과도 비교하였다(문헌[Teplyakov et al. mAbs 8, 1045-1063(2016)]). LH spFv와 Fab Fv 사이의 rmsd는 203 내지 215개의 Cα 원자에 대해 0.41 내지 0.64 Å(평균 0.57 Å)이었다. HL spFv와 Fab Fv 사이의 rmsd는 약 210개의 Cα 원자에 대해 0.56 내지 0.71 Å(평균 0.64 Å)이었다. 이들 값은 LH, HL spFv 및 Fab Fv의 구

조가 매우 유사하다는 것을 나타내었다. 작은 차이는 결정 패킹의 결과일 가능성이 높았다.

[1808] 비결합 spFv 구조 이외에도, 항원 결합에 대한 구조적 영향을 확인하려고 시도하였다. CAT2200 scFv 및 spFv 분자는 그의 동종 표적인 IL-17과의 복합체로 결정화되었다. 결정화된 CAT2200 변이체의 scFv 및 spFv의 경우, 구조는 결합된 표적이 있든 없든 거의 동일하였다(**도 14e** 내지 **도 14g**). 이들은 또한 스테이플의 배향 또는 존재 또는 부재에 관계없이 동일하였다. 구조 쌍들 사이의 모든 매칭 Cα 원자에 대한 rmsd는 매우 작았다: 비결합 spFv-VH-VL과 항원 결합된 scFv-VL-VH 사이 0.41 Å(**도 14f**), 비결합 spFv-VH-VL과 결합된 spFv-VL-VH 사이 0.46 Å(**도 14g**) 및 결합된 scFv와 결합된 spFv LH/HL 사이 0.37 Å. 이러한 구조 데이터는 스테이플링이 VL 및 VH의 도메인 구조 또는 상대적 VL/VH 패킹에 영향을 미치지 않음을 보여주었다.

[1809] 상술한 바와 같이, CPPC 모티프, 및 스테이플과 앵커 포인트 사이의 다이설파이드는 일반적으로 구조에서 잘 정렬되었다. **도 15**는 CPPC 모티프 상에 중첩된 링커들의 질서 있는 구조를 나타낸다. CPPC 구조는 0.37 Å (범위 0.15 내지 0.5 Å)의 주쇄 원자 rmsd와 매우 유사하다는 것이 분명하였다. Cβ (Cys1)-Cβ (Cys2) 거리는 6 내지 9 Å 범위이고, Cα (Cys1)-Cα (Cys2) 거리는 약 6.5 Å 내지 9 Å이었다. 이들 거리는 IgG 힌지 구조의 거리와 비슷하였다. 구조에서 2개의 Pro 잔기는 트랜스 형태를 채택하고, 이러한 서로 다른 결정의 CPPC 모티프 구조 간에는 높은 수준의 유사성이 있었다. 이는 Pro-Pro 모티프가 비교적 단단하다는 개념과 일치하였다. 이러한 강성은 VL 및 VH 도메인 상호작용을 강화하는 힘을 가했을 가능성이 높다. 동시에, 관찰된 Cβ (Cys1)-Cβ(Cys2) 거리 범위도 적절한 VL/VH 배향에 대해 약간의 유연성이 여전히 허용됨을 나타내었다. CPPC 모티프 너머의 링커 잔기는 일반적으로 무질서하거나 다른 형태를 갖고 있었다(**도 15**). 선행 및 후행 링커 세그먼트는 전형적으로 주쇄 간의 간헐적인 H 결합을 제외하고는, 주요 VL 및 VH 도메인과 특이적 상호작용을 나타내지 않았다. 예를 들어, GLK2 spFv 구조에서, 후행 VL 도메인의 E1 잔기는 후행 링커 세그먼트와 측쇄 H 결합 상호작용을 형성하였다(GLK2 HL spFv, **도 22**). 그러나, 링커 영역과 VL/VH 도메인 사이의 이러한 측쇄 상호작용은 Fv 도메인에 특이적일 가능성이 높으며, Fv 구조에 거의 영향을 미치지 않는 것으로 나타났다.

[1810] **6.3.2.4 spFv 이중특이체(BCMA Fab x CD3 scFv/spFv)는 향상된 단백질 품질을 나타냄**

[1811] 보다 관련성이 높은 치료용 분자 배경에서 스테이플링된 scFv 분자의 활성, 생물물리학적 특성 및 번역가능성을 추가로 연구하기 위해 여러 sc/spFv x Fab 이중특이성 작제물(**도 16a**에 예시됨)을 생성하였다. Cris7 도메인을 사용한 이전 연구로부터 확장하여, 2개의 고유한 항 CD3 scFv/spFv 결합 아암, 즉, 상술한 Cris7b와 SP34로부터 유래된 CD3B219는 쌍을 이루고(문헌[Pessano *et al.* EMBO J 4, 337-344 (1985)]), 노브-인-홀 헤테로이량체화 플랫폼을 사용하여 2개의 관련된 항 BCMA Fab 부분과 결합하였다(문헌[Ridgway *et al.* Protein Eng 9, 617-621 (1996)]). scFv 작제물의 경우, 링커 조성물의 영향을 평가하기 위해 Bird 링커(문헌[Bird et al. Science 242, 423-426 (1988)])도 포함하였다. 하나의 항 BCMA 아암인 BCMB749는 마우스 단일 클론 항체로부터 유래되었다. 제2 항 BCMA 아암인 BCMB749h는 BCMB749의 상보적 결정 영역(CDR)이 마우스 모 서열에 대한 소수의 복귀 돌연변이와 함께, 인간 VL 및 VH 수용체 생식세포계열에 이식된 인간화 변이체이었다(자세한 내용은 **도 23**). 2개의 BCMA Fab 아암을 각각 3가지 포맷(Bird 링커가 있는 scFv, $(G_4S)_4$ 링커가 있는 scFv 및 spFv)의 2개의 서로 다른 항 CD3과 쌍을 이루어, 12개의 별개의 BCMA 표적 이중특이성 분자를 생성하였다(**도 24**). 작제물은 **표 15**에 기재되어 있다.

[1812] [표 15]

이중특이성 개념 증명의 항 BCMA 표적 항체용 작제물 설계

명칭	분자 설명	항 CD3 scFv/spFv 아암	BCMA 아암 HC	BCMA 아암 LC
TD01B49	BCMB749 × Cris7b scFv Bird	Cris7b scFv Bird	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B48	BCMB749 x Cris7b scFv G4S	Cris7b scFv G4S	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B46	BCMB749 x Cris7b spFv	Cris7b spFv	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B43	BCMB749 x CD3B219a99v scFv Bird	CD3B219a99v scFv Bird	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B42	BCMB749 x CD3B219a99v scFv G4S	CD3B219a99v scFv G4S	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B47	BCMB749 x CD3B219a99v spFv	CD3B219a99v spFv	BCMB749 HC	BCMB749 LC
TD01B51	BCMB749h x Cris7b scFv Bird	Cris7b scFv Bird	BCMB749H HC	BCMB749H LC
TD01B50	BCMB749h x Cris7b scFv G4S	Cris7b scFv G4S	BCMB749H HC	BCMB749H LC
TD01B44	BCMB749h x Cris7b spFv	Cris7b spFv	BCMB749H HC	BCMB749H LC
TD01B41	BCMB749h x CD3B219a99v scFv Bird	CD3B219a99v scFv Bird	BCMB749H HC	BCMB749H LC
TD01B40	BCMB749h x CD3B219a99v scFv G4S	CD3B219a99v scFv G4S	BCMB749H HC	BCMB749H LC
TD01B45	BCMB749h x CD3B219a99v spFv	CD3B219a99v spFv	BCMB749H HC	BCMB749H LC

[1813]

[1814] 모든 이중특이성 샘플을 방법에 기재된 바와 같이, Expi-CHO 포유류 세포 배양물에서 발현시키고, 2단계 과정을 통해 정제하였다. 정제 후 샘플 순도를 평가하기 위해 분석적 크기 배제 크로마토그래피(aSEC)를 수행하여, scFv와 spFv 함유 이중특이성 분자 사이의 유의차를 밝혀내었다(**도 24**). scFv 함유 샘플에서, 원하는 모노머의 전체 수율이 더 낮았다. 또한, Cris7b scFv 아암을 함유하는 샘플에서는, 정제된 샘플에서 더 높은 분자량 종

이 현저하게 생성되었다(**도 24**, 상부 플롯). 대조적으로, spFv 함유 작제물은 통상 보다 높은 수율과 >98% 이중특이성 단량체를 갖는다(**도 24**). 이러한 결과는 CD3 scFv 아암 중 하나에서의 스테이플링이 이중특이성 제품 수율과 품질을 크게 향상시켰음을 보여준다. 유연한 링커인 $(G_4S)_4$ 또는 Bird의 정체는 뚜렷한 차이를 보이지 않았다.

[1815] 한 세트의 작제물을 선택하여, 보다 큰 규모의 발현 및 정제로 이동시키고, 분석 패널에 사용할 수 있는 고도로 정제된 재조합 항체의 대규모 배치를 생성하여, 스테이플링 기술을 추가로 테스트하였다. 상술한 데이터에 기초하여, TD01B46(BCMB749 x Cris7b spFv), TD01B48(BCMB749 x Cris7b scFv G4S) 및 TD01B49(BCMB749 x Cris7b scFv Bird)의 Cris7b 함유 분자를 선택하였다. Expi-CHO에서의 대규모 발현과 이러한 항체 샘플의 보다 철저한 정제는 소규모 정제된 샘플에서 볼 수 있듯이 제품 품질 및 수율에서 보다 뚜렷한 경향을 나타내었다(**도 16b**). scFv 함유 이중특이성 샘플(B48, B49)의 생산은 CH1 후 정제된 샘플을 지배하는 것으로 크고 더 높은 분자량의 올리고머 피크("O")를 나타내었으며, 이는 대응하는 소규모 발현보다 훨씬 더 두드러졌다(**도 24**). 이에 비해, spFv 함유 이중특이체(B46)는 원하는 단량체 피크에 대응하는 우세한 피크로 남아 있었다. 이러한 데이터는 스테이플링이 적용되었을 때 단백질 생산 및 품질이 개선되었음을 함께 강조하였다.

[1816] **6.3.2.5 질량분석계의 다이설파이드 매핑 데이터는 스테이플링된 scFv에서의 예상되는 다이설파이드를 확인함**

[1817] 다이설파이드 매핑 LC/MS 실험을 사용하여, 예상되는 다이설파이드 형성을 확인하고 스크램블링 및 유리 티올의 존재를 확인하였다. 스테이플링된 이중특이체(TD01B46)를 방법 섹션에 기재된 바와 같이 2-효소 조합으로 분해하고, 예상되는 다이설파이드 결합을 측정하였다. **도 16c**는 모든 예상되는 다이설파이드 결합을 나타낸다. 분해된 단백질의 총 이온 크로마토그램이 **도 16d**에 도시되어 있다. 다이설파이드에 의해 연결된 예상 펩티드에 해당하는 피크는 추출된 이온 크로마토그램(XIC)의 피크 강도, 다이설파이드 복합체의 질량(MS1) 및 펩티드 서열(MS2)을 기반으로 확인되었다. 여러 다이설파이드 펩티드 복합체에 대한 대표적인 XIC, MS1 및 MS2 데이터가 **도 25** 및 **도 26**에 나타나 있다. 모든 예상되는 다이설파이드의 완전한 적용 범위는 이러한 LC/MS/MS 접근법에 의해 확인되었으며, 예상되는 다이설파이드는 검출된 모든 시스테인 함유 펩티드의 > 99%를 나타내었다. 본 연구에서, SS 스크램블링도 <0.5%로 관찰되었으며, 이는 전형적인 mAb 수준보다 낮았다. 이러한 데이터는 **도 16c** 및 **도 16d**에서 스테이플링 SS 결합을 포함한 모든 예상되는 SS 결합이 정확하게 형성되었음을 확인시켜준다.

[1818] **6.3.2.6 스테이플링된 이중특이체는 향상된 열 안정성을 나타냄**

[1819] 다음으로, 이중특이성 작제물의 열 안정성에 대한 스테이플링의 영향을 NanoDSF 측정을 사용하여 평가하였다(**도 17a** 및 **표 16**).

[1820] [표 16]

스테이플링된 이중특이체의 열 안정성 및 콜로이드 안정성(LS: 대규모)

[1821]

명칭	설명	Tonset	σ, Tonset	Tm1	σ, Tm1	Tm2	σ, Tm2	Tagg	σ, Tagg
TD01B49	BCMB749 x Cris7b scFv Bird, LS Exp	51.95	0.18	58.6	0.02	68.66	0.03	70.32	0.04
TD01B48	BCMB749 x Cris7b scFv G4S	51.29	0.08	59.4	0.02	68.65	0.03	70.23	
TD01B46	BCMB749 x Cris7b spFv, LS Exp	61.04	0.22	68.28	0.03	-	-	70.51	0.18
TD01B51	BCMB749h x Cris7b scFv Bird	50.98	0.23	59.27	0.07	69.76	0.09	70.8	0.16
TD01B50	BCMB749h x Cris7b scFv G4S	50.42	0.39	59.17	0.03	69.73	0.07	70.68	0
TD01B44	BCMB749h x Cris7b spFv	58.38	0.08	68.54	0.04	-	-	72.33	0.55
TD01B40	BCMB749h x CD3B219a99v scFv G4S	56.19	0.2	60.55	0.04	70.83	0.05	70.39	0.23
TD01B45	BCMB749h x CD3B219a99v spFv	58.98	0.16	68.36	0.01	-	-	72.45	0.22

[1822] 고도로 정제된 Cris7b 샘플의 경우, scFv 함유 작제물은 약 59.0℃의 Tm(**도 17a**, **표 16**)에서 용융 전이를 나타내었으며, Tonset은 50 내지 56℃이었다. scFv Tm은 단순 scFv의 그것과 유사하였다(**표 12** 및 **표 14**). 대응하는 spFv 함유 이중특이체(**도 17a**, **표 16**)의 경우, 이러한 낮은 Tm 전이는 사라졌고, 이제 첫 번째 전이는 Tm이 약 68.3℃이며, 이는 이중특이체의 다른 도메인의 전이와 명백하게 뒤얽혀 있었다. 게다가, 이러한 spFv 이중특이성 단백질의 Tonset은 약 61℃로 증가하였다(**도 17a**, **표 16**). 이러한 결과를 종합하면, spFv 함유 부분에 대해 약 10℃ 이상의 안정성 개선을 나타내는 것으로 해석되었다. 유사한 안정성 개선은 CD3B219 spFv 작제물에 대해서도 마찬가지이었다(**표 16**). 이러한 데이터는 scFv/spFv 전용 작제물에서 볼 수 있는 열 안정화(**표 12** 및 **표 14**)가 치료용 작제물에 혼입되었을 때에도 마찬가지이었음을 나타낸다.

[1823] **6.3.2.7 스테이플링된 이중특이체는 열 스트레스로 인한 응집에 내성이 있었음**

[1824] 열 스트레스에 의해 유도된 응집에 대한 spFv의 영향은 널리 사용되는 분석법인, 4℃에서 단백질 보관 안정성의 예측 지표로서 추가로 평가되었다(문헌[Bailly *et al.* mAbs 12, 1743053 (2020)]). 고도로 정제된 Cris7b

scFv/spFv 이중특이체(각각, TD01B49 및 TD01B46)(순도 > 98.5%)를 DPBS에서 약 60 mg/ml로 농축시켰다. 그 다음에, 농축된 샘플을 4 및 40℃에서 인큐베이션하였다. 2주 간격으로, 각 샘플의 작은 분취량을 1 mg/ml로 희석한 다음에, aSEC에서 실행하였다. 결과를 **도 17b** 및 **도 17c**에 나타낸다. 4℃에서 6주간의 배양 기간에 걸쳐, spFv 이중특이성 TD01B46(**도 17b** 및 **도 17c**, 왼쪽 패널)은 단량체로 존재하는 반면에, 40℃에서는 6주에 약 5% 이량체 종으로 완만하게 증가한 것으로 나타났다. 대조적으로, 4℃ 또는 40℃에서 동일한 기간 동안, scFv 이중특이성 TD01B49(**도 17c**, 오른쪽 패널)은 각각, 약 18% 및 32% 응집체 종(이량체 및 고차 올리고머)으로 큰 증가를 나타내었다. 이러한 데이터는 spFv 함유 이중특이체가 높은 단백질 농도에서 열에 의한 응집에 훨씬 더 저항력이 있었음을 보여준다.

[1825] **6.3.2.8스테이플링된 이중특이체는 결합 친화도를 유지함**

[1826] 스테이플링이 scFv 또는 Fab 함유 아암에서 관심 표적 항원에 대한 결합에 영향을 미치는지 여부를 결정하기 위해, 고도로 정제된 이중특이성 샘플(TD01B46(BCMB749 x Cris7b spFv), TD01B48(BCMB749 x Cris7b scFv G4S) 및 TD01B49(BCMB749 x Cris7b scFv Bird))을 사용하여 생물층 간섭계(BLI) 및 ELISA를 사용하여 결합을 수행하였다. 재조합 CD3E/D 헤테로이량체 단백질을 사용하여, scFv/spFv 항 CD3 아암의 결합을 평가하였다. 결합 측정으로부터, scFv 및 spFv 이중특이체가 CD3에 유사하게 결합하는 것으로 나타났으며, 이는 scFv에 '스테이플링'을 추가해도 CD3 결합에 변화가 없었음을 나타낸다(**도 17d**; **도 26a**). BLI로부터의 센소그램(sensogram, **도 17d**)은 유사한 결합 반응, 결합 및 해리 프로파일을 보여줌으로써, scFv 및 spFv 이중특이체가 CD3에 대해 유사한 결합 동역학을 가지고 있음을 나타낸다. 이러한 결과는 ELISA 결합 데이터와 일치하였다(**도 26a**). scFv 링커(Bird 및 G4S)도 표적 단백질에 대한 친화도에 큰 영향을 미치지 않았다. scFv 또는 spFv 이중특이성 분자에서 동일한 항 Fab BCMA 아암은 또한 재조합 BCMA에 대한 유사한 결합 친화도를 나타내었다(**도 26b**; **도 26c**).

[1827] [표 17]

1:1 피팅 모델을 사용한 BLI 에 의한 scFv 및 spFv 이중특이성 분자의 BCMA 결합. scFv 및 spFv 이중특이체는 모두 동일한 BCMA 뮤린 Fab 아암을 포함함.

[1828]

샘플명	KD (M)	KD 오차	ka (1/Ms)	ka 오차	kdis (1/s)	kdis 오차
TD01B49	4.02E-09	4.13E-11	3.62E+05	3.47E+03	1.45E-03	5.39E-06
TD01B46	5.43E-09	5.85E-11	2.61E+05	2.61E+03	1.42E-03	5.59E-06

[1829] 종합하면, 이러한 데이터는 spFv가 대응 scFv 단백질의 결합 친화도를 유지함을 나타낸다. 스테이플링 돌연변이의 통합은 또한 관심 이중특이성 분자에서 파트너 도메인의 결합에 영향을 미치지 않았다.

[1830] **6.3.2.9 스테이플링된 이중특이체는 CD3 표적 분석에서 강력한 사멸을 나타냄**

[1831] T 세포 활성화 및 종양 세포의 사멸 가능성에 대한 BCMA 표적화 이중특이성 분자의 효과를 측정하기 위해, H929-Fluc-GFP 세포는 2개의 인간 공여자 Pan T 세포에 대한 표적 세포로서 작용하였다. 사멸 및 T 세포 활성화 상태의 검출을 72시간 후에 유세포 분석에 의해 평가하였다. 모든 이중특이성 단백질은 매우 유사한 EC50을 사용한 세포독성 분석에서 BCMA+ H929-GFP+ 세포를 강력하게 사멸시킨 반면에(**도 18a**), Cris7b scFv/비표적화 Fab(CD8B24)를 사용한 음성 대조군 이중특이체는 사멸 활성을 나타내지 않았다. scFv 또는 spFv 도메인을 포함하는 모든 이중특이성 작제물은 또한 유사한 EC50으로 CD4+ 및 CD8+ T 세포를 활성화시키는 반면에, 음성 대조군 분자는 T 세포를 활성화시키지 않았다(**도 18b** 및 **도 18c**). 이는 H929 세포 사멸이 CD3 방향 전환에 의한 T 세포 활성화의 결과임을 나타내었다. 종합하면, spFv는 치료용 작제물에서 scFv 기능을 완전히 유지한다.

[1832] **6.3.2.10 스테이플링은 잠재적인 치료용 다중특이성 분자의 생물물리학적 특성을 크게 개선하였음**

[1833] 스테이플링을 이전에 양호하지 못한 생물물리학적 특성을 보였던 다수의 전용 scFv 함유 이중특이성 및 삼중특이성 치료 항체에 적용하였다. scFv 함유 분자는 고농도에서 열 스트레스 시에 명백한 응집을 나타낸 반면에, spFv 함유 대응물은 유사한 조건 하에서 훨씬 적은 응집을 나타내었다(**도 27**). 이들 분자는 여전히 각각의 표적 결합을 유지하였다. 일부 경우에는 항원 결합이 약간 개선되었다(**도 27**). 생물물리학적 특성의 개선은 제품 품질 및 치료 결과의 개선으로도 이어질 수 있는 후속 치료제 개발에 매우 유익하였다.

[1834] **6.3.3 고찰**

[1835] 본 연구에서, "스테이플링"은 scFv 안정성을 크게 향상시키고 응집 경향을 줄이도록 설계되었다. 이는 다른 유연한 링커와 VL 및 VH 도메인 상의 보존된 2개의 앵커 위치 사이에 특이적 다이설파이드 결합을 형성함으로써 달성되었다. 단백질의 다이설파이드 결합은 단백질의 안정성에 기여한다. 실제로, 각 VL 및 VH 도메인은 도메

인에 상당한 안정성을 부여하는 보존된 도메인내 다이설파이드 결합을 포함한다. 다이설파이드는 단백질 구조의 조밀도를 증가시키기 위해 멀리 떨어진 구조 요소를 공유결합함으로써 단백질 안정성을 증가시킨다(문헌[Geckos *et al.* Biochemistry 42, 13746-13753 (2003)]; 문헌[Betz *et al.*. Protein Sci 2, 1551-1558 (1993)]). 설계된 바와 같은 스테이플링은 여러 메커니즘에 의해 scFv 안정성과 응집을 개선시켰다. 첫째, spFv 분자의 VL과 VH 도메인 사이의 링커, 특히 스테이플링 요소가 일반적으로 정렬되어 있는 것으로 나타났다. 이는 링커의 구조적 엔트로피를 현저하게 감소시켰다. 둘째, 2개의 스테이플링 다이설파이드 결합 사이에 짧은 거리가 있었다(관찰된 spFv 구조에서 약 6 내지 9 Å). 결과적으로, 2개의 접힌 VL 및 VH 도메인은 서로 자유롭게 분리될 수 없으므로, scFv와 비교하여 spFv의 전체 구조적 엔트로피가 감소한다. 흥미롭게도, 구조는 2개의 스테이플링 다이설파이드 결합을 제외하고는, 정렬된 링커와 VL 및 VH 도메인 사이에 직접적인 상호작용이 거의 없음을 나타내었다. 스테이플링은 또한 2개의 VL/VH 도메인의 상대 배향에 영향을 미치지 않았다. 따라서, 스테이플링은 VH와 VL 사이에 새로운 상호작용을 제공하지 않고, 오히려 기존 상호작용을 효과적으로 증가시켰다. 엔트로피 감소와 테더링 증가는 모두 spFv의 Tm을 크게 증가시키는 데 기여하며, 이는 결국 scFv 단백질 응집의 공통 인자인 도메인 풀림을 감소시킨다. 셋째, 스테이플링 다이설파이드 결합 사이의 짧은 거리는 scFv 응집에 기여하는 또 다른 중요한 인자인 VL/VH 호흡 및 분자간 교환을 방지하였다. 대조적으로, scFv의 VL과 VH 도메인 사이의 긴 링커(전형적으로 15개 이상의 aa)는 그러한 제한을 제공하지 않았다. 따라서, 스테이플링은 scFv 함유 바이오치료제의 개발 가능성에 매우 중요한 요소인 scFv 안정성을 향상시키고 응집을 감소시키는 효과적인 계획이었다.

[1836] 스테이플링을 위해 선택된 앵커 위치는 카파 또는 람다 경쇄의 모든 Fv 도메인에서 구조적으로 잘 보존되었다. LH 및 HL spFv에 대한 두 세트의 앵커 위치의 기하학적 구조는 비교적 좁은 변동 범위를 가졌다(**도 20b** 및 **도 20c**). 따라서, CPPC와 같은 단순한 모티프에 의한 스테이플링은 거의 모든 Fv 단편에 적용할 수 있을 것 같았다. 이러한 계획은 이전의 다이설파이드 매개 scFv 안정화 접근법, 즉, VL과 VH 도메인(L43-H105, DS1 및 L100-H44, DS2) 사이에 직접 다이설파이드 결합을 형성하는 것보다 우수하였다. DS1과 DS2의 안정화 효과는 일관되지 않았으며(문헌[Weatherill *et al.* Protein Eng Des Sel 25, 321-329 (2012)]), 따라서 scFv 부분을 통합한 현재 치료법에는 널리 적용되지 않았다. 단백질의 두 위치 사이에 다이설파이드 결합을 형성하려면, 비교적 좁은 범위의 기하학적 구조가 필요하다(문헌[Dani *et al.* Protein Eng 16, 187-193 (2003)]). 단백질 구조 분석에서의 Cα-Cα 거리 범위는 4.8 내지 6.8 Å(5.6 Å에서 피크)이었으며, Cβ-Cβ 거리는 약 3.4 내지 4.8 Å(약 3.8 Å에서 피크) 범위이었다(문헌[Dani *et al.* Protein Eng 16, 187-193 (2003)])(**도 20d** 및 **도 20e**). 이러한 파라미터는 두 위치의 환경과 함께, 성공적인 형성에 중요한 허용되는 SS 결합 형태를 결정한다. 2501개의 고분해능 Fab/scFv 구조 분석에 따르면, 대부분의 Fv 구조는 SS 결합 형성과 호환되는 기하학적 구조를 갖지 않는 것으로 나타났다. 예를 들어, Cβ-Cβ 거리는 각각, DS1과 DS2에 대해 약 5.2Å과 5.8Å으로 분포되었다. 이들은 단백질의 전형적인 SS 결합보다 훨씬 더 넓었다. 단백질 구조적 유연성으로 인해 구조의 서브세트가 SS 결합을 형성할 수 있지만, 바람직하지 않은 기학학적 구조를 가진 이러한 위치 사이의 다이설파이드는 대부분의 Fv 도메인에서 형성될 때 구조적 변형을 형성하거나 배치하지 않을 수도 있다. 반면에, 스테이플링 모티프의 두 다리는 Fv 도메인의 외부에 위치하며, 링커-앵커 포인트 다이설파이드 기하학적 구조를 충족시키기 위해 적절하게 쉽게 위치할 수 있다. 본 발명자들의 분석에 따르면, 2개의 스테이플링 다리 사이의 거리가 LH 및 HL에 대한 두 세트의 앵커 포인트 거리와 비슷한 것으로 나타났다(**도 20b** 및 **도 20c**). 따라서, 본 연구에서 보고된 여러 예에서 볼 수 있듯이, 스테이플링은 훨씬 더 광범위하게 적용할 수 있다.

[1837] 요약하면, 안정성을 향상시키고 scFv 매개 응집을 줄이기 위해 scFv를 "스테이플링"하는 간단하지만 널리 적용 가능한 전략이 제시되었다. scFv에 대한 향상된 안정성과 구조적 동일성을 통해, spFv는 이중특이체, 다중특이체, CAR-T 및 기타 분자 구조를 포함하여 대응 scFv가 사용된 모든 곳에서 사용될 수 있다. 스테이플링은 Fab/mAb의 scFv로의 성공적인 전환율을 향상시켜, 더 많은 spFv 부분이 목적에 맞는 분자 실체를 구성하는 데 사용할 수 있었다. scFv 대신 spFv를 사용하여 생물물리학적 특성이 향상되어 우수한 개발 가능성의 바이오치료제를 구축할 수 있으므로, 더 빠른 개발이 가능하고 약물 품질, 효능 및 안전성이 향상된다.

[1838] [표 18]

Glk1spFv_LH(mscg380)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3     정밀화.
REMARK   3    프로그램     : PHENIX (1.10_2155: ???)
REMARK   3      저자       : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                 : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                 : Hintze,Hung,Ioerger,McCoy,McKee,Moriarty,Oeffner,
REMARK   3                 : Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,Sauter,
REMARK   3                 : Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)        : 1.648
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)       : 35.855
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)   : 1.34
REMARK   3   범위의 완전성          (%) : 47.80
REMARK   3   반사 수                  : 54216
REMARK   3   반사 수 (비이상)          : 54216
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값      (작업 + 시험 세트)       : 0.2131
REMARK   3   R값             (작업 세트)      : 0.2112
REMARK   3   자유 R값                        : 0.2476
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈    (%)  : 4.93
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트         : 2675
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3   BIN       분해능 범위     COMPL.     NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWOR
REMARK   3     1 35.8638 -  4.3962    1.00      6055   334  0.1669 0.1912   0.93
REMARK   3     2  4.3962 -  3.4903    0.97      5606   294  0.1668 0.2198   0.93
REMARK   3     3  3.4903 -  3.0494    0.95      5454   293  0.2011 0.2522   0.89
REMARK   3     4  3.0494 -  2.7707    0.94      5387   289  0.2357 0.2542   0.85
REMARK   3     5  2.7707 -  2.5722    0.78      4449   204  0.2533 0.2720   0.83
REMARK   3     6  2.5722 -  2.4206    0.74      4173   222  0.2586 0.3032   0.82
REMARK   3     7  2.4206 -  2.2994    0.67      3816   192  0.2690 0.3076   0.81
REMARK   3     8  2.2994 -  2.1993    0.54      3053   156  0.2617 0.2972   0.80
REMARK   3     9  2.1993 -  2.1146    0.54      3083   148  0.2645 0.3286   0.81
REMARK   3    10  2.1146 -  2.0417    0.43      2440   134  0.2698 0.3188   0.79
REMARK   3    11  2.0417 -  1.9778    0.45      2472   144  0.2687 0.3044   0.80
REMARK   3    12  1.9778 -  1.9213    0.31      1711    77  0.2819 0.2962   0.76
REMARK   3    13  1.9213 -  1.8707    0.10       398    14  0.3397 0.4672   0.71
REMARK   3    14  1.8707 -  1.8251    0.20      1089    54  0.3235 0.3882   0.72
REMARK   3    15  1.8251 -  1.7836    0.14       787    38  0.3201 0.4522   0.71
REMARK   3    16  1.7836 -  1.7456    0.12       654    34  0.3197 0.3568   0.71
REMARK   3    17  1.7456 -  1.7107    0.09       481    29  0.3399 0.4151   0.71
REMARK   3    18  1.7107 -  1.6784    0.05       294    16  0.4195 0.4227   0.61
REMARK   3    19  1.6784 -  1.6485    0.02       139     3  0.4408 0.6659   0.64
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법        : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경          : 1.11
REMARK   3   수축 반경          : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자    : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)       : 0.20
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반)    : 35.39
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
```

[1839]

```
REMARK   3  제한 라이브러리
REMARK   3    GEOSTD + MON.LIB. + CDL v1.2
REMARK   3
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3                RMSD      MAX   카운트
REMARK   3   결합    :  0.011   0.167   7287
REMARK   3   각도    :  1.367  22.081   9888
REMARK   3   키랄성  :  0.071   0.558   1067
REMARK   3   평면성  :  0.008   0.064   1275
REMARK   3   이면각  : 12.502 178.262   4256
REMARK   3   최소 비결합 거리 : 1.733
REMARK   3
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3   모든 원자 충돌 점수 : 6.85
REMARK   3   라마찬드란 플롯:
REMARK   3     이상치 : 0.52  %
REMARK   3     허용   : 2.81  %
REMARK   3     선호   : 96.67 %
REMARK   3   회전 이성질체 이상치 : 0.79 %
REMARK   3   CBETA 편차         : 0
REMARK   3
REMARK   3  원자 변위 파라미터.
REMARK   3   WILSON B : 없음
REMARK   3   RMS(B_ISO_OR_EQUIVALENT_BONDED) : 2.64
REMARK   3   원자                    원자 수
REMARK   3                         ISO.  ANISO.
REMARK   3    모두           :   7544       0
REMARK   3    모두 (NO H)    :   7544       0
REMARK   3    용매           :    425       0
REMARK   3    비용매         :   7119       0
REMARK   3    수소           :      0       0
REMARK   3
REMARK   3  비틀림 NCS 세부사항.
REMARK   3   NCS 군의 수 : 1
REMARK   3   NCS 군 : 1
REMARK   3     선택                 : (사슬 A 및 ((resid 1 및 (명칭 N
REMARK   3                          : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                          : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                          : 또는 resseq 2 또는 resseq 4:23 또는
REMARK   3                          : resseq 25:31 또는 (resid 32 및
REMARK   3                          : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                          : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                          : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                          : 명칭 OH )) 또는 resseq 33:35 또는
REMARK   3                          : (resid 36 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                          : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                          : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                          : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                          : 37:69 또는 (resid 70 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                          : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                          : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                          : 또는 resseq 71:82 또는 (resid 83 및
REMARK   3                          : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                          : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                          : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                          : 또는 resseq 84:85 또는 (resid 86 및
REMARK   3                          : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                          : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                          : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                          : 명칭 OH )) 또는 (resid 87 및 (명칭
```

[1840]

```
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1
REMARK   3                     : 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH
REMARK   3                     : )) 또는 resseq 88:97 또는 (resid 98
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 99:104 또는 resseq 106 또는
REMARK   3                     : resseq 111:124 또는 resseq 127:157
REMARK   3                     : 또는 (resid 158 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 159:184 또는 (resid 185 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 (resid 186 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 187 또는 (resid 188 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 189:193 또는 (resid 194
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 195:198 또는 (resid 199
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 OD2)) 또는 resseq 200:205 또는
REMARK   3                     : (resid 206 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 207:214 또는 (resid 216 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                     : 또는 resseq 217:220 또는 (resid 221
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 222:223 또는
REMARK   3                     : (resid 224 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB ))
REMARK   3                     : 또는 (resid 225 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 226:228 또는 (resid 229 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 230:232 또는 (resid 233
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 OD2)) 또는 (resid 234 및 (명칭
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
```

[1841]

```
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ )) 또는
REMARK   3                     : resseq 235:243 또는 resseq 245))
REMARK   3      선택           : (사슬 B 및 ((resid 1 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                     : 또는 resseq 2 또는 resseq 4:23 또는
REMARK   3                     : resseq 25:31 또는 (resid 32 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 33:35 또는
REMARK   3                     : (resid 36 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 37:69 또는 (resid 70 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 71:82 또는 (resid 83 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 84:85 또는 (resid 86 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 (resid 87 및 (명칭
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1
REMARK   3                     : 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH
REMARK   3                     : )) 또는 resseq 88:97 또는 (resid 98
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 99:104 또는 resseq 106 또는
REMARK   3                     : resseq 111:124 또는 resseq 127:128
REMARK   3                     : 또는 (resid 129 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : )) 또는 resseq 130:157 또는 (resid 158
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 159:184 또는
REMARK   3                     : (resid 185 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 (resid
REMARK   3                     : 186 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resseq 187 또는
REMARK   3                     : (resid 188 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 OD2)) 또는 resseq
REMARK   3                     : 189:193 또는 (resid 194 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ )) 또는 resseq
```

[1842]

```
REMARK   3                     : 195:198 또는 (resid 199 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 200:205 또는 (resid 206
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 207:214 또는
REMARK   3                     : (resid 216 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 OD1)) 또는 resseq
REMARK   3                     : 217:220 또는 (resid 221 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 222:224 또는 (resid 225
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 226:228 또는
REMARK   3                     : (resid 229 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 230:232 또는 (resid 233 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 (resid 234 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ )) 또는 resseq 235:243 또는
REMARK   3                     : resseq 245))
REMARK   3      선택           : (사슬 C 및 ((resid 1 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                     : 또는 resseq 2 또는 resseq 4:23 또는
REMARK   3                     : resseq 25:31 또는 (resid 32 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 33:35 또는
REMARK   3                     : (resid 36 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 37:69 또는 (resid 70 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 71:82 또는 (resid 83 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 84:85 또는 (resid 86 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 (resid 87 및 (명칭
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1
```

[1843]

```
REMARK   3                        : 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH
REMARK   3                        : )) 또는 resseq 88:97 또는 (resid 98
REMARK   3                        : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                        : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                        : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                        : 또는 resseq 99:104 또는 resseq 106 또는
REMARK   3                        : resseq 111:123 또는 (resid 124 및
REMARK   3                        : (명칭 O 또는 명칭 N 또는 명칭 CA 또는
REMARK   3                        : 명칭 C 또는 명칭 CB )) 또는 resseq
REMARK   3                        : 127:128 또는 (resid 129 및 (명칭 N
REMARK   3                        : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                        : 명칭 CB )) 또는 resseq 130:157 또는
REMARK   3                        : (resid 158 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                        : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                        : 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는
REMARK   3                        : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                        : 159:184 또는 (resid 185 및 (명칭 N
REMARK   3                        : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                        : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                        : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                        : 또는 (resid 186 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                        : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                        : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                        : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                        : 187 또는 (resid 188 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                        : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                        : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                        : 또는 resseq 189:193 또는 (resid 194
REMARK   3                        : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                        : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                        : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                        : 또는 resseq 195:198 또는 (resid 199
REMARK   3                        : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                        : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                        : 명칭 OD2)) 또는 resseq 200:205 또는
REMARK   3                        : (resid 206 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                        : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                        : 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는
REMARK   3                        : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                        : 207:214 또는 (resid 216 및 (명칭 N
REMARK   3                        : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                        : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                        : 또는 resseq 217:220 또는 (resid 221
REMARK   3                        : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                        : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                        : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                        : 명칭 OH )) 또는 resseq 222:223 또는
REMARK   3                        : (resid 224 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                        : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB ))
REMARK   3                        : 또는 (resid 225 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                        : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                        : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1
REMARK   3                        : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                        : 226:228 또는 (resid 229 및 (명칭 N
REMARK   3                        : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                        : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                        : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                        : 또는 resseq 230:232 또는 (resid 233
REMARK   3                        : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
```

[1844]

```
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 OD2)) 또는 (resid 234 및 (명칭
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ )) 또는
REMARK   3                     : resseq 235:243 또는 resseq 245))
REMARK   3      선택           : (사슬 D 및 ((resid 1 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                     : 또는 resseq 2 또는 resseq 4:23 또는
REMARK   3                     : resseq 25:31 또는 (resid 32 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 33:35 또는
REMARK   3                     : (resid 36 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 37:69 또는 (resid 70 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 71:82 또는 (resid 83 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 84:85 또는 (resid 86 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 (resid 87 및 (명칭
REMARK   3                     : N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O
REMARK   3                     : 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1
REMARK   3                     : 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH
REMARK   3                     : )) 또는 resseq 88:97 또는 (resid 98
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 99:104 또는 resseq 106 또는
REMARK   3                     : resseq 111:124 또는 resseq 127:128
REMARK   3                     : 또는 (resid 129 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : )) 또는 resseq 130:157 또는 (resid 158
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 159:184 또는
REMARK   3                     : (resid 185 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 (resid
REMARK   3                     : 186 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resseq 187 또는
REMARK   3                     : (resid 188 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 OD2)) 또는 resseq
REMARK   3                     : 189:193 또는 (resid 194 및 (명칭 N
```

[1845]

```
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 195:198 또는 (resid 199 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resseq 200:205 또는 (resid 206
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resseq 207:214 또는
REMARK   3                     : (resid 216 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 OD1)) 또는 resseq
REMARK   3                     : 217:220 또는 (resid 221 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resseq 222:223 또는 (resid 224
REMARK   3                     : 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C
REMARK   3                     : 또는 명칭 O 또는 명칭 CB )) 또는 (resid
REMARK   3                     : 225 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resseq 226:228 또는
REMARK   3                     : (resid 229 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resseq
REMARK   3                     : 230:232 또는 (resid 233 및 (명칭 N
REMARK   3                     : 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 (resid 234 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ )) 또는 resseq 235:243 또는
REMARK   3                     : resseq 245))
REMARK   3     제한된 비틀림     : 4047
REMARK   3     한계 미만 RMSD   : 2.255
REMARK   3     모든 제한 RMSD   : 11.885
REMARK   3    한계 미만 차이의 히스토그램:
REMARK   3       0.000 -    1.500: 2614
REMARK   3       1.500 -    3.000: 894
REMARK   3       3.000 -    4.500: 229
REMARK   3       4.500 -    6.000: 73
REMARK   3       6.000 -    7.500: 36
REMARK   3       7.500 -    9.000: 15
REMARK   3       9.000 -   10.500: 20
REMARK   3      10.500 -   12.000: 9
REMARK   3      12.000 -   13.500: 14
REMARK   3      13.500 -   15.000: 7
REMARK   3    한계 초과 차이의 히스토그램:
REMARK   3      15.000 -   30.800: 52
REMARK   3      30.800 -   46.600: 43
REMARK   3      46.600 -   62.400: 10
REMARK   3      62.400 -   78.200: 7
REMARK   3      78.200 -   94.000: 3
REMARK   3      94.000 -  109.800: 4
REMARK   3     109.800 -  125.600: 6
REMARK   3     125.600 -  141.400: 7
REMARK   3     141.400 -  157.200: 2
REMARK   3     157.200 -  173.000: 3
```

[1846]

```
REMARK   3
SSBOND   1 CYS A   23    CYS A   88
SSBOND   2 CYS A   42    CYS A  118
SSBOND   3 CYS A  121    CYS A  237
SSBOND   4 CYS A  148    CYS A  222
SSBOND   5 CYS B   23    CYS B   88
SSBOND   6 CYS B   42    CYS B  118
SSBOND   7 CYS B  121    CYS B  237
SSBOND   8 CYS B  148    CYS B  222
SSBOND   9 CYS C   23    CYS C   88
SSBOND  10 CYS C   42    CYS C  118
SSBOND  11 CYS C  121    CYS C  237
SSBOND  12 CYS C  148    CYS C  222
SSBOND  13 CYS D   23    CYS D   88
SSBOND  14 CYS D   42    CYS D  118
SSBOND  15 CYS D  121    CYS D  237
SSBOND  16 CYS D  148    CYS D  222
CRYST1   45.630   78.940  257.300  90.00  90.00  90.00 P 21 21 21
SCALE1      0.021915  0.000000  0.000000        0.00000
SCALE2      0.000000  0.012668  0.000000        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.003887        0.00000
ATOM      1  N   ASP A   1      19.712 -13.816 -29.413  1.00 44.32           N
ATOM      2  CA  ASP A   1      19.894 -13.191 -28.112  1.00 40.82           C
ATOM      3  C   ASP A   1      20.943 -12.058 -28.136  1.00 41.45           C
ATOM      4  O   ASP A   1      22.100 -12.270 -28.522  1.00 39.84           O
ATOM      5  CB  ASP A   1      20.305 -14.242 -27.083  1.00 42.78           C
ATOM      6  CG  ASP A   1      21.577 -14.999 -27.495  1.00 55.36           C
ATOM      7  OD1 ASP A   1      21.930 -14.972 -28.700  1.00 56.44           O
ATOM      8  OD2 ASP A   1      22.244 -15.596 -26.612  1.00 56.35           O
ATOM      9  N   ILE A   2      20.531 -10.857 -27.732  1.00 33.20           N
ATOM     10  CA  ILE A   2      21.449  -9.744 -27.562  1.00 27.94           C
ATOM     11  C   ILE A   2      21.950  -9.824 -26.136  1.00 28.98           C
ATOM     12  O   ILE A   2      21.156  -9.968 -25.202  1.00 29.90           O
ATOM     13  CB  ILE A   2      20.767  -8.397 -27.844  1.00 29.06           C
ATOM     14  CG1 ILE A   2      20.316  -8.285 -29.304  1.00 26.12           C
ATOM     15  CG2 ILE A   2      21.676  -7.237 -27.463  1.00 28.02           C
ATOM     16  CD1 ILE A   2      19.645  -6.951 -29.623  1.00 26.97           C
ATOM     17  N   GLN A   3      23.265  -9.811 -25.965  1.00 30.82           N
ATOM     18  CA  GLN A   3      23.875  -9.972 -24.657  1.00 30.15           C
ATOM     19  C   GLN A   3      24.169  -8.596 -24.102  1.00 29.42           C
ATOM     20  O   GLN A   3      24.855  -7.797 -24.749  1.00 32.17           O
ATOM     21  CB  GLN A   3      25.137 -10.821 -24.751  1.00 34.83           C
ATOM     22  CG  GLN A   3      24.855 -12.202 -25.329  1.00 41.78           C
ATOM     23  CD  GLN A   3      26.019 -12.746 -26.149  1.00 47.89           C
ATOM     24  NE2 GLN A   3      25.770 -13.009 -27.430  1.00 43.95           N
ATOM     25  OE1 GLN A   3      27.131 -12.916 -25.638  1.00 54.38           O
ATOM     26  N   MET A   4      23.614  -8.308 -22.928  1.00 28.84           N
ATOM     27  CA  MET A   4      23.835  -7.058 -22.225  1.00 25.73           C
ATOM     28  C   MET A   4      24.857  -7.284 -21.124  1.00 28.29           C
ATOM     29  O   MET A   4      24.711  -8.208 -20.322  1.00 27.89           O
ATOM     30  CB  MET A   4      22.531  -6.550 -21.637  1.00 25.14           C
ATOM     31  CG  MET A   4      21.454  -6.408 -22.678  1.00 25.96           C
ATOM     32  SD  MET A   4      21.892  -5.285 -24.000  1.00 27.83           S
ATOM     33  CE  MET A   4      21.888  -3.753 -23.137  1.00 25.25           C
ATOM     34  N   THR A   5      25.901  -6.471 -21.101  1.00 26.41           N
ATOM     35  CA  THR A   5      26.966  -6.623 -20.122  1.00 26.54           C
ATOM     36  C   THR A   5      27.118  -5.337 -19.326  1.00 28.29           C
ATOM     37  O   THR A   5      27.340  -4.270 -19.905  1.00 30.45           O
ATOM     38  CB  THR A   5      28.279  -6.978 -20.820  1.00 30.74           C
ATOM     39  CG2 THR A   5      29.316  -7.453 -19.798  1.00 33.87           C
ATOM     40  OG1 THR A   5      28.037  -8.005 -21.790  1.00 32.06           O
ATOM     41  N   GLN A   6      26.977  -5.428 -18.009  1.00 26.43           N
ATOM     42  CA  GLN A   6      27.184  -4.267 -17.159  1.00 28.93           C
ATOM     43  C   GLN A   6      28.526  -4.337 -16.446  1.00 31.32           C
ATOM     44  O   GLN A   6      29.015  -5.420 -16.111  1.00 32.12           O
ATOM     45  CB  GLN A   6      26.090  -4.136 -16.105  1.00 29.49           C
ATOM     46  CG  GLN A   6      24.687  -4.048 -16.644  1.00 29.68           C
ATOM     47  CD  GLN A   6      23.675  -3.981 -15.503  1.00 28.11           C
```

[1847]

```
ATOM     48  NE2 GLN A   6      24.040  -3.286 -14.411  1.00 24.39           N
ATOM     49  OE1 GLN A   6      22.589  -4.574 -15.593  1.00 28.00           O
ATOM     50  N   SER A   7      29.111  -3.165 -16.194  1.00 32.41           N
ATOM     51  CA  SER A   7      30.291  -3.079 -15.335  1.00 30.85           C
ATOM     52  C   SER A   7      30.314  -1.785 -14.530  1.00 28.05           C
ATOM     53  O   SER A   7      29.947  -0.730 -15.041  1.00 32.52           O
ATOM     54  CB  SER A   7      31.543  -3.237 -16.179  1.00 33.57           C
ATOM     55  OG  SER A   7      31.676  -2.117 -17.011  1.00 41.17           O
ATOM     56  N   PRO A   8      30.768  -1.854 -13.266  1.00 30.48           N
ATOM     57  CA  PRO A   8      31.224  -3.104 -12.643  1.00 29.34           C
ATOM     58  C   PRO A   8      30.055  -3.997 -12.194  1.00 30.90           C
ATOM     59  O   PRO A   8      28.895  -3.603 -12.354  1.00 31.55           O
ATOM     60  CB  PRO A   8      32.026  -2.609 -11.440  1.00 27.55           C
ATOM     61  CG  PRO A   8      31.305  -1.320 -11.015  1.00 25.10           C
ATOM     62  CD  PRO A   8      30.815  -0.704 -12.335  1.00 25.54           C
ATOM     63  N   SER A   9      30.359  -5.188 -11.678  1.00 26.41           N
ATOM     64  CA  SER A   9      29.332  -6.053 -11.116  1.00 27.53           C
ATOM     65  C   SER A   9      28.899  -5.591  -9.739  1.00 27.36           C
ATOM     66  O   SER A   9      27.761  -5.844  -9.320  1.00 29.12           O
ATOM     67  CB  SER A   9      29.862  -7.482 -11.018  1.00 29.18           C
ATOM     68  OG  SER A   9      30.117  -8.007 -12.310  1.00 34.43           O
ATOM     69  N   SER A  10      29.788  -4.920  -9.020  1.00 30.55           N
ATOM     70  CA  SER A  10      29.518  -4.441  -7.677  1.00 29.76           C
ATOM     71  C   SER A  10      30.393  -3.227  -7.420  1.00 29.36           C
ATOM     72  O   SER A  10      31.413  -3.019  -8.071  1.00 32.60           O
ATOM     73  CB  SER A  10      29.746  -5.539  -6.628  1.00 29.61           C
ATOM     74  OG  SER A  10      31.130  -5.775  -6.455  1.00 40.59           O
ATOM     75  N   LEU A  11      29.963  -2.403  -6.484  1.00 32.44           N
ATOM     76  CA  LEU A  11      30.545  -1.085  -6.354  1.00 27.59           C
ATOM     77  C   LEU A  11      30.355  -0.604  -4.923  1.00 30.01           C
ATOM     78  O   LEU A  11      29.258  -0.733  -4.377  1.00 32.52           O
ATOM     79  CB  LEU A  11      29.832  -0.194  -7.329  1.00 26.38           C
ATOM     80  CG  LEU A  11      30.051   1.254  -7.603  1.00 27.77           C
ATOM     81  CD1 LEU A  11      29.543   1.417  -9.043  1.00 26.23           C
ATOM     82  CD2 LEU A  11      29.329   2.129  -6.613  1.00 30.55           C
ATOM     83  N   SER A  12      31.409  -0.078  -4.303  1.00 33.47           N
ATOM     84  CA  SER A  12      31.320   0.519  -2.977  1.00 31.54           C
ATOM     85  C   SER A  12      31.323   2.034  -3.105  1.00 31.02           C
ATOM     86  O   SER A  12      32.105   2.585  -3.877  1.00 35.75           O
ATOM     87  CB  SER A  12      32.494   0.079  -2.116  1.00 35.56           C
ATOM     88  OG  SER A  12      32.511  -1.331  -2.010  1.00 39.48           O
ATOM     89  N   ALA A  13      30.443   2.717  -2.376  1.00 30.44           N
ATOM     90  CA  ALA A  13      30.400   4.170  -2.489  1.00 30.40           C
ATOM     91  C   ALA A  13      29.898   4.800  -1.192  1.00 34.79           C
ATOM     92  O   ALA A  13      29.367   4.116  -0.311  1.00 36.00           O
ATOM     93  CB  ALA A  13      29.539   4.589  -3.673  1.00 32.28           C
ATOM     94  N   SER A  14      30.074   6.124  -1.081  1.00 32.96           N
ATOM     95  CA  SER A  14      29.637   6.897   0.075  1.00 30.81           C
ATOM     96  C   SER A  14      28.524   7.865  -0.301  1.00 28.34           C
ATOM     97  O   SER A  14      28.451   8.322  -1.439  1.00 31.82           O
ATOM     98  CB  SER A  14      30.803   7.688   0.677  1.00 35.98           C
ATOM     99  OG  SER A  14      31.915   6.835   0.932  1.00 41.64           O
ATOM    100  N   VAL A  15      27.674   8.199   0.676  1.00 27.17           N
ATOM    101  CA  VAL A  15      26.636   9.194   0.443  1.00 28.77           C
ATOM    102  C   VAL A  15      27.271  10.462  -0.071  1.00 29.50           C
ATOM    103  O   VAL A  15      28.203  10.987   0.543  1.00 36.80           O
ATOM    104  CB  VAL A  15      25.840   9.462   1.730  1.00 32.08           C
ATOM    105  CG1 VAL A  15      24.896  10.647   1.535  1.00 29.04           C
ATOM    106  CG2 VAL A  15      25.044   8.214   2.154  1.00 28.14           C
ATOM    107  N   GLY A  16      26.741  10.991  -1.168  1.00 29.45           N
ATOM    108  CA  GLY A  16      27.290  12.160  -1.815  1.00 30.70           C
ATOM    109  C   GLY A  16      28.209  11.877  -2.989  1.00 30.58           C
ATOM    110  O   GLY A  16      28.457  12.789  -3.786  1.00 37.46           O
ATOM    111  N   ASP A  17      28.712  10.649  -3.126  1.00 30.62           N
ATOM    112  CA  ASP A  17      29.550  10.266  -4.261  1.00 30.67           C
ATOM    113  C   ASP A  17      28.810  10.341  -5.603  1.00 34.09           C
ATOM    114  O   ASP A  17      27.579  10.236  -5.681  1.00 32.35           O
ATOM    115  CB  ASP A  17      30.058   8.840  -4.108  1.00 31.90           C
```

[1848]

```
ATOM    116  CG  ASP A  17      31.129   8.711  -3.075  1.00 34.83           C
ATOM    117  OD1 ASP A  17      31.661   9.748  -2.628  1.00 41.20           O
ATOM    118  OD2 ASP A  17      31.471   7.561  -2.741  1.00 35.85           O
ATOM    119  N   ARG A  18      29.590  10.540  -6.667  1.00 33.92           N
ATOM    120  CA  ARG A  18      29.142  10.362  -8.042  1.00 29.57           C
ATOM    121  C   ARG A  18      29.378   8.916  -8.469  1.00 31.55           C
ATOM    122  O   ARG A  18      30.500   8.407  -8.351  1.00 34.46           O
ATOM    123  CB  ARG A  18      29.899  11.317  -8.969  1.00 32.19           C
ATOM    124  CG  ARG A  18      29.850  10.941 -10.455  1.00 29.62           C
ATOM    125  CD  ARG A  18      30.697  11.856 -11.337  1.00 31.38           C
ATOM    126  NE  ARG A  18      30.307  11.764 -12.741  1.00 29.60           N
ATOM    127  CZ  ARG A  18      29.330  12.477 -13.299  1.00 28.96           C
ATOM    128  NH1 ARG A  18      28.645  13.354 -12.582  1.00 28.00           N
ATOM    129  NH2 ARG A  18      29.041  12.314 -14.581  1.00 27.45           N
ATOM    130  N   VAL A  19      28.321   8.233  -8.904  1.00 28.33           N
ATOM    131  CA  VAL A  19      28.393   6.833  -9.312  1.00 28.56           C
ATOM    132  C   VAL A  19      27.964   6.732 -10.773  1.00 26.05           C
ATOM    133  O   VAL A  19      26.981   7.353 -11.190  1.00 25.90           O
ATOM    134  CB  VAL A  19      27.521   5.917  -8.421  1.00 27.52           C
ATOM    135  CG1 VAL A  19      27.369   4.527  -9.030  1.00 28.44           C
ATOM    136  CG2 VAL A  19      28.115   5.781  -7.006  1.00 29.25           C
ATOM    137  N   THR A  20      28.704   5.961 -11.552  1.00 23.86           N
ATOM    138  CA  THR A  20      28.356   5.731 -12.942  1.00 26.45           C
ATOM    139  C   THR A  20      28.415   4.231 -13.200  1.00 30.53           C
ATOM    140  O   THR A  20      29.346   3.546 -12.751  1.00 28.72           O
ATOM    141  CB  THR A  20      29.260   6.533 -13.909  1.00 30.61           C
ATOM    142  CG2 THR A  20      29.336   8.009 -13.489  1.00 26.78           C
ATOM    143  OG1 THR A  20      30.572   5.971 -13.928  1.00 36.46           O
ATOM    144  N   ILE A  21      27.375   3.711 -13.846  1.00 28.48           N
ATOM    145  CA  ILE A  21      27.273   2.296 -14.189  1.00 27.74           C
ATOM    146  C   ILE A  21      27.202   2.203 -15.712  1.00 28.40           C
ATOM    147  O   ILE A  21      26.462   2.971 -16.343  1.00 27.60           O
ATOM    148  CB  ILE A  21      26.031   1.673 -13.544  1.00 25.81           C
ATOM    149  CG1 ILE A  21      26.100   1.870 -12.038  1.00 24.99           C
ATOM    150  CG2 ILE A  21      25.969   0.171 -13.869  1.00 28.15           C
ATOM    151  CD1 ILE A  21      24.917   1.359 -11.343  1.00 22.92           C
ATOM    152  N   THR A  22      27.904   1.234 -16.306  1.00 24.06           N
ATOM    153  CA  THR A  22      27.956   1.173 -17.744  1.00 28.02           C
ATOM    154  C   THR A  22      27.210  -0.086 -18.198  1.00 27.36           C
ATOM    155  O   THR A  22      27.176  -1.106 -17.490  1.00 29.00           O
ATOM    156  CB  THR A  22      29.427   1.116 -18.159  1.00 28.12           C
ATOM    157  CG2 THR A  22      29.566   0.696 -19.580  1.00 29.36           C
ATOM    158  OG1 THR A  22      29.954   2.441 -18.158  1.00 37.03           O
ATOM    159  N   CYS A  23      26.587  -0.011 -19.371  1.00 25.81           N
ATOM    160  CA  CYS A  23      25.871  -1.145 -19.938  1.00 25.49           C
ATOM    161  C   CYS A  23      26.227  -1.208 -21.414  1.00 25.03           C
ATOM    162  O   CYS A  23      26.067  -0.218 -22.135  1.00 25.64           O
ATOM    163  CB  CYS A  23      24.363  -0.960 -19.735  1.00 24.48           C
ATOM    164  SG  CYS A  23      23.257  -2.220 -20.470  1.00 33.16           S
ATOM    165  N   ARG A  24      26.749  -2.342 -21.853  1.00 25.83           N
ATOM    166  CA  ARG A  24      27.127  -2.531 -23.245  1.00 26.59           C
ATOM    167  C   ARG A  24      26.326  -3.661 -23.884  1.00 27.66           C
ATOM    168  O   ARG A  24      26.137  -4.719 -23.278  1.00 32.77           O
ATOM    169  CB  ARG A  24      28.620  -2.826 -23.383  1.00 32.37           C
ATOM    170  CG  ARG A  24      29.001  -3.464 -24.728  1.00 37.23           C
ATOM    171  CD  ARG A  24      30.488  -3.831 -24.799  1.00 40.56           C
ATOM    172  NE  ARG A  24      30.800  -5.173 -24.292  1.00 42.78           N
ATOM    173  CZ  ARG A  24      31.281  -5.428 -23.075  1.00 37.80           C
ATOM    174  NH1 ARG A  24      31.487  -4.437 -22.213  1.00 41.93           N
ATOM    175  NH2 ARG A  24      31.556  -6.678 -22.721  1.00 37.49           N
ATOM    176  N   ALA A  25      25.850  -3.432 -25.112  1.00 29.01           N
ATOM    177  CA  ALA A  25      25.052  -4.401 -25.858  1.00 28.36           C
ATOM    178  C   ALA A  25      25.901  -5.050 -26.952  1.00 25.73           C
ATOM    179  O   ALA A  25      26.723  -4.388 -27.582  1.00 32.20           O
ATOM    180  CB  ALA A  25      23.824  -3.719 -26.465  1.00 23.16           C
ATOM    181  N   SER A  26      25.707  -6.350 -27.180  1.00 26.81           N
ATOM    182  CA  SER A  26      26.508  -7.060 -28.172  1.00 25.51           C
ATOM    183  C   SER A  26      26.170  -6.668 -29.597  1.00 29.14           C
```

[1849]

```
ATOM    184  O   SER A  26      26.789  -7.202 -30.525  1.00 34.42           O
ATOM    185  CB  SER A  26      26.368  -8.576 -28.042  1.00 29.93           C
ATOM    186  OG  SER A  26      25.044  -9.022 -28.248  1.00 31.88           O
ATOM    187  N   GLN A  27      25.134  -5.861 -29.803  1.00 28.63           N
ATOM    188  CA  GLN A  27      24.860  -5.253 -31.093  1.00 27.58           C
ATOM    189  C   GLN A  27      24.069  -3.991 -30.826  1.00 28.44           C
ATOM    190  O   GLN A  27      23.549  -3.788 -29.725  1.00 28.34           O
ATOM    191  CB  GLN A  27      24.125  -6.210 -32.026  1.00 26.92           C
ATOM    192  CG  GLN A  27      22.672  -6.368 -31.702  1.00 32.10           C
ATOM    193  CD  GLN A  27      21.998  -7.363 -32.606  1.00 32.40           C
ATOM    194  NE2 GLN A  27      22.292  -8.646 -32.396  1.00 29.51           N
ATOM    195  OE1 GLN A  27      21.236  -6.990 -33.496  1.00 35.97           O
ATOM    196  N   SER A  28      23.997  -3.133 -31.836  1.00 24.93           N
ATOM    197  CA  SER A  28      23.368  -1.838 -31.654  1.00 26.61           C
ATOM    198  C   SER A  28      21.886  -2.019 -31.379  1.00 27.73           C
ATOM    199  O   SER A  28      21.219  -2.815 -32.055  1.00 24.80           O
ATOM    200  CB  SER A  28      23.597  -0.966 -32.879  1.00 26.69           C
ATOM    201  OG  SER A  28      22.996   0.293 -32.687  1.00 30.61           O
ATOM    202  N   ILE A  29      21.390  -1.308 -30.353  1.00 24.52           N
ATOM    203  CA  ILE A  29      19.997  -1.342 -29.920  1.00 21.80           C
ATOM    204  C   ILE A  29      19.358   0.022 -29.986  1.00 24.07           C
ATOM    205  O   ILE A  29      18.297   0.239 -29.395  1.00 25.53           O
ATOM    206  CB  ILE A  29      19.846  -1.944 -28.504  1.00 23.59           C
ATOM    207  CG1 ILE A  29      20.680  -1.187 -27.455  1.00 20.83           C
ATOM    208  CG2 ILE A  29      20.266  -3.405 -28.487  1.00 26.03           C
ATOM    209  CD1 ILE A  29      20.452  -1.690 -26.023  1.00 22.15           C
ATOM    210  N   SER A  30      19.979   0.957 -30.700  1.00 24.83           N
ATOM    211  CA  SER A  30      19.468   2.318 -30.831  1.00 21.04           C
ATOM    212  C   SER A  30      19.286   2.911 -29.438  1.00 22.84           C
ATOM    213  O   SER A  30      20.280   2.987 -28.693  1.00 22.79           O
ATOM    214  CB  SER A  30      18.232   2.211 -31.723  1.00 23.41           C
ATOM    215  OG  SER A  30      17.624   3.459 -31.842  1.00 33.05           O
ATOM    216  N   SER A  31      18.087   3.366 -29.042  1.00 23.22           N
ATOM    217  CA  SER A  31      17.836   3.867 -27.695  1.00 24.18           C
ATOM    218  C   SER A  31      16.902   2.966 -26.898  1.00 20.74           C
ATOM    219  O   SER A  31      16.344   3.409 -25.891  1.00 24.40           O
ATOM    220  CB  SER A  31      17.239   5.269 -27.747  1.00 24.30           C
ATOM    221  OG  SER A  31      18.153   6.210 -28.270  1.00 28.68           O
ATOM    222  N   TYR A  32      16.716   1.716 -27.316  1.00 19.58           N
ATOM    223  CA  TYR A  32      15.788   0.816 -26.632  1.00 20.66           C
ATOM    224  C   TYR A  32      16.499   0.176 -25.445  1.00 18.85           C
ATOM    225  O   TYR A  32      16.757  -1.023 -25.412  1.00 20.82           O
ATOM    226  CB  TYR A  32      15.230  -0.224 -27.598  1.00 21.26           C
ATOM    227  CG  TYR A  32      14.233   0.389 -28.573  1.00 22.18           C
ATOM    228  CD2 TYR A  32      14.662   0.929 -29.785  1.00 24.68           C
ATOM    229  CD1 TYR A  32      12.877   0.463 -28.272  1.00 21.73           C
ATOM    230  CE2 TYR A  32      13.774   1.500 -30.682  1.00 24.80           C
ATOM    231  CE1 TYR A  32      11.972   1.047 -29.165  1.00 22.63           C
ATOM    232  CZ  TYR A  32      12.436   1.573 -30.364  1.00 27.20           C
ATOM    233  OH  TYR A  32      11.566   2.154 -31.272  1.00 28.11           O
ATOM    234  N   LEU A  33      16.803   1.014 -24.454  1.00 21.00           N
ATOM    235  CA  LEU A  33      17.579   0.627 -23.278  1.00 18.85           C
ATOM    236  C   LEU A  33      16.953   1.282 -22.060  1.00 23.40           C
ATOM    237  O   LEU A  33      16.875   2.512 -22.003  1.00 23.37           O
ATOM    238  CB  LEU A  33      19.039   1.080 -23.418  1.00 19.55           C
ATOM    239  CG  LEU A  33      20.095   0.541 -22.429  1.00 21.65           C
ATOM    240  CD1 LEU A  33      20.100   1.328 -21.135  1.00 19.65           C
ATOM    241  CD2 LEU A  33      19.918  -0.966 -22.124  1.00 20.50           C
ATOM    242  N   ASN A  34      16.546   0.479 -21.077  1.00 20.44           N
ATOM    243  CA  ASN A  34      15.881   0.975 -19.887  1.00 20.38           C
ATOM    244  C   ASN A  34      16.660   0.584 -18.645  1.00 17.87           C
ATOM    245  O   ASN A  34      17.397  -0.410 -18.649  1.00 20.93           O
ATOM    246  CB  ASN A  34      14.460   0.448 -19.833  1.00 22.29           C
ATOM    247  CG  ASN A  34      13.726   0.694 -21.135  1.00 22.91           C
ATOM    248  ND2 ASN A  34      13.140  -0.363 -21.690  1.00 22.12           N
ATOM    249  OD1 ASN A  34      13.664   1.835 -21.627  1.00 23.29           O
ATOM    250  N   TRP A  35      16.496   1.365 -17.577  1.00 19.18           N
[1850] ATOM    251  CA  TRP A  35      17.221   1.141 -16.332  1.00 19.23           C
```

```
ATOM    252  C   TRP A  35      16.279   0.930 -15.153  1.00 16.51           C
ATOM    253  O   TRP A  35      15.325   1.682 -14.960  1.00 16.21           O
ATOM    254  CB  TRP A  35      18.149   2.333 -16.009  1.00 21.50           C
ATOM    255  CG  TRP A  35      19.383   2.457 -16.894  1.00 19.78           C
ATOM    256  CD1 TRP A  35      19.521   3.254 -17.985  1.00 20.33           C
ATOM    257  CD2 TRP A  35      20.645   1.791 -16.722  1.00 18.21           C
ATOM    258  CE2 TRP A  35      21.490   2.229 -17.757  1.00 20.89           C
ATOM    259  CE3 TRP A  35      21.136   0.881 -15.797  1.00 19.70           C
ATOM    260  NE1 TRP A  35      20.778   3.114 -18.517  1.00 21.14           N
ATOM    261  CZ2 TRP A  35      22.798   1.781 -17.895  1.00 21.15           C
ATOM    262  CZ3 TRP A  35      22.434   0.417 -15.943  1.00 21.07           C
ATOM    263  CH2 TRP A  35      23.247   0.872 -16.984  1.00 21.03           C
ATOM    264  N   TYR A  36      16.603  -0.041 -14.325  1.00 20.23           N
ATOM    265  CA  TYR A  36      15.773  -0.389 -13.189  1.00 19.27           C
ATOM    266  C   TYR A  36      16.590  -0.426 -11.908  1.00 19.28           C
ATOM    267  O   TYR A  36      17.739  -0.873 -11.896  1.00 21.83           O
ATOM    268  CB  TYR A  36      15.092  -1.776 -13.395  1.00 21.26           C
ATOM    269  CG  TYR A  36      14.170  -1.827 -14.617  1.00 20.98           C
ATOM    270  CD1 TYR A  36      12.847  -1.410 -14.529  1.00 18.97           C
ATOM    271  CD2 TYR A  36      14.633  -2.265 -15.850  1.00 19.01           C
ATOM    272  CE1 TYR A  36      12.016  -1.444 -15.611  1.00 17.83           C
ATOM    273  CE2 TYR A  36      13.793  -2.290 -16.960  1.00 21.27           C
ATOM    274  CZ  TYR A  36      12.480  -1.864 -16.820  1.00 19.35           C
ATOM    275  OH  TYR A  36      11.616  -1.874 -17.900  1.00 20.90           O
ATOM    276  N   GLN A  37      15.950  -0.043 -10.810  1.00 19.57           N
ATOM    277  CA  GLN A  37      16.517  -0.198  -9.477  1.00 19.27           C
ATOM    278  C   GLN A  37      15.758  -1.295  -8.744  1.00 20.43           C
ATOM    279  O   GLN A  37      14.527  -1.376  -8.843  1.00 22.17           O
ATOM    280  CB  GLN A  37      16.409   1.105  -8.702  1.00 18.89           C
ATOM    281  CG  GLN A  37      16.934   1.071  -7.322  1.00 20.94           C
ATOM    282  CD  GLN A  37      16.570   2.344  -6.589  1.00 25.69           C
ATOM    283  NE2 GLN A  37      17.579   3.191  -6.318  1.00 23.72           N
ATOM    284  OE1 GLN A  37      15.378   2.597  -6.308  1.00 21.45           O
ATOM    285  N   GLN A  38      16.479  -2.162  -8.036  1.00 19.65           N
ATOM    286  CA  GLN A  38      15.838  -3.165  -7.194  1.00 18.49           C
ATOM    287  C   GLN A  38      16.550  -3.286  -5.857  1.00 20.30           C
ATOM    288  O   GLN A  38      17.754  -3.547  -5.807  1.00 20.82           O
ATOM    289  CB  GLN A  38      15.784  -4.537  -7.874  1.00 19.37           C
ATOM    290  CG  GLN A  38      14.896  -5.500  -7.083  1.00 21.00           C
ATOM    291  CD  GLN A  38      14.921  -6.890  -7.628  1.00 20.49           C
ATOM    292  NE2 GLN A  38      13.878  -7.657  -7.341  1.00 19.89           N
ATOM    293  OE1 GLN A  38      15.873  -7.288  -8.279  1.00 21.50           O
ATOM    294  N   LYS A  39      15.795  -3.181  -4.786  1.00 22.30           N
ATOM    295  CA  LYS A  39      16.354  -3.468  -3.480  1.00 21.60           C
ATOM    296  C   LYS A  39      15.982  -4.889  -3.049  1.00 23.18           C
ATOM    297  O   LYS A  39      15.043  -5.489  -3.581  1.00 22.97           O
ATOM    298  CB  LYS A  39      15.830  -2.450  -2.476  1.00 23.89           C
ATOM    299  CG  LYS A  39      16.101  -1.028  -2.951  1.00 24.68           C
ATOM    300  CD  LYS A  39      15.442  -0.010  -2.033  1.00 25.38           C
ATOM    301  CE  LYS A  39      15.962   1.405  -2.229  1.00 26.83           C
ATOM    302  NZ  LYS A  39      15.060   2.400  -1.521  1.00 28.21           N
ATOM    303  N   PRO A  40      16.728  -5.487  -2.122  1.00 24.64           N
ATOM    304  CA  PRO A  40      16.485  -6.896  -1.783  1.00 26.54           C
ATOM    305  C   PRO A  40      15.065  -7.137  -1.291  1.00 23.48           C
ATOM    306  O   PRO A  40      14.560  -6.430  -0.419  1.00 23.93           O
ATOM    307  CB  PRO A  40      17.522  -7.178  -0.691  1.00 24.97           C
ATOM    308  CG  PRO A  40      18.143  -5.862  -0.358  1.00 24.32           C
ATOM    309  CD  PRO A  40      17.991  -5.005  -1.547  1.00 24.54           C
ATOM    310  N   GLY A  41      14.425  -8.152  -1.863  1.00 24.48           N
ATOM    311  CA  GLY A  41      13.066  -8.465  -1.484  1.00 22.94           C
ATOM    312  C   GLY A  41      12.012  -7.524  -2.021  1.00 23.60           C
ATOM    313  O   GLY A  41      10.842  -7.660  -1.650  1.00 22.33           O
ATOM    314  N   CYS A  42      12.377  -6.594  -2.895  1.00 23.34           N
ATOM    315  CA  CYS A  42      11.464  -5.638  -3.503  1.00 23.67           C
ATOM    316  C   CYS A  42      11.276  -5.958  -4.980  1.00 20.78           C
ATOM    317  O   CYS A  42      12.098  -6.633  -5.603  1.00 21.16           O
ATOM    318  CB  CYS A  42      11.993  -4.198  -3.381  1.00 21.79           C
ATOM    319  SG  CYS A  42      12.454  -3.587  -1.750  1.00 23.05           S
```

[1851]

```
ATOM    320  N   ALA A  43      10.183  -5.444  -5.545  1.00 19.80           N
ATOM    321  CA  ALA A  43      10.009  -5.453  -6.977  1.00 23.75           C
ATOM    322  C   ALA A  43      10.921  -4.401  -7.580  1.00 20.05           C
ATOM    323  O   ALA A  43      11.268  -3.435  -6.906  1.00 20.83           O
ATOM    324  CB  ALA A  43       8.570  -5.125  -7.358  1.00 23.69           C
ATOM    325  N   PRO A  44      11.324  -4.571  -8.836  1.00 21.85           N
ATOM    326  CA  PRO A  44      12.103  -3.531  -9.502  1.00 18.37           C
ATOM    327  C   PRO A  44      11.294  -2.256  -9.637  1.00 22.94           C
ATOM    328  O   PRO A  44      10.059  -2.261  -9.621  1.00 23.33           O
ATOM    329  CB  PRO A  44      12.419  -4.136 -10.884  1.00 20.17           C
ATOM    330  CG  PRO A  44      12.307  -5.583 -10.679  1.00 21.34           C
ATOM    331  CD  PRO A  44      11.204  -5.777  -9.665  1.00 18.91           C
ATOM    332  N   LYS A  45      12.015  -1.152  -9.823  1.00 20.56           N
ATOM    333  CA  LYS A  45      11.423   0.157 -10.044  1.00 21.40           C
ATOM    334  C   LYS A  45      12.060   0.727 -11.299  1.00 19.92           C
ATOM    335  O   LYS A  45      13.287   0.694 -11.428  1.00 20.07           O
ATOM    336  CB  LYS A  45      11.686   1.048  -8.840  1.00 19.66           C
ATOM    337  CG  LYS A  45      11.342   2.458  -9.030  1.00 22.08           C
ATOM    338  CD  LYS A  45      11.697   3.207  -7.781  1.00 24.92           C
ATOM    339  CE  LYS A  45      11.273   4.637  -7.878  1.00 31.01           C
ATOM    340  NZ  LYS A  45      11.702   5.374  -6.656  1.00 37.20           N
ATOM    341  N   LEU A  46      11.240   1.247 -12.216  1.00 19.83           N
ATOM    342  CA  LEU A  46      11.760   1.862 -13.439  1.00 19.86           C
ATOM    343  C   LEU A  46      12.380   3.219 -13.133  1.00 19.21           C
ATOM    344  O   LEU A  46      11.758   4.056 -12.488  1.00 21.14           O
ATOM    345  CB  LEU A  46      10.644   2.041 -14.467  1.00 20.06           C
ATOM    346  CG  LEU A  46      11.023   2.803 -15.739  1.00 19.40           C
ATOM    347  CD1 LEU A  46      12.044   1.987 -16.532  1.00 15.64           C
ATOM    348  CD2 LEU A  46       9.788   3.069 -16.592  1.00 21.80           C
ATOM    349  N   LEU A  47      13.612   3.437 -13.591  1.00 18.56           N
ATOM    350  CA  LEU A  47      14.310   4.709 -13.402  1.00 20.40           C
ATOM    351  C   LEU A  47      14.412   5.532 -14.682  1.00 22.86           C
ATOM    352  O   LEU A  47      14.047   6.720 -14.700  1.00 20.64           O
ATOM    353  CB  LEU A  47      15.719   4.422 -12.875  1.00 19.75           C
ATOM    354  CG  LEU A  47      15.891   3.706 -11.544  1.00 20.48           C
ATOM    355  CD1 LEU A  47      17.379   3.571 -11.271  1.00 20.60           C
ATOM    356  CD2 LEU A  47      15.196   4.453 -10.442  1.00 21.00           C
ATOM    357  N   ILE A  48      14.942   4.942 -15.758  1.00 19.25           N
ATOM    358  CA  ILE A  48      15.170   5.617 -17.030  1.00 22.14           C
ATOM    359  C   ILE A  48      14.601   4.748 -18.139  1.00 20.24           C
ATOM    360  O   ILE A  48      14.762   3.523 -18.125  1.00 20.92           O
ATOM    361  CB  ILE A  48      16.674   5.869 -17.290  1.00 22.82           C
ATOM    362  CG1 ILE A  48      17.328   6.697 -16.183  1.00 25.38           C
ATOM    363  CG2 ILE A  48      16.893   6.497 -18.655  1.00 23.92           C
ATOM    364  CD1 ILE A  48      16.947   8.159 -16.198  1.00 24.95           C
ATOM    365  N   TYR A  49      13.964   5.372 -19.115  1.00 23.97           N
ATOM    366  CA  TYR A  49      13.568   4.660 -20.322  1.00 23.68           C
ATOM    367  C   TYR A  49      14.039   5.426 -21.556  1.00 24.97           C
ATOM    368  O   TYR A  49      14.418   6.606 -21.487  1.00 24.49           O
ATOM    369  CB  TYR A  49      12.064   4.444 -20.379  1.00 22.84           C
ATOM    370  CG  TYR A  49      11.300   5.728 -20.446  1.00 22.32           C
ATOM    371  CD1 TYR A  49      11.032   6.454 -19.299  1.00 24.39           C
ATOM    372  CD2 TYR A  49      10.844   6.222 -21.660  1.00 25.14           C
ATOM    373  CE1 TYR A  49      10.327   7.654 -19.360  1.00 26.37           C
ATOM    374  CE2 TYR A  49      10.131   7.407 -21.728  1.00 22.60           C
ATOM    375  CZ  TYR A  49       9.874   8.108 -20.578  1.00 24.34           C
ATOM    376  OH  TYR A  49       9.185   9.293 -20.636  1.00 27.49           O
ATOM    377  N   ALA A  50      14.052   4.724 -22.689  1.00 23.63           N
ATOM    378  CA  ALA A  50      14.528   5.307 -23.928  1.00 20.86           C
ATOM    379  C   ALA A  50      15.921   5.909 -23.744  1.00 25.30           C
ATOM    380  O   ALA A  50      16.221   7.002 -24.239  1.00 27.32           O
ATOM    381  CB  ALA A  50      13.536   6.347 -24.438  1.00 22.57           C
ATOM    382  N   ALA A  51      16.767   5.191 -22.996  1.00 21.88           N
ATOM    383  CA  ALA A  51      18.183   5.490 -22.738  1.00 22.84           C
ATOM    384  C   ALA A  51      18.433   6.673 -21.815  1.00 23.73           C
ATOM    385  O   ALA A  51      19.375   6.639 -21.013  1.00 23.31           O
ATOM    386  CB  ALA A  51      18.938   5.742 -24.039  1.00 20.08           C
[1852]
ATOM    387  N   SER A  52      17.599   7.711 -21.889  1.00 23.36           N
```

```
ATOM    388  CA  SER A  52      17.926   8.952 -21.202  1.00 25.98           C
ATOM    389  C   SER A  52      16.737   9.697 -20.614  1.00 25.83           C
ATOM    390  O   SER A  52      16.954  10.732 -19.966  1.00 24.68           O
ATOM    391  CB  SER A  52      18.671   9.879 -22.157  1.00 27.50           C
ATOM    392  OG  SER A  52      17.814  10.223 -23.216  1.00 26.68           O
ATOM    393  N   SER A  53      15.500   9.215 -20.802  1.00 22.48           N
ATOM    394  CA  SER A  53      14.316   9.880 -20.265  1.00 23.44           C
ATOM    395  C   SER A  53      14.095   9.431 -18.830  1.00 25.31           C
ATOM    396  O   SER A  53      14.046   8.229 -18.558  1.00 25.06           O
ATOM    397  CB  SER A  53      13.074   9.561 -21.097  1.00 21.18           C
ATOM    398  OG  SER A  53      13.196  10.075 -22.414  1.00 28.04           O
ATOM    399  N   LEU A  54      13.992  10.391 -17.915  1.00 25.95           N
ATOM    400  CA  LEU A  54      13.762  10.082 -16.511  1.00 27.14           C
ATOM    401  C   LEU A  54      12.289   9.754 -16.267  1.00 25.97           C
ATOM    402  O   LEU A  54      11.400  10.503 -16.686  1.00 23.99           O
ATOM    403  CB  LEU A  54      14.226  11.258 -15.659  1.00 27.03           C
ATOM    404  CG  LEU A  54      14.283  11.114 -14.160  1.00 28.68           C
ATOM    405  CD1 LEU A  54      15.229   9.995 -13.846  1.00 26.87           C
ATOM    406  CD2 LEU A  54      14.848  12.419 -13.630  1.00 28.55           C
ATOM    407  N   GLN A  55      12.033   8.636 -15.587  1.00 24.61           N
ATOM    408  CA  GLN A  55      10.664   8.236 -15.293  1.00 22.43           C
ATOM    409  C   GLN A  55      10.050   9.193 -14.293  1.00 24.92           C
ATOM    410  O   GLN A  55      10.719   9.662 -13.378  1.00 24.96           O
ATOM    411  CB  GLN A  55      10.639   6.808 -14.740  1.00 25.87           C
ATOM    412  CG  GLN A  55       9.290   6.356 -14.162  1.00 23.70           C
ATOM    413  CD  GLN A  55       8.233   6.133 -15.220  1.00 26.25           C
ATOM    414  NE2 GLN A  55       7.049   5.741 -14.787  1.00 30.17           N
ATOM    415  OE1 GLN A  55       8.472   6.314 -16.415  1.00 31.61           O
ATOM    416  N   SER A  56       8.764   9.469 -14.460  1.00 26.80           N
ATOM    417  CA  SER A  56       8.100  10.415 -13.587  1.00 25.88           C
ATOM    418  C   SER A  56       8.214   9.976 -12.140  1.00 30.11           C
ATOM    419  O   SER A  56       7.896   8.835 -11.793  1.00 29.44           O
ATOM    420  CB  SER A  56       6.639  10.540 -13.976  1.00 30.20           C
ATOM    421  OG  SER A  56       6.033  11.500 -13.139  1.00 40.27           O
ATOM    422  N   GLY A  57       8.623  10.901 -11.287  1.00 32.32           N
ATOM    423  CA  GLY A  57       8.814  10.628  -9.886  1.00 29.92           C
ATOM    424  C   GLY A  57      10.226  10.271  -9.477  1.00 28.96           C
ATOM    425  O   GLY A  57      10.480  10.143  -8.277  1.00 33.23           O
ATOM    426  N   VAL A  58      11.139  10.067 -10.418  1.00 30.27           N
ATOM    427  CA  VAL A  58      12.513   9.695 -10.065  1.00 29.57           C
ATOM    428  C   VAL A  58      13.368  10.955  -9.909  1.00 29.32           C
ATOM    429  O   VAL A  58      13.351  11.827 -10.786  1.00 27.99           O
ATOM    430  CB  VAL A  58      13.114   8.721 -11.095  1.00 26.27           C
ATOM    431  CG1 VAL A  58      14.547   8.388 -10.729  1.00 26.92           C
ATOM    432  CG2 VAL A  58      12.314   7.424 -11.162  1.00 26.21           C
ATOM    433  N   PRO A  59      14.137  11.083  -8.830  1.00 30.93           N
ATOM    434  CA  PRO A  59      14.948  12.292  -8.618  1.00 28.67           C
ATOM    435  C   PRO A  59      15.917  12.564  -9.759  1.00 27.57           C
ATOM    436  O   PRO A  59      16.401  11.646 -10.420  1.00 27.87           O
ATOM    437  CB  PRO A  59      15.713  11.981  -7.327  1.00 27.84           C
ATOM    438  CG  PRO A  59      14.938  10.925  -6.655  1.00 29.49           C
ATOM    439  CD  PRO A  59      14.266  10.121  -7.718  1.00 30.03           C
ATOM    440  N   SER A  60      16.211  13.856  -9.965  1.00 30.05           N
ATOM    441  CA  SER A  60      17.034  14.338 -11.068  1.00 26.66           C
ATOM    442  C   SER A  60      18.512  14.040 -10.904  1.00 28.52           C
ATOM    443  O   SER A  60      19.274  14.226 -11.864  1.00 27.66           O
ATOM    444  CB  SER A  60      16.878  15.844 -11.202  1.00 27.58           C
ATOM    445  OG  SER A  60      15.820  16.153 -12.066  1.00 35.14           O
ATOM    446  N   ARG A  61      18.933  13.535  -9.748  1.00 28.87           N
ATOM    447  CA  ARG A  61      20.305  13.059  -9.649  1.00 28.23           C
ATOM    448  C   ARG A  61      20.522  11.813 -10.490  1.00 24.70           C
ATOM    449  O   ARG A  61      21.679  11.466 -10.744  1.00 23.93           O
ATOM    450  CB  ARG A  61      20.666  12.788  -8.189  1.00 28.60           C
ATOM    451  CG  ARG A  61      19.832  11.719  -7.529  1.00 26.15           C
ATOM    452  CD  ARG A  61      20.240  11.527  -6.081  1.00 27.70           C
ATOM    453  NE  ARG A  61      19.464  10.465  -5.444  1.00 29.52           N
ATOM    454  CZ  ARG A  61      18.265  10.630  -4.884  1.00 28.35           C
ATOM    455  NH1 ARG A  61      17.679  11.815  -4.865  1.00 27.40           N
```

[1853]

```
ATOM    456  NH2 ARG A  61      17.652   9.590  -4.342  1.00 32.30           N
ATOM    457  N   PHE A  62      19.448  11.137 -10.929  1.00 24.04           N
ATOM    458  CA  PHE A  62      19.555  10.007 -11.852  1.00 21.34           C
ATOM    459  C   PHE A  62      19.543  10.514 -13.282  1.00 22.99           C
ATOM    460  O   PHE A  62      18.694  11.323 -13.653  1.00 23.69           O
ATOM    461  CB  PHE A  62      18.413   8.997 -11.671  1.00 25.84           C
ATOM    462  CG  PHE A  62      18.486   8.207 -10.391  1.00 22.10           C
ATOM    463  CD1 PHE A  62      17.901   8.677  -9.227  1.00 24.70           C
ATOM    464  CD2 PHE A  62      19.165   7.010 -10.348  1.00 23.77           C
ATOM    465  CE1 PHE A  62      17.983   7.959  -8.056  1.00 24.41           C
ATOM    466  CE2 PHE A  62      19.254   6.291  -9.167  1.00 21.48           C
ATOM    467  CZ  PHE A  62      18.659   6.767  -8.026  1.00 21.52           C
ATOM    468  N   SER A  63      20.481  10.043 -14.083  1.00 22.72           N
ATOM    469  CA  SER A  63      20.486  10.418 -15.487  1.00 25.11           C
ATOM    470  C   SER A  63      21.071   9.276 -16.298  1.00 28.45           C
ATOM    471  O   SER A  63      21.876   8.480 -15.792  1.00 24.39           O
ATOM    472  CB  SER A  63      21.292  11.711 -15.737  1.00 27.85           C
ATOM    473  OG  SER A  63      22.703  11.522 -15.560  1.00 25.64           O
ATOM    474  N   GLY A  64      20.673   9.221 -17.566  1.00 28.53           N
ATOM    475  CA  GLY A  64      21.169   8.210 -18.479  1.00 26.98           C
ATOM    476  C   GLY A  64      21.640   8.842 -19.770  1.00 29.89           C
ATOM    477  O   GLY A  64      21.197   9.923 -20.154  1.00 32.36           O
ATOM    478  N   SER A  65      22.556   8.146 -20.440  1.00 30.90           N
ATOM    479  CA  SER A  65      23.154   8.628 -21.680  1.00 31.04           C
ATOM    480  C   SER A  65      23.571   7.436 -22.526  1.00 27.69           C
ATOM    481  O   SER A  65      23.725   6.309 -22.033  1.00 25.95           O
ATOM    482  CB  SER A  65      24.382   9.499 -21.418  1.00 28.46           C
ATOM    483  OG  SER A  65      25.442   8.659 -20.955  1.00 27.12           O
ATOM    484  N   GLY A  66      23.701   7.682 -23.817  1.00 24.65           N
ATOM    485  CA  GLY A  66      24.246   6.651 -24.670  1.00 26.97           C
ATOM    486  C   GLY A  66      23.297   6.249 -25.764  1.00 27.37           C
ATOM    487  O   GLY A  66      22.100   6.534 -25.696  1.00 28.53           O
ATOM    488  N   SER A  67      23.827   5.590 -26.786  1.00 25.26           N
ATOM    489  CA  SER A  67      22.997   5.063 -27.851  1.00 29.29           C
ATOM    490  C   SER A  67      23.820   4.025 -28.572  1.00 29.72           C
ATOM    491  O   SER A  67      25.052   4.005 -28.464  1.00 31.89           O
ATOM    492  CB  SER A  67      22.564   6.129 -28.848  1.00 32.70           C
ATOM    493  OG  SER A  67      23.704   6.524 -29.592  1.00 40.52           O
ATOM    494  N   GLY A  68      23.126   3.164 -29.307  1.00 28.05           N
ATOM    495  CA  GLY A  68      23.796   2.108 -30.033  1.00 27.54           C
ATOM    496  C   GLY A  68      24.186   0.950 -29.152  1.00 27.06           C
ATOM    497  O   GLY A  68      23.346   0.104 -28.836  1.00 25.83           O
ATOM    498  N   THR A  69      25.447   0.893 -28.728  1.00 27.48           N
ATOM    499  CA  THR A  69      25.906  -0.249 -27.959  1.00 29.54           C
ATOM    500  C   THR A  69      26.394   0.078 -26.562  1.00 31.18           C
ATOM    501  O   THR A  69      26.458  -0.842 -25.738  1.00 29.17           O
ATOM    502  CB  THR A  69      27.019  -0.999 -28.702  1.00 29.22           C
ATOM    503  CG2 THR A  69      26.493  -1.572 -29.976  1.00 27.80           C
ATOM    504  OG1 THR A  69      28.089  -0.097 -29.004  1.00 38.71           O
ATOM    505  N   ASP A  70      26.729   1.336 -26.262  1.00 29.07           N
ATOM    506  CA  ASP A  70      27.245   1.711 -24.949  1.00 30.96           C
ATOM    507  C   ASP A  70      26.359   2.748 -24.262  1.00 29.58           C
ATOM    508  O   ASP A  70      26.100   3.819 -24.808  1.00 25.51           O
ATOM    509  CB  ASP A  70      28.696   2.196 -25.045  1.00 33.34           C
ATOM    510  CG  ASP A  70      29.625   1.144 -25.666  1.00 37.37           C
ATOM    511  OD2 ASP A  70      30.623   0.781 -25.001  1.00 41.83           O
ATOM    512  OD1 ASP A  70      29.349   0.643 -26.777  1.00 40.42           O
ATOM    513  N   PHE A  71      25.936   2.430 -23.042  1.00 24.53           N
ATOM    514  CA  PHE A  71      25.026   3.242 -22.261  1.00 25.29           C
ATOM    515  C   PHE A  71      25.572   3.403 -20.853  1.00 27.11           C
ATOM    516  O   PHE A  71      26.249   2.513 -20.324  1.00 26.72           O
ATOM    517  CB  PHE A  71      23.638   2.604 -22.216  1.00 24.94           C
ATOM    518  CG  PHE A  71      23.045   2.386 -23.569  1.00 23.47           C
ATOM    519  CD1 PHE A  71      23.338   1.256 -24.309  1.00 25.15           C
ATOM    520  CD2 PHE A  71      22.198   3.339 -24.119  1.00 21.90           C
ATOM    521  CE1 PHE A  71      22.786   1.085 -25.591  1.00 24.69           C
ATOM    522  CE2 PHE A  71      21.658   3.176 -25.375  1.00 22.17           C
ATOM    523  CZ  PHE A  71      21.940   2.051 -26.112  1.00 21.51           C
```

[1854]

```
ATOM    524  N   THR A  72      25.270   4.543 -20.240  1.00 25.82           N
ATOM    525  CA  THR A  72      25.712   4.796 -18.886  1.00 27.64           C
ATOM    526  C   THR A  72      24.578   5.373 -18.058  1.00 26.45           C
ATOM    527  O   THR A  72      23.837   6.260 -18.514  1.00 25.86           O
ATOM    528  CB  THR A  72      26.896   5.761 -18.869  1.00 27.74           C
ATOM    529  CG2 THR A  72      27.998   5.303 -19.802  1.00 25.47           C
ATOM    530  OG1 THR A  72      26.434   7.051 -19.272  1.00 35.38           O
ATOM    531  N   LEU A  73      24.486   4.892 -16.820  1.00 23.20           N
ATOM    532  CA  LEU A  73      23.583   5.431 -15.819  1.00 24.67           C
ATOM    533  C   LEU A  73      24.441   6.132 -14.792  1.00 24.96           C
ATOM    534  O   LEU A  73      25.429   5.565 -14.316  1.00 25.79           O
ATOM    535  CB  LEU A  73      22.747   4.343 -15.132  1.00 24.86           C
ATOM    536  CG  LEU A  73      21.924   4.872 -13.955  1.00 22.07           C
ATOM    537  CD1 LEU A  73      20.727   5.703 -14.439  1.00 22.62           C
ATOM    538  CD2 LEU A  73      21.488   3.767 -13.049  1.00 20.38           C
ATOM    539  N   THR A  74      24.065   7.358 -14.470  1.00 25.67           N
ATOM    540  CA  THR A  74      24.757   8.208 -13.521  1.00 24.44           C
ATOM    541  C   THR A  74      23.825   8.567 -12.370  1.00 24.81           C
ATOM    542  O   THR A  74      22.652   8.892 -12.592  1.00 25.03           O
ATOM    543  CB  THR A  74      25.252   9.483 -14.218  1.00 28.08           C
ATOM    544  CG2 THR A  74      25.810  10.500 -13.219  1.00 29.51           C
ATOM    545  OG1 THR A  74      26.215   9.134 -15.224  1.00 31.17           O
ATOM    546  N   ILE A  75      24.329   8.444 -11.147  1.00 24.58           N
ATOM    547  CA  ILE A  75      23.718   9.052  -9.976  1.00 25.21           C
ATOM    548  C   ILE A  75      24.695  10.140  -9.552  1.00 26.81           C
ATOM    549  O   ILE A  75      25.834   9.843  -9.169  1.00 27.49           O
ATOM    550  CB  ILE A  75      23.457   8.041  -8.852  1.00 24.66           C
ATOM    551  CG1 ILE A  75      22.783   6.787  -9.432  1.00 21.76           C
ATOM    552  CG2 ILE A  75      22.572   8.688  -7.802  1.00 24.14           C
ATOM    553  CD1 ILE A  75      22.674   5.617  -8.490  1.00 19.70           C
ATOM    554  N   SER A  76      24.294  11.402  -9.692  1.00 27.90           N
ATOM    555  CA  SER A  76      25.261  12.484  -9.506  1.00 30.53           C
ATOM    556  C   SER A  76      25.609  12.680  -8.041  1.00 33.29           C
ATOM    557  O   SER A  76      26.738  13.079  -7.723  1.00 34.84           O
ATOM    558  CB  SER A  76      24.731  13.789 -10.096  1.00 26.64           C
ATOM    559  OG  SER A  76      23.540  14.153  -9.430  1.00 29.24           O
ATOM    560  N   SER A  77      24.698  12.342  -7.129  1.00 28.44           N
ATOM    561  CA  SER A  77      25.008  12.505  -5.717  1.00 28.47           C
ATOM    562  C   SER A  77      24.281  11.408  -4.947  1.00 28.05           C
ATOM    563  O   SER A  77      23.124  11.581  -4.554  1.00 27.18           O
ATOM    564  CB  SER A  77      24.618  13.893  -5.235  1.00 32.26           C
ATOM    565  OG  SER A  77      24.946  14.045  -3.865  1.00 38.34           O
ATOM    566  N   LEU A  78      24.993  10.316  -4.684  1.00 25.56           N
ATOM    567  CA  LEU A  78      24.382   9.141  -4.078  1.00 29.10           C
ATOM    568  C   LEU A  78      23.742   9.495  -2.730  1.00 30.14           C
ATOM    569  O   LEU A  78      24.339  10.188  -1.897  1.00 29.13           O
ATOM    570  CB  LEU A  78      25.439   8.047  -3.923  1.00 26.28           C
ATOM    571  CG  LEU A  78      24.984   6.624  -3.614  1.00 26.71           C
ATOM    572  CD1 LEU A  78      24.352   5.991  -4.843  1.00 27.84           C
ATOM    573  CD2 LEU A  78      26.148   5.786  -3.164  1.00 27.25           C
ATOM    574  N   GLN A  79      22.500   9.068  -2.540  1.00 25.89           N
ATOM    575  CA  GLN A  79      21.747   9.329  -1.328  1.00 24.85           C
ATOM    576  C   GLN A  79      21.553   8.039  -0.538  1.00 27.67           C
ATOM    577  O   GLN A  79      21.726   6.943  -1.088  1.00 28.10           O
ATOM    578  CB  GLN A  79      20.386   9.939  -1.675  1.00 26.02           C
ATOM    579  CG  GLN A  79      20.512  11.319  -2.291  1.00 28.96           C
ATOM    580  CD  GLN A  79      21.216  12.305  -1.352  1.00 31.50           C
ATOM    581  NE2 GLN A  79      22.343  12.854  -1.817  1.00 30.38           N
ATOM    582  OE1 GLN A  79      20.778  12.534  -0.210  1.00 27.71           O
ATOM    583  N   PRO A  80      21.221   8.129   0.764  1.00 28.15           N
ATOM    584  CA  PRO A  80      21.075   6.903   1.579  1.00 28.00           C
ATOM    585  C   PRO A  80      20.138   5.881   0.980  1.00 26.47           C
ATOM    586  O   PRO A  80      20.391   4.673   1.076  1.00 30.59           O
ATOM    587  CB  PRO A  80      20.495   7.431   2.903  1.00 26.96           C
ATOM    588  CG  PRO A  80      20.964   8.837   2.997  1.00 27.19           C
ATOM    589  CD  PRO A  80      21.001   9.347   1.562  1.00 28.86           C
ATOM    590  N   GLU A  81      19.066   6.335   0.333  1.00 27.92           N
ATOM    591  CA  GLU A  81      18.065   5.450  -0.253  1.00 25.66           C
```

[1855]

```
ATOM    592  C   GLU A  81      18.486   4.863  -1.589  1.00 25.12           C
ATOM    593  O   GLU A  81      17.713   4.101  -2.176  1.00 27.30           O
ATOM    594  CB  GLU A  81      16.744   6.197  -0.462  1.00 27.85           C
ATOM    595  CG  GLU A  81      16.868   7.331  -1.495  1.00 27.94           C
ATOM    596  CD  GLU A  81      16.885   8.693  -0.876  1.00 30.80           C
ATOM    597  OE1 GLU A  81      16.154   9.560  -1.392  1.00 34.78           O
ATOM    598  OE2 GLU A  81      17.635   8.917   0.105  1.00 31.77           O
ATOM    599  N   ASP A  82      19.659   5.196  -2.115  1.00 26.11           N
ATOM    600  CA  ASP A  82      20.023   4.732  -3.444  1.00 22.94           C
ATOM    601  C   ASP A  82      20.844   3.462  -3.398  1.00 24.84           C
ATOM    602  O   ASP A  82      21.185   2.916  -4.454  1.00 24.17           O
ATOM    603  CB  ASP A  82      20.797   5.817  -4.221  1.00 24.24           C
ATOM    604  CG  ASP A  82      19.971   7.096  -4.458  1.00 25.78           C
ATOM    605  OD1 ASP A  82      18.716   7.076  -4.395  1.00 27.59           O
ATOM    606  OD2 ASP A  82      20.566   8.144  -4.763  1.00 27.05           O
ATOM    607  N   PHE A  83      21.164   2.965  -2.212  1.00 25.98           N
ATOM    608  CA  PHE A  83      21.910   1.720  -2.126  1.00 23.74           C
ATOM    609  C   PHE A  83      20.986   0.576  -2.535  1.00 23.25           C
ATOM    610  O   PHE A  83      19.909   0.409  -1.963  1.00 23.34           O
ATOM    611  CB  PHE A  83      22.476   1.557  -0.713  1.00 27.33           C
ATOM    612  CG  PHE A  83      23.570   2.556  -0.393  1.00 27.21           C
ATOM    613  CD2 PHE A  83      23.299   3.691   0.329  1.00 28.57           C
ATOM    614  CD1 PHE A  83      24.871   2.373  -0.874  1.00 31.57           C
ATOM    615  CE2 PHE A  83      24.317   4.632   0.587  1.00 29.26           C
ATOM    616  CE1 PHE A  83      25.880   3.305  -0.616  1.00 27.41           C
ATOM    617  CZ  PHE A  83      25.605   4.416   0.108  1.00 27.00           C
ATOM    618  N   ALA A  84      21.381  -0.166  -3.563  1.00 18.93           N
ATOM    619  CA  ALA A  84      20.480  -1.039  -4.306  1.00 21.45           C
ATOM    620  C   ALA A  84      21.246  -1.689  -5.454  1.00 22.43           C
ATOM    621  O   ALA A  84      22.423  -1.369  -5.657  1.00 24.06           O
ATOM    622  CB  ALA A  84      19.303  -0.235  -4.858  1.00 21.90           C
ATOM    623  N   THR A  85      20.613  -2.580  -6.217  1.00 22.78           N
ATOM    624  CA  THR A  85      21.193  -3.126  -7.441  1.00 21.44           C
ATOM    625  C   THR A  85      20.502  -2.507  -8.647  1.00 23.18           C
ATOM    626  O   THR A  85      19.300  -2.226  -8.605  1.00 24.18           O
ATOM    627  CB  THR A  85      21.102  -4.656  -7.490  1.00 23.94           C
ATOM    628  CG2 THR A  85      21.638  -5.211  -8.805  1.00 20.20           C
ATOM    629  OG1 THR A  85      21.831  -5.215  -6.386  1.00 22.13           O
ATOM    630  N   TYR A  86      21.279  -2.210  -9.688  1.00 20.39           N
ATOM    631  CA  TYR A  86      20.798  -1.504 -10.867  1.00 20.79           C
ATOM    632  C   TYR A  86      20.976  -2.387 -12.082  1.00 20.50           C
ATOM    633  O   TYR A  86      22.049  -2.990 -12.265  1.00 20.63           O
ATOM    634  CB  TYR A  86      21.533  -0.169 -11.031  1.00 17.09           C
ATOM    635  CG  TYR A  86      21.191   0.757  -9.915  1.00 18.73           C
ATOM    636  CD1 TYR A  86      21.873   0.708  -8.704  1.00 18.15           C
ATOM    637  CD2 TYR A  86      20.157   1.662 -10.051  1.00 19.17           C
ATOM    638  CE1 TYR A  86      21.529   1.528  -7.650  1.00 18.24           C
ATOM    639  CE2 TYR A  86      19.806   2.488  -9.022  1.00 20.27           C
ATOM    640  CZ  TYR A  86      20.495   2.432  -7.830  1.00 19.98           C
ATOM    641  OH  TYR A  86      20.110   3.264  -6.821  1.00 22.46           O
ATOM    642  N   TYR A  87      19.913  -2.496 -12.890  1.00 21.00           N
ATOM    643  CA  TYR A  87      19.883  -3.332 -14.082  1.00 20.80           C
ATOM    644  C   TYR A  87      19.540  -2.500 -15.301  1.00 19.86           C
ATOM    645  O   TYR A  87      18.659  -1.633 -15.241  1.00 21.37           O
ATOM    646  CB  TYR A  87      18.833  -4.427 -13.988  1.00 20.13           C
ATOM    647  CG  TYR A  87      19.024  -5.429 -12.927  1.00 20.28           C
ATOM    648  CD1 TYR A  87      18.587  -5.176 -11.646  1.00 21.47           C
ATOM    649  CD2 TYR A  87      19.590  -6.659 -13.206  1.00 19.40           C
ATOM    650  CE1 TYR A  87      18.738  -6.112 -10.648  1.00 22.51           C
ATOM    651  CE2 TYR A  87      19.750  -7.602 -12.217  1.00 19.58           C
ATOM    652  CZ  TYR A  87      19.314  -7.326 -10.944  1.00 18.47           C
ATOM    653  OH  TYR A  87      19.438  -8.220  -9.912  1.00 23.86           O
ATOM    654  N   CYS A  88      20.217  -2.765 -16.404  1.00 20.69           N
ATOM    655  CA  CYS A  88      19.773  -2.268 -17.694  1.00 21.55           C
ATOM    656  C   CYS A  88      19.025  -3.374 -18.416  1.00 21.60           C
ATOM    657  O   CYS A  88      19.169  -4.559 -18.109  1.00 24.61           O
ATOM    658  CB  CYS A  88      20.944  -1.787 -18.548  1.00 21.38           C
ATOM    659  SG  CYS A  88      22.186  -3.036 -18.914  1.00 25.60           S
```

[1856]

```
ATOM    660  N   GLN A  89      18.197  -2.975 -19.369  1.00 20.50           N
ATOM    661  CA  GLN A  89      17.455  -3.945 -20.156  1.00 21.68           C
ATOM    662  C   GLN A  89      17.229  -3.417 -21.561  1.00 20.79           C
ATOM    663  O   GLN A  89      16.861  -2.250 -21.736  1.00 22.23           O
ATOM    664  CB  GLN A  89      16.124  -4.257 -19.499  1.00 23.62           C
ATOM    665  CG  GLN A  89      15.305  -5.199 -20.324  1.00 24.92           C
ATOM    666  CD  GLN A  89      13.845  -4.809 -20.361  1.00 27.96           C
ATOM    667  NE2 GLN A  89      12.989  -5.815 -20.606  1.00 30.74           N
ATOM    668  OE1 GLN A  89      13.477  -3.624 -20.193  1.00 28.22           O
ATOM    669  N   GLN A  90      17.496  -4.248 -22.558  1.00 22.37           N
ATOM    670  CA  GLN A  90      17.223  -3.867 -23.938  1.00 22.47           C
ATOM    671  C   GLN A  90      15.811  -4.286 -24.314  1.00 21.69           C
ATOM    672  O   GLN A  90      15.351  -5.365 -23.927  1.00 23.45           O
ATOM    673  CB  GLN A  90      18.231  -4.497 -24.897  1.00 22.86           C
ATOM    674  CG  GLN A  90      18.190  -6.010 -25.012  1.00 24.11           C
ATOM    675  CD  GLN A  90      17.279  -6.502 -26.141  1.00 23.23           C
ATOM    676  NE2 GLN A  90      17.090  -7.810 -26.228  1.00 24.05           N
ATOM    677  OE1 GLN A  90      16.795  -5.716 -26.947  1.00 25.51           O
ATOM    678  N   SER A  91      15.119  -3.414 -25.040  1.00 20.76           N
ATOM    679  CA  SER A  91      13.782  -3.702 -25.534  1.00 20.22           C
ATOM    680  C   SER A  91      13.745  -3.603 -27.043  1.00 22.60           C
ATOM    681  O   SER A  91      12.700  -3.349 -27.646  1.00 21.98           O
ATOM    682  CB  SER A  91      12.752  -2.781 -24.884  1.00 25.34           C
ATOM    683  OG  SER A  91      13.073  -1.421 -25.100  1.00 25.94           O
ATOM    684  N   TYR A  92      14.896  -3.853 -27.663  1.00 26.10           N
ATOM    685  CA  TYR A  92      15.098  -3.706 -29.097  1.00 26.14           C
ATOM    686  C   TYR A  92      14.689  -4.942 -29.866  1.00 22.85           C
ATOM    687  O   TYR A  92      14.137  -4.828 -30.964  1.00 22.84           O
ATOM    688  CB  TYR A  92      16.572  -3.415 -29.387  1.00 25.29           C
ATOM    689  CG  TYR A  92      16.904  -3.201 -30.845  1.00 25.05           C
ATOM    690  CD1 TYR A  92      16.733  -1.958 -31.435  1.00 23.33           C
ATOM    691  CD2 TYR A  92      17.415  -4.228 -31.619  1.00 25.40           C
ATOM    692  CE1 TYR A  92      17.058  -1.736 -32.754  1.00 25.50           C
ATOM    693  CE2 TYR A  92      17.729  -4.022 -32.954  1.00 26.97           C
ATOM    694  CZ  TYR A  92      17.547  -2.776 -33.508  1.00 26.17           C
ATOM    695  OH  TYR A  92      17.869  -2.545 -34.821  1.00 28.50           O
ATOM    696  N   SER A  93      14.987  -6.115 -29.325  1.00 24.06           N
ATOM    697  CA  SER A  93      14.761  -7.375 -30.016  1.00 25.77           C
ATOM    698  C   SER A  93      14.452  -8.451 -28.992  1.00 27.75           C
ATOM    699  O   SER A  93      15.110  -8.501 -27.947  1.00 27.17           O
ATOM    700  CB  SER A  93      15.982  -7.773 -30.838  1.00 25.31           C
ATOM    701  OG  SER A  93      15.967  -9.159 -31.069  1.00 30.02           O
ATOM    702  N   THR A  94      13.426  -9.266 -29.257  1.00 27.01           N
ATOM    703  CA  THR A  94      13.120 -10.414 -28.393  1.00 28.94           C
ATOM    704  C   THR A  94      14.094 -11.552 -28.681  1.00 28.64           C
ATOM    705  O   THR A  94      14.459 -11.762 -29.825  1.00 28.93           O
ATOM    706  CB  THR A  94      11.737 -10.918 -28.605  1.00 25.73           C
ATOM    707  CG2 THR A  94      10.752  -9.808 -28.291  1.00 29.89           C
ATOM    708  OG1 THR A  94      11.622 -11.241 -29.974  1.00 31.80           O
ATOM    709  N   PRO A  95      14.516 -12.286 -27.648  1.00 26.33           N
ATOM    710  CA  PRO A  95      14.136 -12.120 -26.245  1.00 29.52           C
ATOM    711  C   PRO A  95      14.673 -10.844 -25.615  1.00 28.24           C
ATOM    712  O   PRO A  95      15.821 -10.451 -25.867  1.00 29.97           O
ATOM    713  CB  PRO A  95      14.758 -13.334 -25.564  1.00 26.15           C
ATOM    714  CG  PRO A  95      15.833 -13.764 -26.430  1.00 34.13           C
ATOM    715  CD  PRO A  95      15.531 -13.332 -27.825  1.00 32.68           C
ATOM    716  N   LEU A  96      13.837 -10.172 -24.833  1.00 25.12           N
ATOM    717  CA  LEU A  96      14.316  -8.994 -24.145  1.00 24.85           C
ATOM    718  C   LEU A  96      15.325  -9.475 -23.122  1.00 27.64           C
ATOM    719  O   LEU A  96      15.166 -10.567 -22.560  1.00 31.02           O
ATOM    720  CB  LEU A  96      13.175  -8.213 -23.504  1.00 24.42           C
ATOM    721  CG  LEU A  96      12.138  -7.676 -24.504  1.00 24.80           C
ATOM    722  CD1 LEU A  96      12.762  -7.177 -25.802  1.00 24.69           C
ATOM    723  CD2 LEU A  96      11.041  -8.645 -24.779  1.00 27.55           C
ATOM    724  N   THR A  97      16.463  -8.798 -23.039  1.00 23.93           N
ATOM    725  CA  THR A  97      17.509  -9.283 -22.159  1.00 26.27           C
ATOM    726  C   THR A  97      17.906  -8.192 -21.183  1.00 24.66           C
ATOM    727  O   THR A  97      17.950  -7.020 -21.543  1.00 21.76           O
```

[1857]

```
ATOM    728  CB  THR A  97      18.700  -9.757 -22.948  1.00 25.20           C
ATOM    729  CG2 THR A  97      18.349 -11.046 -23.660  1.00 27.56           C
ATOM    730  OG1 THR A  97      19.002  -8.775 -23.934  1.00 28.06           O
ATOM    731  N   PHE A  98      18.189  -8.604 -19.951  1.00 22.69           N
ATOM    732  CA  PHE A  98      18.679  -7.765 -18.871  1.00 23.48           C
ATOM    733  C   PHE A  98      20.190  -7.896 -18.790  1.00 24.00           C
ATOM    734  O   PHE A  98      20.749  -8.956 -19.087  1.00 23.29           O
ATOM    735  CB  PHE A  98      18.105  -8.182 -17.513  1.00 20.32           C
ATOM    736  CG  PHE A  98      16.681  -7.802 -17.285  1.00 20.24           C
ATOM    737  CD2 PHE A  98      15.657  -8.718 -17.520  1.00 22.41           C
ATOM    738  CD1 PHE A  98      16.356  -6.560 -16.799  1.00 22.90           C
ATOM    739  CE2 PHE A  98      14.323  -8.387 -17.288  1.00 19.48           C
ATOM    740  CE1 PHE A  98      15.014  -6.219 -16.560  1.00 22.17           C
ATOM    741  CZ  PHE A  98      14.006  -7.140 -16.819  1.00 18.38           C
ATOM    742  N   GLY A  99      20.840  -6.829 -18.339  1.00 22.34           N
ATOM    743  CA  GLY A  99      22.194  -6.955 -17.861  1.00 23.81           C
ATOM    744  C   GLY A  99      22.234  -7.722 -16.558  1.00 24.14           C
ATOM    745  O   GLY A  99      21.213  -7.972 -15.920  1.00 24.54           O
ATOM    746  N   GLN A 100      23.445  -8.085 -16.129  1.00 23.96           N
ATOM    747  CA  GLN A 100      23.543  -8.932 -14.951  1.00 26.79           C
ATOM    748  C   GLN A 100      23.349  -8.159 -13.655  1.00 26.16           C
ATOM    749  O   GLN A 100      23.211  -8.784 -12.593  1.00 27.02           O
ATOM    750  CB  GLN A 100      24.887  -9.684 -14.941  1.00 29.18           C
ATOM    751  CG  GLN A 100      26.074  -8.875 -14.410  1.00 28.99           C
ATOM    752  CD  GLN A 100      26.747  -8.000 -15.465  1.00 33.91           C
ATOM    753  NE2 GLN A 100      27.892  -7.432 -15.089  1.00 35.53           N
ATOM    754  OE1 GLN A 100      26.229  -7.791 -16.583  1.00 31.83           O
ATOM    755  N   GLY A 101      23.303  -6.833 -13.708  1.00 26.68           N
ATOM    756  CA  GLY A 101      23.098  -6.065 -12.498  1.00 22.54           C
ATOM    757  C   GLY A 101      24.405  -5.577 -11.897  1.00 27.08           C
ATOM    758  O   GLY A 101      25.460  -6.214 -12.020  1.00 27.22           O
ATOM    759  N   THR A 102      24.339  -4.399 -11.279  1.00 24.58           N
ATOM    760  CA  THR A 102      25.437  -3.761 -10.555  1.00 25.44           C
ATOM    761  C   THR A 102      24.942  -3.419  -9.160  1.00 22.16           C
ATOM    762  O   THR A 102      24.055  -2.574  -9.001  1.00 23.44           O
ATOM    763  CB  THR A 102      25.916  -2.488 -11.268  1.00 23.70           C
ATOM    764  CG2 THR A 102      26.879  -1.690 -10.409  1.00 25.69           C
ATOM    765  OG1 THR A 102      26.523  -2.821 -12.515  1.00 26.68           O
ATOM    766  N   LYS A 103      25.528  -4.038  -8.149  1.00 24.89           N
ATOM    767  CA  LYS A 103      25.140  -3.760  -6.775  1.00 25.22           C
ATOM    768  C   LYS A 103      25.937  -2.571  -6.276  1.00 23.07           C
ATOM    769  O   LYS A 103      27.165  -2.591  -6.325  1.00 26.36           O
ATOM    770  CB  LYS A 103      25.391  -4.970  -5.881  1.00 22.82           C
ATOM    771  CG  LYS A 103      24.976  -4.771  -4.448  1.00 26.27           C
ATOM    772  CD  LYS A 103      25.219  -6.056  -3.661  1.00 28.32           C
ATOM    773  CE  LYS A 103      24.449  -6.062  -2.361  1.00 32.40           C
ATOM    774  NZ  LYS A 103      24.966  -7.160  -1.497  1.00 38.75           N
ATOM    775  N   VAL A 104      25.246  -1.544  -5.806  1.00 23.83           N
ATOM    776  CA  VAL A 104      25.871  -0.381  -5.187  1.00 24.59           C
ATOM    777  C   VAL A 104      25.769  -0.507  -3.667  1.00 27.54           C
ATOM    778  O   VAL A 104      24.679  -0.360  -3.095  1.00 25.57           O
ATOM    779  CB  VAL A 104      25.228   0.911  -5.681  1.00 22.00           C
ATOM    780  CG1 VAL A 104      25.784   2.085  -4.907  1.00 23.96           C
ATOM    781  CG2 VAL A 104      25.474   1.050  -7.187  1.00 23.16           C
ATOM    782  N   GLU A 105      26.912  -0.720  -2.996  1.00 27.80           N
ATOM    783  CA  GLU A 105      26.964  -1.031  -1.566  1.00 29.65           C
ATOM    784  C   GLU A 105      27.426   0.166  -0.737  1.00 33.17           C
ATOM    785  O   GLU A 105      27.877   1.186  -1.268  1.00 33.11           O
ATOM    786  CB  GLU A 105      27.867  -2.228  -1.329  1.00 27.09           C
ATOM    787  CG  GLU A 105      27.676  -3.282  -2.348  1.00 30.47           C
ATOM    788  CD  GLU A 105      28.568  -4.465  -2.108  1.00 37.92           C
ATOM    789  OE1 GLU A 105      28.225  -5.268  -1.211  1.00 45.22           O
ATOM    790  OE2 GLU A 105      29.613  -4.587  -2.806  1.00 38.57           O
ATOM    791  N   ILE A 106      27.275   0.049   0.649  1.00 34.52           N
ATOM    792  CA  ILE A 106      27.646   1.152   1.537  1.00 35.43           C
ATOM    793  C   ILE A 106      29.133   0.884   1.865  1.00 36.82           C
ATOM    794  O   ILE A 106      29.576  -0.287   1.889  1.00 35.18           O
[1858]
ATOM    795  CB  ILE A 106      26.855   1.231   2.878  1.00 34.30           C
```

```
ATOM    796  CG1 ILE A 106      25.335   1.539   2.814  1.00 34.60           C
ATOM    797  CG2 ILE A 106      27.068   2.608   3.550  1.00 34.13           C
ATOM    798  CD1 ILE A 106      24.466   0.562   3.725  1.00 34.92           C
ATOM    799  N   LYS A 107      29.900   1.950   2.124  1.00 38.73           N
ATOM    800  CA  LYS A 107      31.236   1.974   2.754  1.00 42.40           C
ATOM    801  C   LYS A 107      32.156   2.966   2.027  1.00 42.02           C
ATOM    802  O   LYS A 107      32.262   2.976   0.795  1.00 40.72           O
ATOM    803  CB  LYS A 107      31.936   0.598   2.787  1.00 37.99           C
ATOM    804  CG  LYS A 107      33.121   0.462   3.763  1.00 37.73           C
ATOM    805  CD  LYS A 107      32.712   0.428   5.248  1.00 40.82           C
ATOM    806  CE  LYS A 107      33.697   1.211   6.098  1.00 36.65           C
ATOM    807  NZ  LYS A 107      33.748   2.645   5.707  1.00 33.92           N
ATOM    808  O   GLY A 111      26.838   7.398   6.160  1.00 37.84           O
ATOM    809  N   GLY A 111      28.686   4.648   6.833  1.00 32.13           N
ATOM    810  CA  GLY A 111      28.042   5.788   7.457  1.00 28.49           C
ATOM    811  C   GLY A 111      26.820   6.287   6.701  1.00 33.87           C
ATOM    812  O   SER A 112      23.427   4.115   6.977  1.00 27.57           O
ATOM    813  N   SER A 112      25.720   5.532   6.727  1.00 32.27           N
ATOM    814  CA  SER A 112      24.566   5.917   5.917  1.00 29.89           C
ATOM    815  C   SER A 112      23.327   5.212   6.435  1.00 28.10           C
ATOM    816  CB  SER A 112      24.792   5.532   4.458  1.00 28.90           C
ATOM    817  OG  SER A 112      23.556   5.442   3.785  1.00 33.91           O
ATOM    818  O   GLY A 113      19.300   6.781   5.966  1.00 26.94           O
ATOM    819  N   GLY A 113      22.158   5.831   6.239  1.00 23.87           N
ATOM    820  CA  GLY A 113      20.932   5.198   6.690  1.00 24.99           C
ATOM    821  C   GLY A 113      19.660   5.600   5.966  1.00 27.79           C
ATOM    822  O   GLY A 114      16.562   3.900   6.583  1.00 26.85           O
ATOM    823  N   GLY A 114      18.929   4.629   5.415  1.00 29.60           N
ATOM    824  CA  GLY A 114      17.645   4.911   4.753  1.00 27.85           C
ATOM    825  C   GLY A 114      16.423   4.550   5.572  1.00 26.63           C
ATOM    826  O   SER A 115      12.387   2.924   5.978  1.00 28.73           O
ATOM    827  N   SER A 115      15.247   4.940   5.109  1.00 28.47           N
ATOM    828  CA  SER A 115      13.980   4.672   5.818  1.00 26.43           C
ATOM    829  C   SER A 115      13.461   3.266   5.492  1.00 30.59           C
ATOM    830  CB  SER A 115      12.980   5.726   5.430  1.00 28.67           C
ATOM    831  OG  SER A 115      12.702   5.677   4.042  1.00 31.96           O
ATOM    832  O   GLY A 116      13.310   2.129   2.138  1.00 38.15           O
ATOM    833  N   GLY A 116      14.204   2.506   4.693  1.00 34.28           N
ATOM    834  CA  GLY A 116      13.735   1.184   4.239  1.00 29.21           C
ATOM    835  C   GLY A 116      12.877   1.400   3.027  1.00 34.66           C
ATOM    836  O   GLY A 117      12.071   0.342   0.053  1.00 33.99           O
ATOM    837  N   GLY A 117      11.698   0.818   2.982  1.00 33.23           N
ATOM    838  CA  GLY A 117      10.783   1.133   1.882  1.00 31.23           C
ATOM    839  C   GLY A 117      10.983   0.315   0.629  1.00 31.04           C
ATOM    840  O   CYS A 118       8.180   0.368  -1.443  1.00 25.43           O
ATOM    841  N   CYS A 118       9.966  -0.438   0.262  1.00 27.72           N
ATOM    842  CA  CYS A 118      10.005  -1.103  -1.052  1.00 26.16           C
ATOM    843  C   CYS A 118       9.097  -0.263  -1.973  1.00 24.92           C
ATOM    844  CB  CYS A 118       9.553  -2.558  -1.036  1.00 24.71           C
ATOM    845  SG  CYS A 118      10.828  -3.748  -0.544  1.00 30.74           S
ATOM    846  O   PRO A 119       6.777  -1.266  -3.854  1.00 25.48           O
ATOM    847  N   PRO A 119       9.295  -0.198  -3.316  1.00 24.17           N
ATOM    848  CA  PRO A 119       8.344   0.530  -4.163  1.00 29.41           C
ATOM    849  C   PRO A 119       6.963  -0.052  -4.071  1.00 27.99           C
ATOM    850  CB  PRO A 119       8.951   0.353  -5.566  1.00 27.00           C
ATOM    851  CG  PRO A 119      10.374  -0.062  -5.369  1.00 25.71           C
ATOM    852  CD  PRO A 119      10.418  -0.808  -4.060  1.00 23.80           C
ATOM    853  O   PRO A 120       4.844  -0.737  -6.374  1.00 37.51           O
ATOM    854  N   PRO A 120       5.922   0.768  -4.220  1.00 29.05           N
ATOM    855  CA  PRO A 120       4.538   0.222  -4.203  1.00 30.08           C
ATOM    856  C   PRO A 120       4.372  -0.886  -5.247  1.00 31.10           C
ATOM    857  CB  PRO A 120       3.671   1.437  -4.520  1.00 35.38           C
ATOM    858  CG  PRO A 120       4.517   2.632  -4.183  1.00 31.15           C
ATOM    859  CD  PRO A 120       5.933   2.216  -4.456  1.00 31.04           C
ATOM    860  O   CYS A 121       1.625  -3.645  -4.428  1.00 37.10           O
ATOM    861  N   CYS A 121       3.727  -1.975  -4.869  1.00 31.03           N
ATOM    862  CA  CYS A 121       3.501  -3.032  -5.808  1.00 30.20           C
ATOM    863  C   CYS A 121       2.204  -3.762  -5.498  1.00 31.40           C
```

[1859]

```
ATOM    864  CB  CYS A 121       4.663  -4.047  -5.840  1.00 28.60           C
ATOM    865  SG  CYS A 121       4.955  -4.782  -4.216  1.00 29.19           S
ATOM    866  O   GLY A 122      -0.718  -3.514  -6.770  1.00 44.17           O
ATOM    867  N   GLY A 122       1.761  -4.574  -6.442  1.00 29.89           N
ATOM    868  CA  GLY A 122       0.570  -5.375  -6.172  1.00 32.03           C
ATOM    869  C   GLY A 122      -0.672  -4.534  -6.089  1.00 40.46           C
ATOM    870  O   GLY A 123      -3.673  -2.493  -3.704  1.00 54.21           O
ATOM    871  N   GLY A 123      -1.645  -4.969  -5.289  1.00 42.16           N
ATOM    872  CA  GLY A 123      -2.890  -4.214  -5.106  1.00 44.49           C
ATOM    873  C   GLY A 123      -2.749  -3.292  -3.931  1.00 48.30           C
ATOM    874  O   SER A 124       0.022  -0.731  -1.440  1.00 53.80           O
ATOM    875  N   SER A 124      -1.614  -3.370  -3.246  1.00 50.29           N
ATOM    876  CA  SER A 124      -1.363  -2.568  -2.022  1.00 49.27           C
ATOM    877  C   SER A 124      -0.562  -1.317  -2.363  1.00 52.22           C
ATOM    878  CB  SER A 124      -0.652  -3.376  -1.009  1.00 44.52           C
ATOM    879  O   GLY A 125      -1.813   1.449  -3.470  1.00 52.84           O
ATOM    880  N   GLY A 125      -0.468  -0.979  -3.638  1.00 42.57           N
ATOM    881  CA  GLY A 125       0.173   0.284  -4.029  1.00 44.41           C
ATOM    882  C   GLY A 125      -0.882   1.348  -4.281  1.00 50.35           C
ATOM    883  O   GLY A 126      -1.117   2.920  -7.905  1.00 49.39           O
ATOM    884  N   GLY A 126      -0.729   2.133  -5.345  1.00 46.96           N
ATOM    885  CA  GLY A 126      -1.670   3.230  -5.633  1.00 41.77           C
ATOM    886  C   GLY A 126      -1.972   3.342  -7.109  1.00 47.52           C
ATOM    887  N   GLU A 127      -3.139   3.881  -7.462  1.00 45.21           N
ATOM    888  CA  GLU A 127      -3.544   3.919  -8.891  1.00 43.89           C
ATOM    889  C   GLU A 127      -3.542   2.484  -9.434  1.00 40.50           C
ATOM    890  O   GLU A 127      -4.518   1.765  -9.189  1.00 38.12           O
ATOM    891  CB  GLU A 127      -2.712   4.916  -9.699  1.00 38.98           C
ATOM    892  N   VAL A 128      -2.519   2.137 -10.205  1.00 36.09           N
ATOM    893  CA  VAL A 128      -2.403   0.779 -10.805  1.00 30.91           C
ATOM    894  C   VAL A 128      -2.229  -0.302  -9.731  1.00 32.61           C
ATOM    895  O   VAL A 128      -1.512  -0.055  -8.765  1.00 30.39           O
ATOM    896  CB  VAL A 128      -1.273   0.746 -11.849  1.00 29.55           C
ATOM    897  CG1 VAL A 128      -0.973  -0.659 -12.339  1.00 31.00           C
ATOM    898  CG2 VAL A 128      -1.584   1.659 -13.022  1.00 28.83           C
ATOM    899  N   GLN A 129      -2.892  -1.447  -9.919  1.00 30.59           N
ATOM    900  CA  GLN A 129      -2.756  -2.599  -9.001  1.00 29.96           C
ATOM    901  C   GLN A 129      -2.508  -3.883  -9.808  1.00 26.80           C
ATOM    902  O   GLN A 129      -3.253  -4.100 -10.755  1.00 28.21           O
ATOM    903  CB  GLN A 129      -4.023  -2.708  -8.164  1.00 30.67           C
ATOM    904  N   LEU A 130      -1.511  -4.686  -9.427  1.00 25.21           N
ATOM    905  CA  LEU A 130      -1.235  -6.003 -10.072  1.00 27.86           C
ATOM    906  C   LEU A 130      -1.120  -7.068  -8.968  1.00 26.03           C
ATOM    907  O   LEU A 130      -0.053  -7.172  -8.391  1.00 25.98           O
ATOM    908  CB  LEU A 130       0.070  -5.919 -10.856  1.00 23.31           C
ATOM    909  CG  LEU A 130       0.075  -5.086 -12.136  1.00 23.16           C
ATOM    910  CD1 LEU A 130       1.435  -5.161 -12.805  1.00 20.90           C
ATOM    911  CD2 LEU A 130      -1.004  -5.550 -13.093  1.00 23.64           C
ATOM    912  N   LEU A 131      -2.157  -7.870  -8.743  1.00 23.72           N
ATOM    913  CA  LEU A 131      -2.145  -8.803  -7.623  1.00 27.34           C
ATOM    914  C   LEU A 131      -1.734 -10.179  -8.091  1.00 23.90           C
ATOM    915  O   LEU A 131      -2.453 -10.807  -8.874  1.00 26.88           O
ATOM    916  CB  LEU A 131      -3.521  -8.928  -6.977  1.00 30.61           C
ATOM    917  CG  LEU A 131      -4.215  -7.897  -6.124  1.00 31.45           C
ATOM    918  CD1 LEU A 131      -5.699  -8.123  -6.240  1.00 33.97           C
ATOM    919  CD2 LEU A 131      -3.780  -8.274  -4.788  1.00 29.05           C
ATOM    920  N   GLU A 132      -0.651 -10.700  -7.529  1.00 23.39           N
ATOM    921  CA  GLU A 132      -0.179 -11.990  -7.994  1.00 21.72           C
ATOM    922  C   GLU A 132      -0.676 -13.108  -7.111  1.00 23.89           C
ATOM    923  O   GLU A 132      -1.040 -12.906  -5.955  1.00 24.70           O
ATOM    924  CB  GLU A 132       1.351 -12.040  -8.070  1.00 22.73           C
ATOM    925  CG  GLU A 132       1.922 -11.090  -9.067  1.00 23.58           C
ATOM    926  CD  GLU A 132       3.406 -11.299  -9.306  1.00 23.86           C
ATOM    927  OE1 GLU A 132       4.171 -10.330  -9.147  1.00 24.46           O
ATOM    928  OE2 GLU A 132       3.807 -12.428  -9.679  1.00 22.00           O
ATOM    929  N   SER A 133      -0.677 -14.311  -7.676  1.00 24.48           N
ATOM    930  CA  SER A 133      -1.046 -15.485  -6.906  1.00 23.80           C
[1860] ATOM    931  C   SER A 133      -0.737 -16.714  -7.732  1.00 24.54           C
```

```
ATOM    932  O   SER A 133      -0.656 -16.642  -8.957  1.00 24.64           O
ATOM    933  CB  SER A 133      -2.527 -15.470  -6.518  1.00 24.73           C
ATOM    934  OG  SER A 133      -3.306 -15.617  -7.667  1.00 25.31           O
ATOM    935  N   GLY A 134      -0.529 -17.829  -7.046  1.00 28.41           N
ATOM    936  CA  GLY A 134      -0.315 -19.110  -7.686  1.00 26.06           C
ATOM    937  C   GLY A 134       1.011 -19.765  -7.382  1.00 27.42           C
ATOM    938  O   GLY A 134       1.166 -20.965  -7.683  1.00 34.53           O
ATOM    939  N   GLY A 135       1.963 -19.074  -6.756  1.00 25.96           N
ATOM    940  CA  GLY A 135       3.255 -19.688  -6.506  1.00 27.35           C
ATOM    941  C   GLY A 135       3.200 -20.886  -5.573  1.00 29.83           C
ATOM    942  O   GLY A 135       2.123 -21.291  -5.138  1.00 34.46           O
ATOM    943  N   GLY A 136       4.338 -21.495  -5.298  1.00 28.66           N
ATOM    944  CA  GLY A 136       4.383 -22.598  -4.364  1.00 25.06           C
ATOM    945  C   GLY A 136       5.445 -23.607  -4.749  1.00 26.81           C
ATOM    946  O   GLY A 136       6.282 -23.360  -5.614  1.00 26.22           O
ATOM    947  N   LEU A 137       5.398 -24.747  -4.066  1.00 28.37           N
ATOM    948  CA  LEU A 137       6.350 -25.837  -4.249  1.00 25.64           C
ATOM    949  C   LEU A 137       5.814 -26.873  -5.236  1.00 31.87           C
ATOM    950  O   LEU A 137       4.640 -27.245  -5.182  1.00 34.42           O
ATOM    951  CB  LEU A 137       6.620 -26.465  -2.881  1.00 26.63           C
ATOM    952  CG  LEU A 137       7.636 -27.580  -2.729  1.00 31.45           C
ATOM    953  CD1 LEU A 137       8.969 -27.145  -3.310  1.00 31.25           C
ATOM    954  CD2 LEU A 137       7.747 -27.945  -1.262  1.00 29.92           C
ATOM    955  N   VAL A 138       6.678 -27.349  -6.137  1.00 32.14           N
ATOM    956  CA  VAL A 138       6.309 -28.389  -7.094  1.00 27.24           C
ATOM    957  C   VAL A 138       7.534 -29.258  -7.319  1.00 29.32           C
ATOM    958  O   VAL A 138       8.672 -28.810  -7.139  1.00 33.35           O
ATOM    959  CB  VAL A 138       5.810 -27.807  -8.431  1.00 29.43           C
ATOM    960  CG1 VAL A 138       4.449 -27.156  -8.258  1.00 30.94           C
ATOM    961  CG2 VAL A 138       6.813 -26.829  -8.983  1.00 31.80           C
ATOM    962  N   GLN A 139       7.317 -30.491  -7.644  1.00 33.89           N
ATOM    963  CA  GLN A 139       8.483 -31.329  -7.909  1.00 35.27           C
ATOM    964  C   GLN A 139       8.860 -31.281  -9.382  1.00 32.00           C
ATOM    965  O   GLN A 139       8.025 -30.972 -10.240  1.00 31.44           O
ATOM    966  CB  GLN A 139       8.207 -32.754  -7.473  1.00 37.12           C
ATOM    967  CG  GLN A 139       7.717 -32.784  -6.081  1.00 34.78           C
ATOM    968  CD  GLN A 139       6.412 -33.472  -6.023  1.00 43.88           C
ATOM    969  NE2 GLN A 139       5.383 -32.765  -5.552  1.00 47.62           N
ATOM    970  OE1 GLN A 139       6.300 -34.623  -6.444  1.00 45.69           O
ATOM    971  N   PRO A 140      10.127 -31.564  -9.701  1.00 33.27           N
ATOM    972  CA  PRO A 140      10.583 -31.528 -11.091  1.00 31.43           C
ATOM    973  C   PRO A 140       9.641 -32.314 -11.982  1.00 31.75           C
ATOM    974  O   PRO A 140       9.158 -33.382 -11.611  1.00 34.17           O
ATOM    975  CB  PRO A 140      11.963 -32.186 -11.010  1.00 31.45           C
ATOM    976  CG  PRO A 140      12.429 -31.828  -9.677  1.00 32.16           C
ATOM    977  CD  PRO A 140      11.229 -31.926  -8.792  1.00 33.61           C
ATOM    978  N   GLY A 141       9.277 -31.727 -13.122  1.00 27.04           N
ATOM    979  CA  GLY A 141       8.335 -32.344 -14.018  1.00 28.71           C
ATOM    980  C   GLY A 141       6.966 -31.706 -13.953  1.00 27.05           C
ATOM    981  O   GLY A 141       6.223 -31.755 -14.940  1.00 28.54           O
ATOM    982  N   GLY A 142       6.601 -31.154 -12.799  1.00 27.02           N
ATOM    983  CA  GLY A 142       5.244 -30.710 -12.578  1.00 25.12           C
ATOM    984  C   GLY A 142       4.923 -29.344 -13.149  1.00 23.06           C
ATOM    985  O   GLY A 142       5.621 -28.802 -14.010  1.00 23.64           O
ATOM    986  N   SER A 143       3.845 -28.772 -12.631  1.00 21.31           N
ATOM    987  CA  SER A 143       3.218 -27.654 -13.293  1.00 21.69           C
ATOM    988  C   SER A 143       2.740 -26.653 -12.266  1.00 22.37           C
ATOM    989  O   SER A 143       2.555 -26.973 -11.093  1.00 21.33           O
ATOM    990  CB  SER A 143       2.077 -28.145 -14.188  1.00 20.80           C
ATOM    991  OG  SER A 143       0.910 -28.458 -13.442  1.00 22.03           O
ATOM    992  N   LEU A 144       2.501 -25.432 -12.729  1.00 21.84           N
ATOM    993  CA  LEU A 144       1.997 -24.441 -11.815  1.00 21.89           C
ATOM    994  C   LEU A 144       1.451 -23.322 -12.680  1.00 20.67           C
ATOM    995  O   LEU A 144       1.987 -23.044 -13.756  1.00 19.73           O
ATOM    996  CB  LEU A 144       3.122 -23.973 -10.893  1.00 21.16           C
ATOM    997  CG  LEU A 144       2.757 -23.266  -9.622  1.00 27.31           C
ATOM    998  CD1 LEU A 144       1.923 -24.283  -8.843  1.00 28.41           C
ATOM    999  CD2 LEU A 144       4.045 -22.964  -8.897  1.00 26.81           C
```

[1861]

```
ATOM   1000  N   ARG A 145       0.429 -22.635 -12.178  1.00 23.01           N
ATOM   1001  CA  ARG A 145      -0.204 -21.572 -12.942  1.00 21.63           C
ATOM   1002  C   ARG A 145      -0.186 -20.308 -12.105  1.00 20.78           C
ATOM   1003  O   ARG A 145      -0.705 -20.304 -10.987  1.00 23.40           O
ATOM   1004  CB  ARG A 145      -1.640 -21.924 -13.299  1.00 22.08           C
ATOM   1005  CG  ARG A 145      -2.260 -20.859 -14.171  1.00 22.90           C
ATOM   1006  CD  ARG A 145      -3.741 -20.883 -14.059  1.00 23.47           C
ATOM   1007  NE  ARG A 145      -4.380 -20.332 -15.241  1.00 28.42           N
ATOM   1008  CZ  ARG A 145      -5.684 -20.091 -15.321  1.00 25.27           C
ATOM   1009  NH1 ARG A 145      -6.446 -20.335 -14.266  1.00 28.43           N
ATOM   1010  NH2 ARG A 145      -6.214 -19.610 -16.440  1.00 24.57           N
ATOM   1011  N   LEU A 146       0.470 -19.267 -12.613  1.00 22.70           N
ATOM   1012  CA  LEU A 146       0.497 -17.959 -11.980  1.00 21.27           C
ATOM   1013  C   LEU A 146      -0.578 -17.048 -12.565  1.00 20.86           C
ATOM   1014  O   LEU A 146      -0.830 -17.058 -13.778  1.00 19.29           O
ATOM   1015  CB  LEU A 146       1.873 -17.314 -12.151  1.00 20.42           C
ATOM   1016  CG  LEU A 146       3.032 -18.187 -11.705  1.00 18.77           C
ATOM   1017  CD1 LEU A 146       4.292 -17.449 -12.014  1.00 21.29           C
ATOM   1018  CD2 LEU A 146       2.931 -18.469 -10.217  1.00 24.19           C
ATOM   1019  N   SER A 147      -1.152 -16.211 -11.710  1.00 20.72           N
ATOM   1020  CA  SER A 147      -2.164 -15.243 -12.106  1.00 21.99           C
ATOM   1021  C   SER A 147      -1.764 -13.831 -11.715  1.00 20.68           C
ATOM   1022  O   SER A 147      -1.092 -13.609 -10.706  1.00 20.16           O
ATOM   1023  CB  SER A 147      -3.481 -15.525 -11.406  1.00 22.80           C
ATOM   1024  OG  SER A 147      -3.864 -16.845 -11.647  1.00 32.80           O
ATOM   1025  N   CYS A 148      -2.290 -12.867 -12.452  1.00 19.95           N
ATOM   1026  CA  CYS A 148      -1.975 -11.474 -12.161  1.00 24.32           C
ATOM   1027  C   CYS A 148      -3.231 -10.677 -12.499  1.00 22.14           C
ATOM   1028  O   CYS A 148      -3.524 -10.456 -13.679  1.00 24.43           O
ATOM   1029  CB  CYS A 148      -0.761 -11.031 -12.971  1.00 24.85           C
ATOM   1030  SG  CYS A 148      -0.227  -9.325 -12.846  1.00 32.24           S
ATOM   1031  N   ALA A 149      -3.977 -10.285 -11.464  1.00 23.46           N
ATOM   1032  CA  ALA A 149      -5.226  -9.556 -11.628  1.00 21.02           C
ATOM   1033  C   ALA A 149      -4.919  -8.069 -11.591  1.00 23.99           C
ATOM   1034  O   ALA A 149      -4.353  -7.565 -10.617  1.00 24.46           O
ATOM   1035  CB  ALA A 149      -6.215  -9.921 -10.531  1.00 27.26           C
ATOM   1036  N   ALA A 150      -5.285  -7.371 -12.649  1.00 23.83           N
ATOM   1037  CA  ALA A 150      -4.934  -5.976 -12.840  1.00 22.38           C
ATOM   1038  C   ALA A 150      -6.122  -5.070 -12.550  1.00 24.44           C
ATOM   1039  O   ALA A 150      -7.280  -5.450 -12.756  1.00 25.65           O
ATOM   1040  CB  ALA A 150      -4.469  -5.767 -14.279  1.00 22.27           C
ATOM   1041  N   SER A 151      -5.835  -3.866 -12.056  1.00 25.82           N
ATOM   1042  CA  SER A 151      -6.883  -2.864 -11.956  1.00 25.78           C
ATOM   1043  C   SER A 151      -6.265  -1.476 -11.970  1.00 25.05           C
ATOM   1044  O   SER A 151      -5.074  -1.300 -11.696  1.00 25.74           O
ATOM   1045  CB  SER A 151      -7.748  -3.062 -10.699  1.00 24.51           C
ATOM   1046  OG  SER A 151      -7.020  -2.898  -9.493  1.00 30.28           O
ATOM   1047  N   GLY A 152      -7.102  -0.484 -12.284  1.00 25.21           N
ATOM   1048  CA  GLY A 152      -6.681   0.906 -12.284  1.00 27.94           C
ATOM   1049  C   GLY A 152      -6.216   1.456 -13.611  1.00 27.35           C
ATOM   1050  O   GLY A 152      -5.714   2.587 -13.647  1.00 28.79           O
ATOM   1051  N   PHE A 153      -6.331   0.689 -14.696  1.00 29.85           N
ATOM   1052  CA  PHE A 153      -5.924   1.132 -16.023  1.00 25.47           C
ATOM   1053  C   PHE A 153      -6.697   0.298 -17.027  1.00 21.05           C
ATOM   1054  O   PHE A 153      -7.304  -0.702 -16.656  1.00 23.89           O
ATOM   1055  CB  PHE A 153      -4.406   0.995 -16.206  1.00 24.27           C
ATOM   1056  CG  PHE A 153      -3.894  -0.428 -16.088  1.00 24.60           C
ATOM   1057  CD1 PHE A 153      -3.695  -1.029 -14.856  1.00 23.69           C
ATOM   1058  CD2 PHE A 153      -3.590  -1.144 -17.224  1.00 24.28           C
ATOM   1059  CE1 PHE A 153      -3.213  -2.321 -14.770  1.00 22.64           C
ATOM   1060  CE2 PHE A 153      -3.114  -2.444 -17.153  1.00 22.18           C
ATOM   1061  CZ  PHE A 153      -2.935  -3.028 -15.942  1.00 21.72           C
ATOM   1062  N   THR A 154      -6.714   0.732 -18.289  1.00 21.87           N
ATOM   1063  CA  THR A 154      -7.381  -0.053 -19.330  1.00 25.72           C
ATOM   1064  C   THR A 154      -6.478  -1.210 -19.738  1.00 23.93           C
ATOM   1065  O   THR A 154      -5.606  -1.056 -20.593  1.00 24.86           O
ATOM   1066  CB  THR A 154      -7.728   0.788 -20.551  1.00 26.61           C
ATOM   1067  CG2 THR A 154      -8.606  -0.020 -21.485  1.00 23.89           C
```

[1862]

```
ATOM   1068  OG1 THR A 154      -8.421   1.979 -20.142  1.00 32.44           O
ATOM   1069  N   PHE A 155      -6.723  -2.379 -19.142  1.00 24.34           N
ATOM   1070  CA  PHE A 155      -5.887  -3.564 -19.314  1.00 21.97           C
ATOM   1071  C   PHE A 155      -5.558  -3.847 -20.784  1.00 21.46           C
ATOM   1072  O   PHE A 155      -4.402  -4.119 -21.127  1.00 22.10           O
ATOM   1073  CB  PHE A 155      -6.624  -4.752 -18.688  1.00 20.16           C
ATOM   1074  CG  PHE A 155      -5.814  -6.024 -18.581  1.00 20.19           C
ATOM   1075  CD1 PHE A 155      -4.665  -6.076 -17.818  1.00 19.15           C
ATOM   1076  CD2 PHE A 155      -6.233  -7.177 -19.225  1.00 22.30           C
ATOM   1077  CE1 PHE A 155      -3.944  -7.266 -17.718  1.00 20.60           C
ATOM   1078  CE2 PHE A 155      -5.520  -8.368 -19.136  1.00 19.57           C
ATOM   1079  CZ  PHE A 155      -4.380  -8.413 -18.374  1.00 19.93           C
ATOM   1080  N   SER A 156      -6.560  -3.818 -21.673  1.00 21.94           N
ATOM   1081  CA  SER A 156      -6.316  -4.240 -23.050  1.00 24.27           C
ATOM   1082  C   SER A 156      -5.474  -3.250 -23.845  1.00 21.37           C
ATOM   1083  O   SER A 156      -5.075  -3.571 -24.962  1.00 24.68           O
ATOM   1084  CB  SER A 156      -7.631  -4.511 -23.791  1.00 25.10           C
ATOM   1085  OG  SER A 156      -8.452  -3.365 -23.837  1.00 30.64           O
ATOM   1086  N   SER A 157      -5.199  -2.072 -23.314  1.00 20.41           N
ATOM   1087  CA  SER A 157      -4.344  -1.121 -23.992  1.00 23.67           C
ATOM   1088  C   SER A 157      -2.866  -1.297 -23.664  1.00 22.14           C
ATOM   1089  O   SER A 157      -2.056  -0.454 -24.077  1.00 21.85           O
ATOM   1090  CB  SER A 157      -4.786   0.303 -23.648  1.00 25.62           C
ATOM   1091  OG  SER A 157      -6.127   0.502 -24.072  1.00 27.75           O
ATOM   1092  N   TYR A 158      -2.486  -2.351 -22.935  1.00 20.08           N
ATOM   1093  CA  TYR A 158      -1.108  -2.488 -22.464  1.00 19.69           C
ATOM   1094  C   TYR A 158      -0.599  -3.917 -22.622  1.00 17.67           C
ATOM   1095  O   TYR A 158      -1.239  -4.860 -22.160  1.00 20.00           O
ATOM   1096  CB  TYR A 158      -1.002  -2.086 -21.002  1.00 17.39           C
ATOM   1097  CG  TYR A 158      -1.395  -0.674 -20.712  1.00 22.50           C
ATOM   1098  CD2 TYR A 158      -0.447   0.346 -20.694  1.00 22.85           C
ATOM   1099  CD1 TYR A 158      -2.710  -0.349 -20.449  1.00 21.13           C
ATOM   1100  CE2 TYR A 158      -0.807   1.647 -20.405  1.00 22.84           C
ATOM   1101  CE1 TYR A 158      -3.082   0.953 -20.179  1.00 22.67           C
ATOM   1102  CZ  TYR A 158      -2.132   1.945 -20.147  1.00 26.47           C
ATOM   1103  OH  TYR A 158      -2.519   3.251 -19.857  1.00 29.09           O
ATOM   1104  N   ALA A 159       0.561  -4.075 -23.253  1.00 16.49           N
ATOM   1105  CA  ALA A 159       1.253  -5.348 -23.182  1.00 16.93           C
ATOM   1106  C   ALA A 159       1.667  -5.635 -21.746  1.00 19.32           C
ATOM   1107  O   ALA A 159       1.780  -4.729 -20.905  1.00 20.24           O
ATOM   1108  CB  ALA A 159       2.480  -5.339 -24.106  1.00 17.04           C
ATOM   1109  N   MET A 160       1.875  -6.919 -21.464  1.00 21.14           N
ATOM   1110  CA  MET A 160       2.234  -7.395 -20.140  1.00 19.81           C
ATOM   1111  C   MET A 160       3.402  -8.356 -20.282  1.00 20.76           C
ATOM   1112  O   MET A 160       3.620  -8.944 -21.347  1.00 21.07           O
ATOM   1113  CB  MET A 160       1.058  -8.095 -19.444  1.00 17.25           C
ATOM   1114  CG  MET A 160      -0.151  -7.186 -19.299  1.00 19.82           C
ATOM   1115  SD  MET A 160      -0.034  -5.920 -18.029  1.00 24.76           S
ATOM   1116  CE  MET A 160       0.091  -6.940 -16.562  1.00 19.57           C
ATOM   1117  N   SER A 161       4.099  -8.565 -19.170  1.00 19.82           N
ATOM   1118  CA  SER A 161       5.329  -9.336 -19.153  1.00 20.39           C
ATOM   1119  C   SER A 161       5.399 -10.180 -17.888  1.00 17.95           C
ATOM   1120  O   SER A 161       4.816  -9.826 -16.867  1.00 18.67           O
ATOM   1121  CB  SER A 161       6.535  -8.381 -19.206  1.00 20.56           C
ATOM   1122  OG  SER A 161       7.776  -9.085 -19.218  1.00 22.49           O
ATOM   1123  N   TRP A 162       6.119 -11.303 -17.961  1.00 15.72           N
ATOM   1124  CA  TRP A 162       6.551 -12.046 -16.791  1.00 16.34           C
ATOM   1125  C   TRP A 162       8.064 -11.988 -16.763  1.00 15.39           C
ATOM   1126  O   TRP A 162       8.709 -12.202 -17.791  1.00 18.44           O
ATOM   1127  CB  TRP A 162       6.074 -13.508 -16.811  1.00 19.31           C
ATOM   1128  CG  TRP A 162       4.600 -13.661 -16.599  1.00 15.39           C
ATOM   1129  CD1 TRP A 162       3.643 -13.800 -17.561  1.00 17.41           C
ATOM   1130  CD2 TRP A 162       3.918 -13.678 -15.348  1.00 18.28           C
ATOM   1131  CE2 TRP A 162       2.547 -13.831 -15.619  1.00 16.89           C
ATOM   1132  CE3 TRP A 162       4.338 -13.587 -14.017  1.00 17.39           C
ATOM   1133  NE1 TRP A 162       2.401 -13.894 -16.976  1.00 18.92           N
ATOM   1134  CZ2 TRP A 162       1.587 -13.894 -14.603  1.00 19.65           C
[1863] ATOM   1135  CZ3 TRP A 162       3.381 -13.664 -12.994  1.00 18.88           C
```

```
ATOM   1136  CH2 TRP A 162       2.023 -13.810 -13.303  1.00 18.55           C
ATOM   1137  N   VAL A 163       8.611 -11.684 -15.593  1.00 19.61           N
ATOM   1138  CA  VAL A 163      10.044 -11.560 -15.337  1.00 19.03           C
ATOM   1139  C   VAL A 163      10.352 -12.372 -14.082  1.00 18.33           C
ATOM   1140  O   VAL A 163       9.584 -12.332 -13.118  1.00 20.80           O
ATOM   1141  CB  VAL A 163      10.423 -10.076 -15.157  1.00 19.65           C
ATOM   1142  CG1 VAL A 163      11.825  -9.907 -14.648  1.00 20.09           C
ATOM   1143  CG2 VAL A 163      10.221  -9.305 -16.459  1.00 18.20           C
ATOM   1144  N   ARG A 164      11.413 -13.179 -14.105  1.00 19.33           N
ATOM   1145  CA  ARG A 164      11.716 -13.968 -12.919  1.00 18.79           C
ATOM   1146  C   ARG A 164      13.087 -13.598 -12.374  1.00 19.38           C
ATOM   1147  O   ARG A 164      13.898 -12.941 -13.050  1.00 18.60           O
ATOM   1148  CB  ARG A 164      11.636 -15.494 -13.173  1.00 19.51           C
ATOM   1149  CG  ARG A 164      12.623 -16.063 -14.134  1.00 18.08           C
ATOM   1150  CD  ARG A 164      12.387 -17.530 -14.344  1.00 17.22           C
ATOM   1151  NE  ARG A 164      13.349 -18.081 -15.303  1.00 24.06           N
ATOM   1152  CZ  ARG A 164      13.271 -19.308 -15.815  1.00 23.72           C
ATOM   1153  NH1 ARG A 164      12.275 -20.097 -15.438  1.00 24.68           N
ATOM   1154  NH2 ARG A 164      14.170 -19.750 -16.691  1.00 22.62           N
ATOM   1155  N   GLN A 165      13.317 -14.010 -11.125  1.00 18.54           N
ATOM   1156  CA  GLN A 165      14.596 -13.808 -10.446  1.00 20.63           C
ATOM   1157  C   GLN A 165      14.927 -15.011  -9.565  1.00 21.39           C
ATOM   1158  O   GLN A 165      14.315 -15.187  -8.512  1.00 21.22           O
ATOM   1159  CB  GLN A 165      14.538 -12.542  -9.623  1.00 19.09           C
ATOM   1160  CG  GLN A 165      15.785 -12.202  -8.911  1.00 20.16           C
ATOM   1161  CD  GLN A 165      15.752 -10.767  -8.474  1.00 22.08           C
ATOM   1162  NE2 GLN A 165      16.785 -10.006  -8.818  1.00 19.48           N
ATOM   1163  OE1 GLN A 165      14.775 -10.323  -7.859  1.00 29.37           O
ATOM   1164  N   ALA A 166      15.902 -15.829  -9.970  1.00 22.38           N
ATOM   1165  CA  ALA A 166      16.318 -16.923  -9.115  1.00 23.72           C
ATOM   1166  C   ALA A 166      16.937 -16.352  -7.840  1.00 27.13           C
ATOM   1167  O   ALA A 166      17.449 -15.230  -7.847  1.00 27.63           O
ATOM   1168  CB  ALA A 166      17.314 -17.830  -9.830  1.00 22.15           C
ATOM   1169  N   PRO A 167      16.845 -17.075  -6.713  1.00 29.67           N
ATOM   1170  CA  PRO A 167      17.358 -16.545  -5.443  1.00 29.85           C
ATOM   1171  C   PRO A 167      18.795 -16.058  -5.533  1.00 30.04           C
ATOM   1172  O   PRO A 167      19.682 -16.809  -5.939  1.00 34.32           O
ATOM   1173  CB  PRO A 167      17.225 -17.728  -4.486  1.00 32.83           C
ATOM   1174  CG  PRO A 167      16.191 -18.623  -5.081  1.00 33.73           C
ATOM   1175  CD  PRO A 167      16.064 -18.313  -6.545  1.00 30.25           C
ATOM   1176  N   GLY A 168      19.023 -14.798  -5.178  1.00 32.43           N
ATOM   1177  CA  GLY A 168      20.352 -14.218  -5.223  1.00 32.18           C
ATOM   1178  C   GLY A 168      20.929 -13.973  -6.602  1.00 32.44           C
ATOM   1179  O   GLY A 168      22.125 -13.692  -6.709  1.00 33.38           O
ATOM   1180  N   LYS A 169      20.137 -14.080  -7.664  1.00 33.60           N
ATOM   1181  CA  LYS A 169      20.625 -13.839  -9.016  1.00 27.82           C
ATOM   1182  C   LYS A 169      19.861 -12.674  -9.640  1.00 23.89           C
ATOM   1183  O   LYS A 169      19.144 -11.942  -8.962  1.00 24.45           O
ATOM   1184  CB  LYS A 169      20.523 -15.124  -9.826  1.00 30.37           C
ATOM   1185  CG  LYS A 169      21.244 -16.217  -9.045  1.00 31.70           C
ATOM   1186  CD  LYS A 169      22.107 -17.086  -9.896  1.00 33.65           C
ATOM   1187  CE  LYS A 169      22.233 -18.445  -9.259  1.00 45.56           C
ATOM   1188  NZ  LYS A 169      22.529 -19.507 -10.258  1.00 48.09           N
ATOM   1189  N   GLY A 170      20.097 -12.435 -10.919  1.00 24.63           N
ATOM   1190  CA  GLY A 170      19.572 -11.255 -11.572  1.00 25.99           C
ATOM   1191  C   GLY A 170      18.192 -11.477 -12.158  1.00 24.00           C
ATOM   1192  O   GLY A 170      17.680 -12.598 -12.223  1.00 21.98           O
ATOM   1193  N   LEU A 171      17.626 -10.383 -12.662  1.00 22.29           N
ATOM   1194  CA  LEU A 171      16.342 -10.438 -13.340  1.00 20.22           C
ATOM   1195  C   LEU A 171      16.461 -11.118 -14.691  1.00 21.47           C
ATOM   1196  O   LEU A 171      17.388 -10.852 -15.460  1.00 21.83           O
ATOM   1197  CB  LEU A 171      15.807  -9.027 -13.531  1.00 20.88           C
ATOM   1198  CG  LEU A 171      15.537  -8.095 -12.355  1.00 19.16           C
ATOM   1199  CD1 LEU A 171      15.158  -6.713 -12.874  1.00 17.81           C
ATOM   1200  CD2 LEU A 171      14.455  -8.608 -11.434  1.00 19.32           C
ATOM   1201  N   GLU A 172      15.463 -11.939 -15.023  1.00 21.86           N
ATOM   1202  CA  GLU A 172      15.444 -12.667 -16.284  1.00 23.35           C
ATOM   1203  C   GLU A 172      14.061 -12.558 -16.906  1.00 20.95           C
```

[1864]

```
ATOM   1204  O   GLU A 172      13.059 -12.923 -16.279  1.00 20.44           O
ATOM   1205  CB  GLU A 172      15.823 -14.138 -16.089  1.00 23.13           C
ATOM   1206  CG  GLU A 172      15.750 -14.911 -17.348  1.00 26.19           C
ATOM   1207  CD  GLU A 172      16.105 -16.361 -17.156  1.00 28.46           C
ATOM   1208  OE1 GLU A 172      15.869 -16.917 -16.060  1.00 28.63           O
ATOM   1209  OE2 GLU A 172      16.650 -16.944 -18.114  1.00 35.34           O
ATOM   1210  N   TRP A 173      14.018 -12.050 -18.132  1.00 22.00           N
ATOM   1211  CA  TRP A 173      12.770 -11.925 -18.869  1.00 22.18           C
ATOM   1212  C   TRP A 173      12.249 -13.311 -19.244  1.00 22.16           C
ATOM   1213  O   TRP A 173      13.003 -14.168 -19.726  1.00 21.19           O
ATOM   1214  CB  TRP A 173      12.990 -11.063 -20.117  1.00 20.40           C
ATOM   1215  CG  TRP A 173      11.749 -10.855 -20.944  1.00 18.79           C
ATOM   1216  CD1 TRP A 173      10.749  -9.983 -20.690  1.00 21.45           C
ATOM   1217  CD2 TRP A 173      11.396 -11.530 -22.150  1.00 20.78           C
ATOM   1218  CE2 TRP A 173      10.164 -11.021 -22.568  1.00 20.86           C
ATOM   1219  CE3 TRP A 173      12.006 -12.527 -22.922  1.00 23.83           C
ATOM   1220  NE1 TRP A 173       9.788 -10.068 -21.665  1.00 22.83           N
ATOM   1221  CZ2 TRP A 173       9.529 -11.467 -23.720  1.00 19.29           C
ATOM   1222  CZ3 TRP A 173      11.375 -12.968 -24.061  1.00 20.42           C
ATOM   1223  CH2 TRP A 173      10.153 -12.436 -24.453  1.00 21.86           C
ATOM   1224  N   VAL A 174      10.955 -13.541 -19.018  1.00 19.53           N
ATOM   1225  CA  VAL A 174      10.335 -14.821 -19.301  1.00 15.98           C
ATOM   1226  C   VAL A 174       9.452 -14.756 -20.543  1.00 20.42           C
ATOM   1227  O   VAL A 174       9.569 -15.591 -21.442  1.00 22.19           O
ATOM   1228  CB  VAL A 174       9.537 -15.337 -18.085  1.00 18.06           C
ATOM   1229  CG1 VAL A 174       8.860 -16.686 -18.445  1.00 18.19           C
ATOM   1230  CG2 VAL A 174      10.424 -15.467 -16.888  1.00 17.65           C
ATOM   1231  N   SER A 175       8.538 -13.792 -20.601  1.00 20.48           N
ATOM   1232  CA  SER A 175       7.521 -13.846 -21.647  1.00 18.70           C
ATOM   1233  C   SER A 175       6.824 -12.497 -21.718  1.00 18.49           C
ATOM   1234  O   SER A 175       6.800 -11.752 -20.736  1.00 20.12           O
ATOM   1235  CB  SER A 175       6.520 -14.972 -21.361  1.00 19.40           C
ATOM   1236  OG  SER A 175       5.573 -15.051 -22.413  1.00 21.03           O
ATOM   1237  N   ALA A 176       6.248 -12.185 -22.879  1.00 17.86           N
ATOM   1238  CA  ALA A 176       5.388 -11.008 -22.995  1.00 15.49           C
ATOM   1239  C   ALA A 176       4.200 -11.298 -23.905  1.00 19.27           C
ATOM   1240  O   ALA A 176       4.218 -12.237 -24.706  1.00 20.09           O
ATOM   1241  CB  ALA A 176       6.137  -9.783 -23.514  1.00 18.30           C
ATOM   1242  N   ILE A 177       3.154 -10.476 -23.778  1.00 17.39           N
ATOM   1243  CA  ILE A 177       1.931 -10.643 -24.559  1.00 15.75           C
ATOM   1244  C   ILE A 177       1.405  -9.261 -24.917  1.00 18.75           C
ATOM   1245  O   ILE A 177       1.441  -8.335 -24.097  1.00 17.90           O
ATOM   1246  CB  ILE A 177       0.877 -11.484 -23.785  1.00 16.83           C
ATOM   1247  CG1 ILE A 177      -0.325 -11.840 -24.660  1.00 16.07           C
ATOM   1248  CG2 ILE A 177       0.442 -10.799 -22.471  1.00 18.40           C
ATOM   1249  CD1 ILE A 177      -1.214 -12.899 -24.045  1.00 17.43           C
ATOM   1250  N   SER A 178       0.953  -9.107 -26.155  1.00 18.75           N
ATOM   1251  CA  SER A 178       0.424  -7.827 -26.588  1.00 16.12           C
ATOM   1252  C   SER A 178      -0.908  -7.546 -25.905  1.00 18.91           C
ATOM   1253  O   SER A 178      -1.564  -8.446 -25.372  1.00 17.16           O
ATOM   1254  CB  SER A 178       0.243  -7.812 -28.098  1.00 21.28           C
ATOM   1255  OG  SER A 178      -0.740  -8.756 -28.508  1.00 20.94           O
ATOM   1256  N   GLY A 179      -1.335  -6.276 -25.969  1.00 18.42           N
ATOM   1257  CA  GLY A 179      -2.571  -5.890 -25.288  1.00 19.83           C
ATOM   1258  C   GLY A 179      -3.771  -6.734 -25.690  1.00 22.00           C
ATOM   1259  O   GLY A 179      -4.564  -7.142 -24.842  1.00 23.03           O
ATOM   1260  N   SER A 180      -3.907  -7.023 -26.980  1.00 22.66           N
ATOM   1261  CA  SER A 180      -5.026  -7.823 -27.460  1.00 21.85           C
ATOM   1262  C   SER A 180      -4.849  -9.302 -27.200  1.00 22.17           C
ATOM   1263  O   SER A 180      -5.826 -10.060 -27.285  1.00 22.34           O
ATOM   1264  CB  SER A 180      -5.224  -7.610 -28.945  1.00 25.84           C
ATOM   1265  OG  SER A 180      -4.173  -8.227 -29.678  1.00 24.82           O
ATOM   1266  N   GLY A 181      -3.633  -9.742 -26.907  1.00 22.01           N
ATOM   1267  CA  GLY A 181      -3.356 -11.158 -26.823  1.00 20.67           C
ATOM   1268  C   GLY A 181      -2.905 -11.784 -28.122  1.00 22.54           C
ATOM   1269  O   GLY A 181      -2.524 -12.956 -28.123  1.00 23.71           O
ATOM   1270  N   GLY A 182      -2.881 -11.027 -29.225  1.00 21.73           N
ATOM   1271  CA  GLY A 182      -2.568 -11.611 -30.513  1.00 22.17           C
```

[1865]

```
ATOM   1272  C   GLY A 182      -1.110 -11.949 -30.754  1.00 27.03           C
ATOM   1273  O   GLY A 182      -0.823 -12.778 -31.618  1.00 26.70           O
ATOM   1274  N   SER A 183      -0.173 -11.367 -30.016  1.00 24.85           N
ATOM   1275  CA  SER A 183       1.231 -11.724 -30.186  1.00 22.16           C
ATOM   1276  C   SER A 183       1.790 -12.116 -28.835  1.00 20.51           C
ATOM   1277  O   SER A 183       1.473 -11.479 -27.832  1.00 22.35           O
ATOM   1278  CB  SER A 183       2.066 -10.581 -30.734  1.00 22.54           C
ATOM   1279  OG  SER A 183       1.460 -10.004 -31.866  1.00 31.91           O
ATOM   1280  N   THR A 184       2.591 -13.181 -28.807  1.00 19.40           N
ATOM   1281  CA  THR A 184       3.258 -13.621 -27.586  1.00 22.64           C
ATOM   1282  C   THR A 184       4.717 -13.926 -27.895  1.00 24.48           C
ATOM   1283  O   THR A 184       5.071 -14.283 -29.022  1.00 22.16           O
ATOM   1284  CB  THR A 184       2.639 -14.861 -26.974  1.00 20.03           C
ATOM   1285  CG2 THR A 184       1.183 -14.608 -26.599  1.00 19.47           C
ATOM   1286  OG1 THR A 184       2.713 -15.927 -27.926  1.00 23.06           O
ATOM   1287  N   TYR A 185       5.569 -13.726 -26.896  1.00 21.60           N
ATOM   1288  CA  TYR A 185       7.004 -13.885 -27.048  1.00 22.28           C
ATOM   1289  C   TYR A 185       7.557 -14.621 -25.837  1.00 19.84           C
ATOM   1290  O   TYR A 185       7.066 -14.439 -24.723  1.00 19.99           O
ATOM   1291  CB  TYR A 185       7.640 -12.509 -27.187  1.00 21.17           C
ATOM   1292  CG  TYR A 185       6.925 -11.622 -28.195  1.00 23.44           C
ATOM   1293  CD1 TYR A 185       7.240 -11.666 -29.546  1.00 25.47           C
ATOM   1294  CD2 TYR A 185       5.942 -10.759 -27.796  1.00 20.61           C
ATOM   1295  CE1 TYR A 185       6.604 -10.852 -30.469  1.00 21.28           C
ATOM   1296  CE2 TYR A 185       5.300  -9.945 -28.711  1.00 23.79           C
ATOM   1297  CZ  TYR A 185       5.639  -9.994 -30.047  1.00 24.54           C
ATOM   1298  OH  TYR A 185       4.986  -9.182 -30.959  1.00 28.48           O
ATOM   1299  N   TYR A 186       8.596 -15.434 -26.041  1.00 21.20           N
ATOM   1300  CA  TYR A 186       9.128 -16.253 -24.955  1.00 23.19           C
ATOM   1301  C   TYR A 186      10.649 -16.250 -24.947  1.00 22.77           C
ATOM   1302  O   TYR A 186      11.285 -16.230 -26.001  1.00 24.84           O
ATOM   1303  CB  TYR A 186       8.664 -17.709 -25.070  1.00 22.26           C
ATOM   1304  CG  TYR A 186       7.177 -17.858 -24.987  1.00 22.78           C
ATOM   1305  CD2 TYR A 186       6.558 -18.108 -23.769  1.00 21.62           C
ATOM   1306  CD1 TYR A 186       6.379 -17.728 -26.110  1.00 20.54           C
ATOM   1307  CE2 TYR A 186       5.186 -18.245 -23.671  1.00 17.88           C
ATOM   1308  CE1 TYR A 186       4.998 -17.868 -26.013  1.00 19.87           C
ATOM   1309  CZ  TYR A 186       4.426 -18.119 -24.792  1.00 17.32           C
ATOM   1310  OH  TYR A 186       3.081 -18.259 -24.652  1.00 19.21           O
ATOM   1311  N   ALA A 187      11.221 -16.362 -23.752  1.00 24.65           N
ATOM   1312  CA  ALA A 187      12.643 -16.650 -23.636  1.00 22.98           C
ATOM   1313  C   ALA A 187      12.932 -18.042 -24.178  1.00 27.93           C
ATOM   1314  O   ALA A 187      12.098 -18.945 -24.102  1.00 25.75           O
ATOM   1315  CB  ALA A 187      13.075 -16.567 -22.176  1.00 23.72           C
ATOM   1316  N   ASP A 188      14.134 -18.216 -24.728  1.00 29.71           N
ATOM   1317  CA  ASP A 188      14.512 -19.511 -25.291  1.00 32.86           C
ATOM   1318  C   ASP A 188      14.284 -20.639 -24.303  1.00 32.21           C
ATOM   1319  O   ASP A 188      13.787 -21.714 -24.671  1.00 28.26           O
ATOM   1320  CB  ASP A 188      15.972 -19.494 -25.721  1.00 35.43           C
ATOM   1321  CG  ASP A 188      16.202 -18.652 -26.949  1.00 47.46           C
ATOM   1322  OD2 ASP A 188      17.067 -17.734 -26.883  1.00 47.62           O
ATOM   1323  OD1 ASP A 188      15.523 -18.922 -27.979  1.00 48.69           O
ATOM   1324  N   SER A 189      14.671 -20.421 -23.048  1.00 30.90           N
ATOM   1325  CA  SER A 189      14.667 -21.478 -22.052  1.00 30.62           C
ATOM   1326  C   SER A 189      13.275 -21.931 -21.623  1.00 30.95           C
ATOM   1327  O   SER A 189      13.178 -22.927 -20.896  1.00 33.07           O
ATOM   1328  CB  SER A 189      15.438 -21.001 -20.836  1.00 27.35           C
ATOM   1329  OG  SER A 189      14.869 -19.805 -20.328  1.00 28.91           O
ATOM   1330  N   VAL A 190      12.197 -21.284 -22.070  1.00 26.89           N
ATOM   1331  CA  VAL A 190      10.858 -21.681 -21.648  1.00 26.53           C
ATOM   1332  C   VAL A 190       9.950 -22.045 -22.812  1.00 23.57           C
ATOM   1333  O   VAL A 190       8.804 -22.431 -22.572  1.00 22.52           O
ATOM   1334  CB  VAL A 190      10.177 -20.608 -20.767  1.00 21.94           C
ATOM   1335  CG1 VAL A 190      11.067 -20.204 -19.649  1.00 20.31           C
ATOM   1336  CG2 VAL A 190       9.773 -19.405 -21.590  1.00 22.83           C
ATOM   1337  N   LYS A 191      10.409 -21.935 -24.059  1.00 24.44           N
ATOM   1338  CA  LYS A 191       9.535 -22.245 -25.186  1.00 21.86           C
ATOM   1339  C   LYS A 191       9.123 -23.696 -25.144  1.00 25.03           C
```

[1866]

```
ATOM   1340  O   LYS A 191       9.912 -24.575 -24.791  1.00 26.07           O
ATOM   1341  CB  LYS A 191      10.196 -21.944 -26.530  1.00 26.53           C
ATOM   1342  CG  LYS A 191      10.302 -20.467 -26.806  1.00 29.62           C
ATOM   1343  CD  LYS A 191      10.975 -20.128 -28.135  1.00 32.58           C
ATOM   1344  CE  LYS A 191      11.040 -18.606 -28.323  1.00 32.69           C
ATOM   1345  NZ  LYS A 191      11.590 -18.240 -29.658  1.00 39.15           N
ATOM   1346  N   GLY A 192       7.869 -23.950 -25.502  1.00 25.08           N
ATOM   1347  CA  GLY A 192       7.371 -25.293 -25.460  1.00 23.49           C
ATOM   1348  C   GLY A 192       6.957 -25.785 -24.094  1.00 26.26           C
ATOM   1349  O   GLY A 192       6.419 -26.899 -24.010  1.00 28.23           O
ATOM   1350  N   ARG A 193       7.272 -25.050 -23.005  1.00 23.30           N
ATOM   1351  CA  ARG A 193       6.872 -25.412 -21.645  1.00 22.97           C
ATOM   1352  C   ARG A 193       5.957 -24.414 -20.953  1.00 23.08           C
ATOM   1353  O   ARG A 193       5.192 -24.821 -20.078  1.00 24.59           O
ATOM   1354  CB  ARG A 193       8.107 -25.619 -20.748  1.00 20.97           C
ATOM   1355  CG  ARG A 193       9.084 -26.633 -21.315  1.00 23.50           C
ATOM   1356  CD  ARG A 193      10.263 -26.923 -20.397  1.00 24.20           C
ATOM   1357  NE  ARG A 193      11.035 -25.714 -20.117  1.00 25.59           N
ATOM   1358  CZ  ARG A 193      11.255 -25.225 -18.901  1.00 22.95           C
ATOM   1359  NH1 ARG A 193      10.778 -25.832 -17.820  1.00 25.32           N
ATOM   1360  NH2 ARG A 193      11.968 -24.128 -18.761  1.00 24.43           N
ATOM   1361  N   PHE A 194       6.036 -23.126 -21.274  1.00 23.51           N
ATOM   1362  CA  PHE A 194       5.216 -22.115 -20.626  1.00 19.89           C
ATOM   1363  C   PHE A 194       4.272 -21.514 -21.648  1.00 19.99           C
ATOM   1364  O   PHE A 194       4.579 -21.477 -22.844  1.00 19.56           O
ATOM   1365  CB  PHE A 194       6.014 -20.954 -20.021  1.00 19.11           C
ATOM   1366  CG  PHE A 194       6.982 -21.339 -18.939  1.00 21.41           C
ATOM   1367  CD1 PHE A 194       7.119 -22.639 -18.521  1.00 23.38           C
ATOM   1368  CD2 PHE A 194       7.669 -20.361 -18.249  1.00 22.57           C
ATOM   1369  CE1 PHE A 194       8.004 -22.971 -17.499  1.00 23.83           C
ATOM   1370  CE2 PHE A 194       8.532 -20.692 -17.215  1.00 21.38           C
ATOM   1371  CZ  PHE A 194       8.704 -22.002 -16.856  1.00 20.72           C
ATOM   1372  N   THR A 195       3.123 -21.019 -21.171  1.00 20.91           N
ATOM   1373  CA  THR A 195       2.203 -20.277 -22.036  1.00 19.15           C
ATOM   1374  C   THR A 195       1.695 -19.030 -21.325  1.00 17.69           C
ATOM   1375  O   THR A 195       1.153 -19.112 -20.220  1.00 19.73           O
ATOM   1376  CB  THR A 195       1.045 -21.158 -22.454  1.00 18.99           C
ATOM   1377  CG2 THR A 195       0.046 -20.359 -23.289  1.00 19.23           C
ATOM   1378  OG1 THR A 195       1.565 -22.228 -23.232  1.00 21.70           O
ATOM   1379  N   ILE A 196       1.929 -17.884 -21.907  1.00 17.90           N
ATOM   1380  CA  ILE A 196       1.375 -16.634 -21.398  1.00 18.89           C
ATOM   1381  C   ILE A 196       0.030 -16.419 -22.070  1.00 19.26           C
ATOM   1382  O   ILE A 196      -0.136 -16.726 -23.254  1.00 22.37           O
ATOM   1383  CB  ILE A 196       2.346 -15.458 -21.652  1.00 18.41           C
ATOM   1384  CG1 ILE A 196       1.931 -14.230 -20.860  1.00 16.64           C
ATOM   1385  CG2 ILE A 196       2.448 -15.126 -23.141  1.00 16.41           C
ATOM   1386  CD1 ILE A 196       2.957 -13.106 -20.918  1.00 18.03           C
ATOM   1387  N   SER A 197      -0.947 -15.931 -21.313  1.00 19.26           N
ATOM   1388  CA  SER A 197      -2.259 -15.644 -21.886  1.00 18.77           C
ATOM   1389  C   SER A 197      -2.944 -14.614 -21.016  1.00 18.38           C
ATOM   1390  O   SER A 197      -2.512 -14.332 -19.905  1.00 19.38           O
ATOM   1391  CB  SER A 197      -3.147 -16.877 -21.966  1.00 19.20           C
ATOM   1392  OG  SER A 197      -3.452 -17.331 -20.662  1.00 22.44           O
ATOM   1393  N   ARG A 198      -4.065 -14.112 -21.503  1.00 18.56           N
ATOM   1394  CA  ARG A 198      -4.740 -13.046 -20.792  1.00 19.46           C
ATOM   1395  C   ARG A 198      -6.228 -13.157 -21.080  1.00 21.30           C
ATOM   1396  O   ARG A 198      -6.642 -13.564 -22.167  1.00 21.88           O
ATOM   1397  CB  ARG A 198      -4.181 -11.677 -21.197  1.00 17.30           C
ATOM   1398  CG  ARG A 198      -4.369 -11.305 -22.639  1.00 15.30           C
ATOM   1399  CD  ARG A 198      -3.603 -10.030 -22.970  1.00 17.45           C
ATOM   1400  NE  ARG A 198      -3.983  -8.853 -22.194  1.00 18.28           N
ATOM   1401  CZ  ARG A 198      -3.203  -7.786 -22.055  1.00 18.89           C
ATOM   1402  NH1 ARG A 198      -2.028  -7.770 -22.660  1.00 18.31           N
ATOM   1403  NH2 ARG A 198      -3.587  -6.731 -21.339  1.00 19.68           N
ATOM   1404  N   ASP A 199      -7.021 -12.774 -20.101  1.00 22.26           N
ATOM   1405  CA  ASP A 199      -8.474 -12.779 -20.213  1.00 26.21           C
ATOM   1406  C   ASP A 199      -8.915 -11.334 -20.056  1.00 27.56           C
ATOM   1407  O   ASP A 199      -9.055 -10.839 -18.933  1.00 27.47           O
```

[1867]

```
ATOM   1408  CB  ASP A 199      -9.083 -13.692 -19.152  1.00 28.00           C
ATOM   1409  CG  ASP A 199     -10.597 -13.750 -19.213  1.00 30.30           C
ATOM   1410  OD2 ASP A 199     -11.164 -14.697 -18.645  1.00 35.95           O
ATOM   1411  OD1 ASP A 199     -11.225 -12.850 -19.795  1.00 31.80           O
ATOM   1412  N   ASN A 200      -9.118 -10.657 -21.190  1.00 24.09           N
ATOM   1413  CA  ASN A 200      -9.423  -9.239 -21.142  1.00 25.30           C
ATOM   1414  C   ASN A 200     -10.812  -8.979 -20.590  1.00 28.90           C
ATOM   1415  O   ASN A 200     -11.097  -7.855 -20.174  1.00 35.00           O
ATOM   1416  CB  ASN A 200      -9.252  -8.594 -22.514  1.00 26.85           C
ATOM   1417  CG  ASN A 200      -7.793  -8.408 -22.879  1.00 22.39           C
ATOM   1418  ND2 ASN A 200      -7.517  -8.030 -24.123  1.00 22.78           N
ATOM   1419  OD1 ASN A 200      -6.919  -8.589 -22.018  1.00 24.21           O
ATOM   1420  N   SER A 201     -11.684  -9.979 -20.549  1.00 28.98           N
ATOM   1421  CA  SER A 201     -12.958  -9.722 -19.894  1.00 29.12           C
ATOM   1422  C   SER A 201     -12.780  -9.662 -18.376  1.00 29.42           C
ATOM   1423  O   SER A 201     -13.434  -8.855 -17.707  1.00 33.69           O
ATOM   1424  CB  SER A 201     -13.989 -10.766 -20.321  1.00 31.42           C
ATOM   1425  OG  SER A 201     -13.607 -12.069 -19.932  1.00 36.61           O
ATOM   1426  N   LYS A 202     -11.889 -10.487 -17.808  1.00 29.25           N
ATOM   1427  CA  LYS A 202     -11.639 -10.487 -16.369  1.00 25.83           C
ATOM   1428  C   LYS A 202     -10.423  -9.662 -15.957  1.00 27.49           C
ATOM   1429  O   LYS A 202     -10.140  -9.562 -14.759  1.00 27.49           O
ATOM   1430  CB  LYS A 202     -11.488 -11.927 -15.855  1.00 24.71           C
ATOM   1431  N   ASN A 203      -9.744  -9.008 -16.896  1.00 27.83           N
ATOM   1432  CA  ASN A 203      -8.544  -8.224 -16.601  1.00 25.40           C
ATOM   1433  C   ASN A 203      -7.462  -9.003 -15.841  1.00 21.55           C
ATOM   1434  O   ASN A 203      -6.885  -8.518 -14.867  1.00 23.42           O
ATOM   1435  CB  ASN A 203      -8.923  -6.960 -15.837  1.00 28.85           C
ATOM   1436  CG  ASN A 203      -9.650  -5.967 -16.696  1.00 24.63           C
ATOM   1437  ND2 ASN A 203     -10.108  -4.906 -16.084  1.00 32.61           N
ATOM   1438  OD1 ASN A 203      -9.818  -6.162 -17.893  1.00 28.28           O
ATOM   1439  N   THR A 204      -7.121 -10.183 -16.338  1.00 21.85           N
ATOM   1440  CA  THR A 204      -6.170 -11.050 -15.653  1.00 22.37           C
ATOM   1441  C   THR A 204      -5.122 -11.563 -16.633  1.00 18.99           C
ATOM   1442  O   THR A 204      -5.439 -11.909 -17.768  1.00 20.93           O
ATOM   1443  CB  THR A 204      -6.893 -12.209 -14.981  1.00 23.56           C
ATOM   1444  CG2 THR A 204      -5.922 -13.075 -14.187  1.00 23.70           C
ATOM   1445  OG1 THR A 204      -7.859 -11.674 -14.072  1.00 25.48           O
ATOM   1446  N   LEU A 205      -3.868 -11.593 -16.183  1.00 19.54           N
ATOM   1447  CA  LEU A 205      -2.756 -12.158 -16.937  1.00 18.25           C
ATOM   1448  C   LEU A 205      -2.390 -13.514 -16.359  1.00 20.07           C
ATOM   1449  O   LEU A 205      -2.360 -13.672 -15.145  1.00 20.51           O
ATOM   1450  CB  LEU A 205      -1.548 -11.236 -16.824  1.00 18.37           C
ATOM   1451  CG  LEU A 205      -0.256 -11.740 -17.445  1.00 17.43           C
ATOM   1452  CD1 LEU A 205      -0.362 -11.689 -18.948  1.00 16.37           C
ATOM   1453  CD2 LEU A 205       0.872 -10.841 -16.913  1.00 18.27           C
ATOM   1454  N   TYR A 206      -2.050 -14.476 -17.212  1.00 18.09           N
ATOM   1455  CA  TYR A 206      -1.704 -15.814 -16.741  1.00 18.89           C
ATOM   1456  C   TYR A 206      -0.354 -16.264 -17.283  1.00 17.81           C
ATOM   1457  O   TYR A 206       0.085 -15.829 -18.361  1.00 16.33           O
ATOM   1458  CB  TYR A 206      -2.765 -16.858 -17.145  1.00 21.69           C
ATOM   1459  CG  TYR A 206      -4.146 -16.568 -16.620  1.00 22.52           C
ATOM   1460  CD2 TYR A 206      -5.092 -15.962 -17.425  1.00 22.14           C
ATOM   1461  CD1 TYR A 206      -4.508 -16.912 -15.313  1.00 23.43           C
ATOM   1462  CE2 TYR A 206      -6.370 -15.686 -16.940  1.00 23.93           C
ATOM   1463  CE1 TYR A 206      -5.791 -16.639 -14.814  1.00 20.76           C
ATOM   1464  CZ  TYR A 206      -6.715 -16.030 -15.653  1.00 24.21           C
ATOM   1465  OH  TYR A 206      -7.996 -15.737 -15.213  1.00 29.58           O
ATOM   1466  N   LEU A 207       0.310 -17.119 -16.510  1.00 17.71           N
ATOM   1467  CA  LEU A 207       1.457 -17.889 -16.981  1.00 17.83           C
ATOM   1468  C   LEU A 207       1.221 -19.329 -16.567  1.00 17.64           C
ATOM   1469  O   LEU A 207       1.229 -19.627 -15.371  1.00 22.01           O
ATOM   1470  CB  LEU A 207       2.767 -17.362 -16.398  1.00 18.94           C
ATOM   1471  CG  LEU A 207       4.017 -18.000 -17.003  1.00 17.57           C
ATOM   1472  CD1 LEU A 207       4.107 -17.588 -18.467  1.00 19.94           C
ATOM   1473  CD2 LEU A 207       5.266 -17.552 -16.246  1.00 18.68           C
ATOM   1474  N   GLN A 208       0.930 -20.202 -17.534  1.00 15.01           N
ATOM   1475  CA  GLN A 208       0.771 -21.624 -17.281  1.00 18.10           C
```

[1868]

```
ATOM   1476  C   GLN A 208       2.096 -22.306 -17.576  1.00 17.48           C
ATOM   1477  O   GLN A 208       2.606 -22.194 -18.682  1.00 16.78           O
ATOM   1478  CB  GLN A 208      -0.325 -22.253 -18.137  1.00 17.99           C
ATOM   1479  CG  GLN A 208      -0.402 -23.766 -17.924  1.00 22.00           C
ATOM   1480  CD  GLN A 208      -1.006 -24.138 -16.570  1.00 19.96           C
ATOM   1481  NE2 GLN A 208      -0.249 -24.867 -15.747  1.00 20.19           N
ATOM   1482  OE1 GLN A 208      -2.102 -23.690 -16.233  1.00 19.83           O
ATOM   1483  N   MET A 209       2.658 -22.977 -16.579  1.00 21.01           N
ATOM   1484  CA  MET A 209       3.949 -23.653 -16.669  1.00 21.55           C
ATOM   1485  C   MET A 209       3.754 -25.155 -16.507  1.00 22.59           C
ATOM   1486  O   MET A 209       2.943 -25.582 -15.681  1.00 22.16           O
ATOM   1487  CB  MET A 209       4.898 -23.134 -15.589  1.00 21.91           C
ATOM   1488  CG  MET A 209       5.046 -21.631 -15.597  1.00 22.37           C
ATOM   1489  SD  MET A 209       6.258 -21.044 -14.390  1.00 24.45           S
ATOM   1490  CE  MET A 209       5.429 -21.432 -12.891  1.00 20.64           C
ATOM   1491  N   ASN A 210       4.400 -25.944 -17.371  1.00 22.20           N
ATOM   1492  CA  ASN A 210       4.494 -27.402 -17.242  1.00 22.16           C
ATOM   1493  C   ASN A 210       5.956 -27.815 -17.413  1.00 23.13           C
ATOM   1494  O   ASN A 210       6.799 -27.019 -17.823  1.00 21.43           O
ATOM   1495  CB  ASN A 210       3.601 -28.135 -18.237  1.00 21.10           C
ATOM   1496  CG  ASN A 210       3.187 -29.505 -17.720  1.00 21.94           C
ATOM   1497  ND2 ASN A 210       2.465 -30.282 -18.544  1.00 20.85           N
ATOM   1498  OD1 ASN A 210       3.515 -29.856 -16.594  1.00 21.13           O
ATOM   1499  N   SER A 211       6.267 -29.066 -17.092  1.00 26.17           N
ATOM   1500  CA  SER A 211       7.634 -29.585 -17.195  1.00 24.93           C
ATOM   1501  C   SER A 211       8.623 -28.678 -16.471  1.00 22.88           C
ATOM   1502  O   SER A 211       9.696 -28.360 -16.981  1.00 26.57           O
ATOM   1503  CB  SER A 211       8.069 -29.740 -18.655  1.00 23.99           C
ATOM   1504  OG  SER A 211       7.127 -30.475 -19.410  1.00 32.19           O
ATOM   1505  N   LEU A 212       8.286 -28.299 -15.254  1.00 25.09           N
ATOM   1506  CA  LEU A 212       9.160 -27.396 -14.518  1.00 25.59           C
ATOM   1507  C   LEU A 212      10.464 -28.104 -14.161  1.00 27.11           C
ATOM   1508  O   LEU A 212      10.491 -29.300 -13.856  1.00 28.40           O
ATOM   1509  CB  LEU A 212       8.469 -26.855 -13.261  1.00 24.60           C
ATOM   1510  CG  LEU A 212       7.387 -25.822 -13.545  1.00 23.09           C
ATOM   1511  CD1 LEU A 212       6.425 -25.662 -12.412  1.00 21.31           C
ATOM   1512  CD2 LEU A 212       8.071 -24.508 -13.771  1.00 23.91           C
ATOM   1513  N   ARG A 213      11.546 -27.341 -14.162  1.00 25.92           N
ATOM   1514  CA  ARG A 213      12.845 -27.860 -13.797  1.00 25.46           C
ATOM   1515  C   ARG A 213      13.373 -27.052 -12.626  1.00 27.14           C
ATOM   1516  O   ARG A 213      12.884 -25.953 -12.313  1.00 25.99           O
ATOM   1517  CB  ARG A 213      13.820 -27.693 -14.981  1.00 29.14           C
ATOM   1518  CG  ARG A 213      13.354 -28.210 -16.352  1.00 30.73           C
ATOM   1519  CD  ARG A 213      14.175 -27.487 -17.476  1.00 34.37           C
ATOM   1520  NE  ARG A 213      13.901 -27.963 -18.840  1.00 37.62           N
ATOM   1521  CZ  ARG A 213      14.283 -27.332 -19.961  1.00 36.29           C
ATOM   1522  NH1 ARG A 213      14.937 -26.173 -19.900  1.00 35.22           N
ATOM   1523  NH2 ARG A 213      13.980 -27.839 -21.149  1.00 31.81           N
ATOM   1524  N   ALA A 214      14.391 -27.602 -11.978  1.00 23.98           N
ATOM   1525  CA  ALA A 214      14.935 -26.927 -10.820  1.00 25.75           C
ATOM   1526  C   ALA A 214      15.405 -25.534 -11.195  1.00 24.77           C
ATOM   1527  O   ALA A 214      15.265 -24.597 -10.407  1.00 25.72           O
ATOM   1528  CB  ALA A 214      16.061 -27.771 -10.219  1.00 27.47           C
ATOM   1529  N   GLU A 215      15.909 -25.366 -12.414  1.00 28.36           N
ATOM   1530  CA  GLU A 215      16.373 -24.064 -12.868  1.00 30.57           C
ATOM   1531  C   GLU A 215      15.258 -23.054 -13.030  1.00 27.22           C
ATOM   1532  O   GLU A 215      15.552 -21.893 -13.340  1.00 28.38           O
ATOM   1533  CB  GLU A 215      17.092 -24.191 -14.203  1.00 31.97           C
ATOM   1534  CG  GLU A 215      18.001 -25.390 -14.252  1.00 39.91           C
ATOM   1535  CD  GLU A 215      17.302 -26.604 -14.830  1.00 39.35           C
ATOM   1536  OE1 GLU A 215      16.786 -26.478 -15.980  1.00 42.19           O
ATOM   1537  OE2 GLU A 215      17.261 -27.653 -14.120  1.00 32.08           O
ATOM   1538  N   ASP A 216      13.997 -23.464 -12.882  1.00 27.23           N
ATOM   1539  CA  ASP A 216      12.884 -22.524 -12.922  1.00 25.28           C
ATOM   1540  C   ASP A 216      12.535 -21.953 -11.555  1.00 25.09           C
ATOM   1541  O   ASP A 216      11.708 -21.040 -11.480  1.00 25.59           O
ATOM   1542  CB  ASP A 216      11.635 -23.166 -13.551  1.00 24.87           C
ATOM   1543  CG  ASP A 216      11.864 -23.618 -14.986  1.00 26.80           C
```

[1869]

```
ATOM   1544  OD1 ASP A 216      12.385 -22.830 -15.809  1.00 26.36           O
ATOM   1545  OD2 ASP A 216      11.470 -24.753 -15.320  1.00 25.74           O
ATOM   1546  N   THR A 217      13.156 -22.428 -10.481  1.00 23.98           N
ATOM   1547  CA  THR A 217      12.936 -21.817  -9.176  1.00 23.62           C
ATOM   1548  C   THR A 217      13.365 -20.357  -9.186  1.00 21.71           C
ATOM   1549  O   THR A 217      14.506 -20.034  -9.535  1.00 24.27           O
ATOM   1550  CB  THR A 217      13.689 -22.588  -8.103  1.00 21.51           C
ATOM   1551  CG2 THR A 217      13.431 -21.989  -6.754  1.00 19.61           C
ATOM   1552  OG1 THR A 217      13.236 -23.944  -8.122  1.00 24.43           O
ATOM   1553  N   ALA A 218      12.425 -19.475  -8.852  1.00 20.57           N
ATOM   1554  CA  ALA A 218      12.614 -18.029  -8.930  1.00 21.24           C
ATOM   1555  C   ALA A 218      11.415 -17.349  -8.293  1.00 19.28           C
ATOM   1556  O   ALA A 218      10.389 -17.989  -8.047  1.00 19.69           O
ATOM   1557  CB  ALA A 218      12.766 -17.574 -10.384  1.00 17.87           C
ATOM   1558  N   VAL A 219      11.570 -16.061  -7.987  1.00 16.88           N
ATOM   1559  CA  VAL A 219      10.433 -15.176  -7.760  1.00 17.10           C
ATOM   1560  C   VAL A 219       9.941 -14.692  -9.118  1.00 16.48           C
ATOM   1561  O   VAL A 219      10.735 -14.243  -9.945  1.00 20.01           O
ATOM   1562  CB  VAL A 219      10.822 -13.995  -6.855  1.00 16.97           C
ATOM   1563  CG1 VAL A 219       9.695 -12.987  -6.777  1.00 18.12           C
ATOM   1564  CG2 VAL A 219      11.100 -14.446  -5.463  1.00 18.74           C
ATOM   1565  N   TYR A 220       8.639 -14.790  -9.372  1.00 17.13           N
ATOM   1566  CA  TYR A 220       8.073 -14.454 -10.672  1.00 17.49           C
ATOM   1567  C   TYR A 220       7.265 -13.172 -10.543  1.00 18.73           C
ATOM   1568  O   TYR A 220       6.370 -13.074  -9.691  1.00 19.21           O
ATOM   1569  CB  TYR A 220       7.212 -15.601 -11.220  1.00 18.83           C
ATOM   1570  CG  TYR A 220       8.016 -16.761 -11.828  1.00 16.95           C
ATOM   1571  CD1 TYR A 220       8.650 -17.697 -11.006  1.00 17.23           C
ATOM   1572  CD2 TYR A 220       8.114 -16.917 -13.201  1.00 18.56           C
ATOM   1573  CE1 TYR A 220       9.372 -18.742 -11.539  1.00 18.68           C
ATOM   1574  CE2 TYR A 220       8.843 -17.956 -13.758  1.00 18.54           C
ATOM   1575  CZ  TYR A 220       9.475 -18.871 -12.925  1.00 20.36           C
ATOM   1576  OH  TYR A 220      10.203 -19.911 -13.489  1.00 19.31           O
ATOM   1577  N   TYR A 221       7.594 -12.186 -11.364  1.00 15.25           N
ATOM   1578  CA  TYR A 221       6.909 -10.907 -11.346  1.00 18.32           C
ATOM   1579  C   TYR A 221       6.036 -10.765 -12.584  1.00 18.63           C
ATOM   1580  O   TYR A 221       6.451 -11.094 -13.698  1.00 17.76           O
ATOM   1581  CB  TYR A 221       7.902  -9.752 -11.325  1.00 18.54           C
ATOM   1582  CG  TYR A 221       8.842  -9.742 -10.144  1.00 19.45           C
ATOM   1583  CD1 TYR A 221       8.473  -9.168  -8.927  1.00 20.91           C
ATOM   1584  CD2 TYR A 221      10.104 -10.299 -10.246  1.00 17.43           C
ATOM   1585  CE1 TYR A 221       9.346  -9.152  -7.837  1.00 19.53           C
ATOM   1586  CE2 TYR A 221      10.970 -10.291  -9.164  1.00 22.38           C
ATOM   1587  CZ  TYR A 221      10.596  -9.722  -7.972  1.00 20.50           C
ATOM   1588  OH  TYR A 221      11.485  -9.724  -6.910  1.00 24.34           O
ATOM   1589  N   CYS A 222       4.841 -10.224 -12.412  1.00 22.54           N
ATOM   1590  CA  CYS A 222       4.163  -9.698 -13.579  1.00 18.58           C
ATOM   1591  C   CYS A 222       4.422  -8.208 -13.644  1.00 18.48           C
ATOM   1592  O   CYS A 222       4.618  -7.557 -12.624  1.00 17.72           O
ATOM   1593  CB  CYS A 222       2.663  -9.979 -13.564  1.00 18.93           C
ATOM   1594  SG  CYS A 222       1.774  -9.399 -12.172  1.00 28.08           S
ATOM   1595  N   ALA A 223       4.453  -7.673 -14.854  1.00 18.11           N
ATOM   1596  CA  ALA A 223       4.779  -6.264 -15.048  1.00 18.44           C
ATOM   1597  C   ALA A 223       4.064  -5.725 -16.269  1.00 19.44           C
ATOM   1598  O   ALA A 223       3.971  -6.403 -17.292  1.00 18.78           O
ATOM   1599  CB  ALA A 223       6.281  -6.054 -15.235  1.00 18.71           C
ATOM   1600  N   LYS A 224       3.632  -4.472 -16.170  1.00 19.94           N
ATOM   1601  CA  LYS A 224       2.865  -3.774 -17.188  1.00 19.39           C
ATOM   1602  C   LYS A 224       3.788  -2.874 -17.999  1.00 20.74           C
ATOM   1603  O   LYS A 224       4.603  -2.142 -17.421  1.00 21.47           O
ATOM   1604  CB  LYS A 224       1.758  -2.973 -16.506  1.00 19.86           C
ATOM   1605  CG  LYS A 224       1.162  -1.844 -17.305  1.00 22.72           C
ATOM   1606  CD  LYS A 224       0.400  -0.861 -16.402  1.00 24.67           C
ATOM   1607  CE  LYS A 224       0.102   0.445 -17.144  1.00 23.61           C
ATOM   1608  NZ  LYS A 224       1.346   1.050 -17.736  1.00 25.07           N
ATOM   1609  N   TYR A 225       3.692  -2.954 -19.331  1.00 21.08           N
ATOM   1610  CA  TYR A 225       4.419  -2.050 -20.214  1.00 20.15           C
ATOM   1611  C   TYR A 225       3.787  -0.667 -20.234  1.00 21.26           C
```

[1870]

```
ATOM   1612  O   TYR A 225       2.627  -0.472 -19.849  1.00 20.28           O
ATOM   1613  CB  TYR A 225       4.458  -2.576 -21.649  1.00 19.27           C
ATOM   1614  CG  TYR A 225       5.392  -3.727 -21.824  1.00 22.06           C
ATOM   1615  CD1 TYR A 225       6.743  -3.523 -22.018  1.00 23.45           C
ATOM   1616  CD2 TYR A 225       4.932  -5.027 -21.750  1.00 22.16           C
ATOM   1617  CE1 TYR A 225       7.609  -4.590 -22.182  1.00 24.56           C
ATOM   1618  CE2 TYR A 225       5.788  -6.098 -21.913  1.00 20.41           C
ATOM   1619  CZ  TYR A 225       7.121  -5.874 -22.133  1.00 24.78           C
ATOM   1620  OH  TYR A 225       7.963  -6.951 -22.287  1.00 26.35           O
ATOM   1621  N   ASP A 226       4.572   0.305 -20.703  1.00 22.95           N
ATOM   1622  CA  ASP A 226       4.099   1.672 -20.865  1.00 22.69           C
ATOM   1623  C   ASP A 226       4.832   2.330 -22.022  1.00 20.64           C
ATOM   1624  O   ASP A 226       6.013   2.071 -22.238  1.00 22.88           O
ATOM   1625  CB  ASP A 226       4.287   2.492 -19.583  1.00 22.68           C
ATOM   1626  CG  ASP A 226       3.648   3.855 -19.687  1.00 31.01           C
ATOM   1627  OD1 ASP A 226       2.457   3.915 -20.080  1.00 31.68           O
ATOM   1628  OD2 ASP A 226       4.330   4.875 -19.393  1.00 35.90           O
ATOM   1629  N   GLY A 227       4.126   3.170 -22.772  1.00 24.82           N
ATOM   1630  CA  GLY A 227       4.708   3.936 -23.860  1.00 23.04           C
ATOM   1631  C   GLY A 227       5.082   3.137 -25.087  1.00 21.82           C
ATOM   1632  O   GLY A 227       4.358   2.225 -25.493  1.00 24.96           O
ATOM   1633  N   ILE A 228       6.217   3.453 -25.708  1.00 22.32           N
ATOM   1634  CA  ILE A 228       6.622   2.775 -26.930  1.00 24.88           C
ATOM   1635  C   ILE A 228       8.028   2.209 -26.852  1.00 24.27           C
ATOM   1636  O   ILE A 228       8.475   1.584 -27.812  1.00 25.09           O
ATOM   1637  CB  ILE A 228       6.500   3.693 -28.161  1.00 24.70           C
ATOM   1638  CG1 ILE A 228       7.518   4.837 -28.076  1.00 28.62           C
ATOM   1639  CG2 ILE A 228       5.095   4.306 -28.230  1.00 23.08           C
ATOM   1640  CD1 ILE A 228       7.446   5.864 -29.224  1.00 29.36           C
ATOM   1641  N   TYR A 229       8.766   2.449 -25.765  1.00 22.45           N
ATOM   1642  CA  TYR A 229      10.160   2.038 -25.672  1.00 21.44           C
ATOM   1643  C   TYR A 229      10.361   0.774 -24.855  1.00 23.31           C
ATOM   1644  O   TYR A 229      11.505   0.449 -24.504  1.00 22.69           O
ATOM   1645  CB  TYR A 229      11.009   3.175 -25.120  1.00 22.81           C
ATOM   1646  CG  TYR A 229      11.288   4.226 -26.162  1.00 26.55           C
ATOM   1647  CD1 TYR A 229      12.318   4.048 -27.088  1.00 26.67           C
ATOM   1648  CD2 TYR A 229      10.524   5.375 -26.242  1.00 35.17           C
ATOM   1649  CE1 TYR A 229      12.584   4.998 -28.064  1.00 27.08           C
ATOM   1650  CE2 TYR A 229      10.777   6.335 -27.213  1.00 32.06           C
ATOM   1651  CZ  TYR A 229      11.814   6.143 -28.125  1.00 29.90           C
ATOM   1652  OH  TYR A 229      12.086   7.090 -29.103  1.00 33.74           O
ATOM   1653  N   GLY A 230       9.295   0.035 -24.561  1.00 21.65           N
ATOM   1654  CA  GLY A 230       9.454  -1.252 -23.924  1.00 21.94           C
ATOM   1655  C   GLY A 230       9.754  -1.193 -22.448  1.00 22.86           C
ATOM   1656  O   GLY A 230      10.232  -2.179 -21.888  1.00 24.29           O
ATOM   1657  N   GLU A 231       9.484  -0.068 -21.799  1.00 21.72           N
ATOM   1658  CA  GLU A 231       9.664   0.059 -20.366  1.00 19.77           C
ATOM   1659  C   GLU A 231       8.513  -0.572 -19.579  1.00 21.27           C
ATOM   1660  O   GLU A 231       7.350  -0.527 -19.992  1.00 21.15           O
ATOM   1661  CB  GLU A 231       9.837   1.529 -19.994  1.00 20.84           C
ATOM   1662  CG  GLU A 231       8.655   2.421 -20.217  1.00 22.35           C
ATOM   1663  CD  GLU A 231       8.647   3.100 -21.574  1.00 22.01           C
ATOM   1664  OE1 GLU A 231       9.152   2.530 -22.543  1.00 22.62           O
ATOM   1665  OE2 GLU A 231       8.071   4.194 -21.693  1.00 22.03           O
ATOM   1666  N   LEU A 232       8.845  -1.168 -18.438  1.00 21.05           N
ATOM   1667  CA  LEU A 232       7.860  -1.748 -17.528  1.00 21.91           C
ATOM   1668  C   LEU A 232       7.714  -0.821 -16.329  1.00 22.10           C
ATOM   1669  O   LEU A 232       8.588  -0.779 -15.455  1.00 21.23           O
ATOM   1670  CB  LEU A 232       8.282  -3.137 -17.089  1.00 20.21           C
ATOM   1671  CG  LEU A 232       8.402  -4.159 -18.213  1.00 20.52           C
ATOM   1672  CD1 LEU A 232       9.113  -5.415 -17.711  1.00 19.70           C
ATOM   1673  CD2 LEU A 232       7.043  -4.480 -18.765  1.00 18.85           C
ATOM   1674  N   ASP A 233       6.614  -0.069 -16.275  1.00 23.47           N
ATOM   1675  CA  ASP A 233       6.499   0.962 -15.252  1.00 24.17           C
ATOM   1676  C   ASP A 233       5.799   0.501 -13.969  1.00 23.31           C
ATOM   1677  O   ASP A 233       5.865   1.206 -12.965  1.00 24.05           O
ATOM   1678  CB  ASP A 233       5.813   2.220 -15.844  1.00 24.54           C
ATOM   1679  CG  ASP A 233       4.332   2.012 -16.188  1.00 26.54           C
```

[1871]

```
ATOM   1680  OD2 ASP A 233       3.616   3.015 -16.380  1.00 30.62           O
ATOM   1681  OD1 ASP A 233       3.868   0.868 -16.315  1.00 27.10           O
ATOM   1682  N   PHE A 234       5.147  -0.657 -13.943  1.00 23.42           N
ATOM   1683  CA  PHE A 234       4.527  -1.113 -12.707  1.00 22.51           C
ATOM   1684  C   PHE A 234       4.654  -2.626 -12.616  1.00 19.94           C
ATOM   1685  O   PHE A 234       4.438  -3.332 -13.608  1.00 20.90           O
ATOM   1686  CB  PHE A 234       3.045  -0.669 -12.612  1.00 24.48           C
ATOM   1687  CG  PHE A 234       2.487  -0.775 -11.223  1.00 28.27           C
ATOM   1688  CD2 PHE A 234       1.870  -1.942 -10.770  1.00 27.62           C
ATOM   1689  CD1 PHE A 234       2.637   0.274 -10.331  1.00 33.02           C
ATOM   1690  CE2 PHE A 234       1.395  -2.049  -9.445  1.00 30.92           C
ATOM   1691  CE1 PHE A 234       2.161   0.171  -8.990  1.00 34.92           C
ATOM   1692  CZ  PHE A 234       1.548  -0.986  -8.551  1.00 31.58           C
ATOM   1693  N   TRP A 235       4.994  -3.120 -11.415  1.00 21.63           N
ATOM   1694  CA  TRP A 235       5.324  -4.518 -11.190  1.00 18.01           C
ATOM   1695  C   TRP A 235       4.491  -5.109 -10.068  1.00 19.48           C
ATOM   1696  O   TRP A 235       4.148  -4.428  -9.106  1.00 20.06           O
ATOM   1697  CB  TRP A 235       6.774  -4.683 -10.821  1.00 22.90           C
ATOM   1698  CG  TRP A 235       7.772  -4.256 -11.889  1.00 20.51           C
ATOM   1699  CD1 TRP A 235       7.947  -3.005 -12.420  1.00 21.16           C
ATOM   1700  CD2 TRP A 235       8.753  -5.088 -12.499  1.00 17.71           C
ATOM   1701  CE2 TRP A 235       9.485  -4.294 -13.393  1.00 16.70           C
ATOM   1702  CE3 TRP A 235       9.082  -6.428 -12.371  1.00 18.87           C
ATOM   1703  NE1 TRP A 235       8.970  -3.024 -13.339  1.00 18.06           N
ATOM   1704  CZ2 TRP A 235      10.511  -4.802 -14.162  1.00 17.81           C
ATOM   1705  CZ3 TRP A 235      10.100  -6.933 -13.150  1.00 19.28           C
ATOM   1706  CH2 TRP A 235      10.795  -6.131 -14.031  1.00 18.92           C
ATOM   1707  N   GLY A 236       4.185  -6.390 -10.180  1.00 20.25           N
ATOM   1708  CA  GLY A 236       3.678  -7.115  -9.033  1.00 22.03           C
ATOM   1709  C   GLY A 236       4.736  -7.292  -7.958  1.00 21.08           C
ATOM   1710  O   GLY A 236       5.933  -7.114  -8.172  1.00 21.61           O
ATOM   1711  N   CYS A 237       4.294  -7.709  -6.781  1.00 20.15           N
ATOM   1712  CA  CYS A 237       5.239  -7.817  -5.678  1.00 22.77           C
ATOM   1713  C   CYS A 237       6.115  -9.053  -5.763  1.00 24.22           C
ATOM   1714  O   CYS A 237       7.125  -9.103  -5.056  1.00 22.52           O
ATOM   1715  CB  CYS A 237       4.496  -7.847  -4.339  1.00 22.99           C
ATOM   1716  SG  CYS A 237       3.598  -6.315  -3.995  1.00 27.32           S
ATOM   1717  N   GLY A 238       5.797  -9.998  -6.637  1.00 21.07           N
ATOM   1718  CA  GLY A 238       6.513 -11.239  -6.846  1.00 17.78           C
ATOM   1719  C   GLY A 238       5.835 -12.397  -6.136  1.00 24.59           C
ATOM   1720  O   GLY A 238       5.225 -12.244  -5.074  1.00 23.76           O
ATOM   1721  N   THR A 239       5.959 -13.584  -6.709  1.00 21.51           N
ATOM   1722  CA  THR A 239       5.478 -14.787  -6.043  1.00 22.80           C
ATOM   1723  C   THR A 239       6.531 -15.865  -6.244  1.00 19.92           C
ATOM   1724  O   THR A 239       7.068 -15.999  -7.336  1.00 21.62           O
ATOM   1725  CB  THR A 239       4.090 -15.216  -6.593  1.00 23.23           C
ATOM   1726  CG2 THR A 239       4.140 -15.576  -8.034  1.00 25.02           C
ATOM   1727  OG1 THR A 239       3.599 -16.351  -5.868  1.00 32.63           O
ATOM   1728  N   LEU A 240       6.852 -16.611  -5.193  1.00 22.80           N
ATOM   1729  CA  LEU A 240       7.981 -17.542  -5.232  1.00 23.64           C
ATOM   1730  C   LEU A 240       7.541 -18.904  -5.776  1.00 21.80           C
ATOM   1731  O   LEU A 240       6.571 -19.494  -5.295  1.00 21.73           O
ATOM   1732  CB  LEU A 240       8.608 -17.687  -3.831  1.00 23.66           C
ATOM   1733  CG  LEU A 240       9.743 -18.735  -3.632  1.00 23.79           C
ATOM   1734  CD1 LEU A 240      10.958 -18.467  -4.513  1.00 23.05           C
ATOM   1735  CD2 LEU A 240      10.167 -18.914  -2.179  1.00 22.54           C
ATOM   1736  N   VAL A 241       8.263 -19.399  -6.776  1.00 19.46           N
ATOM   1737  CA  VAL A 241       8.050 -20.727  -7.334  1.00 22.53           C
ATOM   1738  C   VAL A 241       9.294 -21.561  -7.047  1.00 23.68           C
ATOM   1739  O   VAL A 241      10.392 -21.211  -7.487  1.00 23.04           O
ATOM   1740  CB  VAL A 241       7.772 -20.654  -8.840  1.00 22.89           C
ATOM   1741  CG1 VAL A 241       7.584 -22.044  -9.415  1.00 23.62           C
ATOM   1742  CG2 VAL A 241       6.560 -19.764  -9.104  1.00 21.29           C
ATOM   1743  N   THR A 242       9.134 -22.655  -6.305  1.00 26.70           N
ATOM   1744  CA  THR A 242      10.238 -23.550  -5.950  1.00 27.09           C
ATOM   1745  C   THR A 242      10.007 -24.915  -6.574  1.00 26.71           C
ATOM   1746  O   THR A 242       8.987 -25.552  -6.310  1.00 28.51           O
ATOM   1747  CB  THR A 242      10.371 -23.703  -4.431  1.00 27.65           C
```

[1872]

```
ATOM   1748  CG2 THR A 242      11.581 -24.545  -4.044  1.00 25.26           C
ATOM   1749  OG1 THR A 242      10.439 -22.413  -3.808  1.00 29.34           O
ATOM   1750  N   VAL A 243      10.940 -25.356  -7.402  1.00 26.69           N
ATOM   1751  CA  VAL A 243      10.928 -26.706  -7.957  1.00 30.48           C
ATOM   1752  C   VAL A 243      12.095 -27.473  -7.347  1.00 32.80           C
ATOM   1753  O   VAL A 243      13.247 -27.167  -7.674  1.00 32.49           O
ATOM   1754  CB  VAL A 243      11.046 -26.701  -9.486  1.00 29.28           C
ATOM   1755  CG1 VAL A 243      10.908 -28.132 -10.015  1.00 28.84           C
ATOM   1756  CG2 VAL A 243      10.021 -25.798 -10.100  1.00 25.17           C
ATOM   1757  N   SER A 244      11.839 -28.493  -6.519  1.00 35.11           N
ATOM   1758  CA  SER A 244      12.913 -29.412  -6.108  1.00 41.38           C
ATOM   1759  C   SER A 244      12.277 -30.722  -5.655  1.00 41.69           C
ATOM   1760  O   SER A 244      11.162 -30.677  -5.160  1.00 39.63           O
ATOM   1761  CB  SER A 244      13.714 -28.791  -4.958  1.00 43.34           C
ATOM   1762  OG  SER A 244      14.553 -29.761  -4.379  1.00 48.60           O
ATOM   1763  N   SER A 245      12.971 -31.885  -5.745  1.00 44.54           N
ATOM   1764  CA  SER A 245      12.415 -33.094  -4.983  1.00 42.02           C
ATOM   1765  C   SER A 245      11.445 -32.886  -3.806  1.00 48.08           C
ATOM   1766  O   SER A 245      11.714 -33.364  -2.691  1.00 51.31           O
ATOM   1767  CB  SER A 245      13.499 -33.991  -4.420  1.00 47.67           C
ATOM   1768  OG  SER A 245      14.043 -34.835  -5.427  1.00 60.15           O
TER    1769       SER A 245
ATOM   1769  N   ASP B   1      -2.454   0.282   4.553  1.00 40.41           N
ATOM   1770  CA  ASP B   1      -1.615  -0.126   5.666  1.00 37.22           C
ATOM   1771  C   ASP B   1      -1.412  -1.618   5.755  1.00 38.24           C
ATOM   1772  O   ASP B   1      -2.338  -2.405   5.526  1.00 35.98           O
ATOM   1773  CB  ASP B   1      -2.248   0.284   6.991  1.00 39.28           C
ATOM   1774  CG  ASP B   1      -2.235   1.753   7.213  1.00 45.59           C
ATOM   1775  OD2 ASP B   1      -2.439   2.149   8.387  1.00 52.19           O
ATOM   1776  OD1 ASP B   1      -2.037   2.502   6.225  1.00 41.41           O
ATOM   1777  N   ILE B   2      -0.221  -2.006   6.179  1.00 37.48           N
ATOM   1778  CA  ILE B   2       0.052  -3.394   6.496  1.00 31.17           C
ATOM   1779  C   ILE B   2      -0.161  -3.553   7.992  1.00 28.02           C
ATOM   1780  O   ILE B   2       0.384  -2.780   8.786  1.00 27.90           O
ATOM   1781  CB  ILE B   2       1.467  -3.792   6.061  1.00 27.88           C
ATOM   1782  CG1 ILE B   2       1.561  -3.649   4.549  1.00 27.32           C
ATOM   1783  CG2 ILE B   2       1.776  -5.211   6.524  1.00 26.86           C
ATOM   1784  CD1 ILE B   2       2.876  -3.972   3.966  1.00 24.31           C
ATOM   1785  N   GLN B   3      -1.007  -4.509   8.376  1.00 29.47           N
ATOM   1786  CA  GLN B   3      -1.277  -4.780   9.779  1.00 29.26           C
ATOM   1787  C   GLN B   3      -0.243  -5.755  10.311  1.00 30.10           C
ATOM   1788  O   GLN B   3       0.021  -6.788   9.687  1.00 27.01           O
ATOM   1789  CB  GLN B   3      -2.681  -5.353   9.963  1.00 32.00           C
ATOM   1790  CG  GLN B   3      -3.759  -4.413   9.416  1.00 38.41           C
ATOM   1791  CD  GLN B   3      -4.073  -3.285  10.356  1.00 47.81           C
ATOM   1792  NE2 GLN B   3      -4.949  -2.406   9.941  1.00 52.28           N
ATOM   1793  OE1 GLN B   3      -3.540  -3.197  11.457  1.00 49.19           O
ATOM   1794  N   MET B   4       0.359  -5.408  11.446  1.00 27.58           N
ATOM   1795  CA  MET B   4       1.298  -6.281  12.128  1.00 25.78           C
ATOM   1796  C   MET B   4       0.651  -6.770  13.408  1.00 26.67           C
ATOM   1797  O   MET B   4       0.241  -5.962  14.250  1.00 26.67           O
ATOM   1798  CB  MET B   4       2.618  -5.562  12.419  1.00 25.32           C
ATOM   1799  CG  MET B   4       3.268  -5.016  11.163  1.00 23.77           C
ATOM   1800  SD  MET B   4       3.643  -6.238   9.895  1.00 25.94           S
ATOM   1801  CE  MET B   4       4.931  -7.220  10.677  1.00 23.00           C
ATOM   1802  N   THR B   5       0.593  -8.087  13.563  1.00 25.76           N
ATOM   1803  CA  THR B   5      -0.043  -8.722  14.713  1.00 26.55           C
ATOM   1804  C   THR B   5       0.967  -9.581  15.453  1.00 25.05           C
ATOM   1805  O   THR B   5       1.509 -10.535  14.883  1.00 25.25           O
ATOM   1806  CB  THR B   5      -1.205  -9.598  14.259  1.00 29.01           C
ATOM   1807  CG2 THR B   5      -2.170  -9.845  15.408  1.00 27.82           C
ATOM   1808  OG1 THR B   5      -1.876  -8.950  13.174  1.00 32.80           O
ATOM   1809  N   GLN B   6       1.185  -9.272  16.723  1.00 26.27           N
ATOM   1810  CA  GLN B   6       2.050 -10.073  17.560  1.00 25.88           C
ATOM   1811  C   GLN B   6       1.204 -11.002  18.409  1.00 25.83           C
ATOM   1812  O   GLN B   6       0.101 -10.647  18.824  1.00 28.06           O
ATOM   1813  CB  GLN B   6       2.918  -9.185  18.459  1.00 23.16           C
ATOM   1814  CG  GLN B   6       3.760  -8.245  17.653  1.00 23.15           C
```

[1873]

```
ATOM   1815  CD  GLN B   6       4.666  -7.353  18.476  1.00 22.57           C
ATOM   1816  NE2 GLN B   6       5.245  -7.902  19.548  1.00 25.20           N
ATOM   1817  OE1 GLN B   6       4.859  -6.188  18.145  1.00 23.89           O
ATOM   1818  N   SER B   7       1.742 -12.182  18.690  1.00 24.45           N
ATOM   1819  CA  SER B   7       1.124 -13.086  19.647  1.00 25.31           C
ATOM   1820  C   SER B   7       2.215 -13.759  20.463  1.00 26.14           C
ATOM   1821  O   SER B   7       3.287 -14.052  19.937  1.00 30.45           O
ATOM   1822  CB  SER B   7       0.288 -14.139  18.936  1.00 27.32           C
ATOM   1823  OG  SER B   7       1.139 -15.052  18.287  1.00 33.02           O
ATOM   1824  N   PRO B   8       1.974 -13.973  21.763  1.00 27.50           N
ATOM   1825  CA  PRO B   8       0.760 -13.532  22.449  1.00 23.73           C
ATOM   1826  C   PRO B   8       0.862 -12.056  22.789  1.00 28.41           C
ATOM   1827  O   PRO B   8       1.919 -11.466  22.535  1.00 29.72           O
ATOM   1828  CB  PRO B   8       0.759 -14.385  23.705  1.00 26.35           C
ATOM   1829  CG  PRO B   8       2.242 -14.557  23.994  1.00 27.47           C
ATOM   1830  CD  PRO B   8       2.932 -14.625  22.681  1.00 23.47           C
ATOM   1831  N   SER B   9      -0.191 -11.453  23.353  1.00 29.21           N
ATOM   1832  CA  SER B   9      -0.062 -10.061  23.759  1.00 26.99           C
ATOM   1833  C   SER B   9       0.713  -9.937  25.050  1.00 25.71           C
ATOM   1834  O   SER B   9       1.315  -8.887  25.314  1.00 26.63           O
ATOM   1835  CB  SER B   9      -1.425  -9.410  23.879  1.00 29.60           C
ATOM   1836  OG  SER B   9      -1.983  -9.285  22.583  1.00 35.39           O
ATOM   1837  N   SER B  10       0.706 -10.982  25.868  1.00 25.17           N
ATOM   1838  CA  SER B  10       1.491 -10.966  27.086  1.00 26.47           C
ATOM   1839  C   SER B  10       1.823 -12.405  27.392  1.00 25.65           C
ATOM   1840  O   SER B  10       1.084 -13.318  27.022  1.00 29.93           O
ATOM   1841  CB  SER B  10       0.791 -10.304  28.294  1.00 29.14           C
ATOM   1842  OG  SER B  10      -0.184 -11.142  28.889  1.00 33.19           O
ATOM   1843  N   LEU B  11       2.928 -12.598  28.093  1.00 28.71           N
ATOM   1844  CA  LEU B  11       3.482 -13.927  28.255  1.00 26.40           C
ATOM   1845  C   LEU B  11       4.164 -13.968  29.608  1.00 29.93           C
ATOM   1846  O   LEU B  11       4.900 -13.040  29.964  1.00 30.44           O
ATOM   1847  CB  LEU B  11       4.440 -14.240  27.095  1.00 24.45           C
ATOM   1848  CG  LEU B  11       5.241 -15.533  27.144  1.00 30.22           C
ATOM   1849  CD1 LEU B  11       5.403 -16.172  25.773  1.00 35.52           C
ATOM   1850  CD2 LEU B  11       6.603 -15.165  27.680  1.00 27.84           C
ATOM   1851  N   SER B  12       3.841 -14.991  30.393  1.00 30.38           N
ATOM   1852  CA  SER B  12       4.487 -15.213  31.676  1.00 33.38           C
ATOM   1853  C   SER B  12       5.514 -16.313  31.514  1.00 29.93           C
ATOM   1854  O   SER B  12       5.210 -17.369  30.953  1.00 31.99           O
ATOM   1855  CB  SER B  12       3.481 -15.582  32.760  1.00 33.92           C
ATOM   1856  OG  SER B  12       2.591 -14.505  32.939  1.00 39.88           O
ATOM   1857  N   ALA B  13       6.722 -16.065  32.014  1.00 31.86           N
ATOM   1858  CA  ALA B  13       7.817 -17.007  31.859  1.00 29.78           C
ATOM   1859  C   ALA B  13       8.737 -16.884  33.060  1.00 29.63           C
ATOM   1860  O   ALA B  13       8.678 -15.912  33.822  1.00 30.16           O
ATOM   1861  CB  ALA B  13       8.594 -16.756  30.572  1.00 27.29           C
ATOM   1862  N   SER B  14       9.620 -17.867  33.191  1.00 27.92           N
ATOM   1863  CA  SER B  14      10.575 -17.928  34.283  1.00 28.36           C
ATOM   1864  C   SER B  14      11.974 -17.691  33.746  1.00 24.83           C
ATOM   1865  O   SER B  14      12.237 -17.897  32.562  1.00 29.64           O
ATOM   1866  CB  SER B  14      10.526 -19.295  34.958  1.00 29.98           C
ATOM   1867  OG  SER B  14       9.193 -19.633  35.262  1.00 33.51           O
ATOM   1868  N   VAL B  15      12.864 -17.209  34.617  1.00 24.51           N
ATOM   1869  CA  VAL B  15      14.265 -17.108  34.233  1.00 24.42           C
ATOM   1870  C   VAL B  15      14.724 -18.482  33.774  1.00 23.67           C
ATOM   1871  O   VAL B  15      14.425 -19.506  34.403  1.00 24.32           O
ATOM   1872  CB  VAL B  15      15.115 -16.559  35.398  1.00 22.95           C
ATOM   1873  CG1 VAL B  15      16.594 -16.555  35.049  1.00 21.00           C
ATOM   1874  CG2 VAL B  15      14.667 -15.167  35.760  1.00 21.93           C
ATOM   1875  N   GLY B  16      15.399 -18.512  32.637  1.00 21.70           N
ATOM   1876  CA  GLY B  16      15.873 -19.730  32.034  1.00 22.67           C
ATOM   1877  C   GLY B  16      14.989 -20.319  30.950  1.00 23.50           C
ATOM   1878  O   GLY B  16      15.476 -21.151  30.179  1.00 27.16           O
ATOM   1879  N   ASP B  17      13.718 -19.922  30.856  1.00 25.60           N
ATOM   1880  CA  ASP B  17      12.854 -20.483  29.818  1.00 25.26           C
ATOM   1881  C   ASP B  17      13.337 -20.104  28.434  1.00 23.75           C
ATOM   1882  O   ASP B  17      13.893 -19.026  28.224  1.00 21.83           O
```

[1874]

```
ATOM   1883  CB  ASP B  17      11.414 -19.993  29.940  1.00 26.72           C
ATOM   1884  CG  ASP B  17      10.684 -20.598  31.119  1.00 31.54           C
ATOM   1885  OD1 ASP B  17      11.205 -21.571  31.716  1.00 31.36           O
ATOM   1886  OD2 ASP B  17       9.575 -20.096  31.436  1.00 34.08           O
ATOM   1887  N   ARG B  18      13.054 -20.983  27.468  1.00 24.50           N
ATOM   1888  CA  ARG B  18      13.182 -20.642  26.061  1.00 23.60           C
ATOM   1889  C   ARG B  18      11.864 -20.002  25.644  1.00 25.10           C
ATOM   1890  O   ARG B  18      10.816 -20.651  25.673  1.00 28.27           O
ATOM   1891  CB  ARG B  18      13.481 -21.876  25.208  1.00 22.20           C
ATOM   1892  CG  ARG B  18      13.278 -21.625  23.692  1.00 23.15           C
ATOM   1893  CD  ARG B  18      13.492 -22.888  22.867  1.00 20.63           C
ATOM   1894  NE  ARG B  18      13.676 -22.628  21.448  1.00 21.33           N
ATOM   1895  CZ  ARG B  18      14.839 -22.334  20.865  1.00 20.83           C
ATOM   1896  NH1 ARG B  18      15.945 -22.256  21.588  1.00 21.65           N
ATOM   1897  NH2 ARG B  18      14.898 -22.117  19.559  1.00 21.72           N
ATOM   1898  N   VAL B  19      11.926 -18.756  25.202  1.00 19.73           N
ATOM   1899  CA  VAL B  19      10.745 -17.949  24.970  1.00 19.90           C
ATOM   1900  C   VAL B  19      10.652 -17.608  23.484  1.00 22.72           C
ATOM   1901  O   VAL B  19      11.655 -17.232  22.866  1.00 23.42           O
ATOM   1902  CB  VAL B  19      10.843 -16.696  25.858  1.00 19.84           C
ATOM   1903  CG1 VAL B  19       9.787 -15.667  25.506  1.00 20.86           C
ATOM   1904  CG2 VAL B  19      10.723 -17.100  27.303  1.00 22.33           C
ATOM   1905  N   THR B  20       9.447 -17.724  22.901  1.00 21.46           N
ATOM   1906  CA  THR B  20       9.242 -17.424  21.482  1.00 22.85           C
ATOM   1907  C   THR B  20       8.054 -16.493  21.325  1.00 23.12           C
ATOM   1908  O   THR B  20       6.990 -16.735  21.911  1.00 26.76           O
ATOM   1909  CB  THR B  20       9.040 -18.690  20.655  1.00 25.28           C
ATOM   1910  CG2 THR B  20       8.694 -18.353  19.214  1.00 26.68           C
ATOM   1911  OG1 THR B  20      10.264 -19.458  20.621  1.00 26.06           O
ATOM   1912  N   ILE B  21       8.245 -15.415  20.562  1.00 22.29           N
ATOM   1913  CA  ILE B  21       7.245 -14.392  20.256  1.00 25.00           C
ATOM   1914  C   ILE B  21       6.974 -14.423  18.761  1.00 22.46           C
ATOM   1915  O   ILE B  21       7.911 -14.505  17.959  1.00 21.96           O
ATOM   1916  CB  ILE B  21       7.736 -12.985  20.653  1.00 19.29           C
ATOM   1917  CG1 ILE B  21       7.995 -12.876  22.135  1.00 24.93           C
ATOM   1918  CG2 ILE B  21       6.765 -11.878  20.188  1.00 27.97           C
ATOM   1919  CD1 ILE B  21       8.474 -11.485  22.443  1.00 24.78           C
ATOM   1920  N   THR B  22       5.716 -14.293  18.379  1.00 24.11           N
ATOM   1921  CA  THR B  22       5.354 -14.340  16.977  1.00 24.76           C
ATOM   1922  C   THR B  22       4.839 -12.980  16.499  1.00 22.77           C
ATOM   1923  O   THR B  22       4.269 -12.198  17.265  1.00 22.69           O
ATOM   1924  CB  THR B  22       4.325 -15.442  16.740  1.00 24.32           C
ATOM   1925  CG2 THR B  22       3.711 -15.377  15.368  1.00 31.23           C
ATOM   1926  OG1 THR B  22       4.987 -16.709  16.906  1.00 25.55           O
ATOM   1927  N   CYS B  23       5.123 -12.689  15.234  1.00 22.18           N
ATOM   1928  CA  CYS B  23       4.708 -11.470  14.567  1.00 22.35           C
ATOM   1929  C   CYS B  23       4.276 -11.836  13.159  1.00 24.66           C
ATOM   1930  O   CYS B  23       5.017 -12.484  12.407  1.00 23.81           O
ATOM   1931  CB  CYS B  23       5.846 -10.448  14.553  1.00 20.48           C
ATOM   1932  SG  CYS B  23       5.517  -8.976  13.597  1.00 30.31           S
ATOM   1933  N   ARG B  24       3.085 -11.400  12.784  1.00 24.14           N
ATOM   1934  CA  ARG B  24       2.500 -11.784  11.514  1.00 22.23           C
ATOM   1935  C   ARG B  24       2.092 -10.543  10.740  1.00 22.03           C
ATOM   1936  O   ARG B  24       1.496  -9.635  11.317  1.00 23.10           O
ATOM   1937  CB  ARG B  24       1.318 -12.670  11.782  1.00 27.36           C
ATOM   1938  CG  ARG B  24       0.575 -13.047  10.569  1.00 29.66           C
ATOM   1939  CD  ARG B  24       0.102 -14.508  10.718  1.00 38.91           C
ATOM   1940  NE  ARG B  24      -1.201 -14.712  10.128  1.00 52.59           N
ATOM   1941  CZ  ARG B  24      -2.027 -15.685  10.506  1.00 51.08           C
ATOM   1942  NH1 ARG B  24      -1.747 -16.580  11.452  1.00 44.99           N
ATOM   1943  NH2 ARG B  24      -3.203 -15.769   9.914  1.00 50.15           N
ATOM   1944  N   ALA B  25       2.409 -10.497   9.446  1.00 21.08           N
ATOM   1945  CA  ALA B  25       2.117  -9.344   8.604  1.00 21.82           C
ATOM   1946  C   ALA B  25       0.929  -9.646   7.705  1.00 24.58           C
ATOM   1947  O   ALA B  25       0.758 -10.779   7.242  1.00 23.12           O
ATOM   1948  CB  ALA B  25       3.320  -8.942   7.750  1.00 21.19           C
ATOM   1949  N   SER B  26       0.106  -8.627   7.464  1.00 25.64           N
ATOM   1950  CA  SER B  26      -1.083  -8.818   6.647  1.00 23.94           C
```

[1875]

```
ATOM   1951  C   SER B  26      -0.784  -9.029   5.175  1.00 23.42           C
ATOM   1952  O   SER B  26      -1.682  -9.426   4.434  1.00 25.36           O
ATOM   1953  CB  SER B  26      -2.015  -7.623   6.854  1.00 28.65           C
ATOM   1954  OG  SER B  26      -1.378  -6.386   6.567  1.00 29.50           O
ATOM   1955  N   GLN B  27       0.440  -8.787   4.727  1.00 27.00           N
ATOM   1956  CA  GLN B  27       0.873  -9.158   3.385  1.00 26.02           C
ATOM   1957  C   GLN B  27       2.383  -9.343   3.441  1.00 24.09           C
ATOM   1958  O   GLN B  27       3.027  -8.991   4.427  1.00 25.74           O
ATOM   1959  CB  GLN B  27       0.460  -8.120   2.345  1.00 29.07           C
ATOM   1960  CG  GLN B  27       1.328  -6.904   2.295  1.00 31.25           C
ATOM   1961  CD  GLN B  27       0.876  -5.935   1.218  1.00 31.30           C
ATOM   1962  NE2 GLN B  27       1.533  -5.963   0.041  1.00 26.69           N
ATOM   1963  OE1 GLN B  27      -0.065  -5.167   1.446  1.00 35.76           O
ATOM   1964  N   SER B  28       2.950  -9.917   2.397  1.00 21.87           N
ATOM   1965  CA  SER B  28       4.375 -10.205   2.434  1.00 24.22           C
ATOM   1966  C   SER B  28       5.197  -8.931   2.587  1.00 25.30           C
ATOM   1967  O   SER B  28       4.963  -7.941   1.890  1.00 22.52           O
ATOM   1968  CB  SER B  28       4.802 -10.923   1.168  1.00 24.71           C
ATOM   1969  OG  SER B  28       6.203 -11.143   1.217  1.00 28.32           O
ATOM   1970  N   ILE B  29       6.158  -8.961   3.512  1.00 23.18           N
ATOM   1971  CA  ILE B  29       7.089  -7.861   3.736  1.00 21.18           C
ATOM   1972  C   ILE B  29       8.538  -8.310   3.538  1.00 20.82           C
ATOM   1973  O   ILE B  29       9.451  -7.642   3.988  1.00 21.76           O
ATOM   1974  CB  ILE B  29       6.914  -7.260   5.139  1.00 20.31           C
ATOM   1975  CG1 ILE B  29       7.126  -8.330   6.244  1.00 19.32           C
ATOM   1976  CG2 ILE B  29       5.567  -6.605   5.283  1.00 21.53           C
ATOM   1977  CD1 ILE B  29       7.071  -7.735   7.690  1.00 18.69           C
ATOM   1978  N   SER B  30       8.750  -9.459   2.906  1.00 21.81           N
ATOM   1979  CA  SER B  30      10.081 -10.017   2.693  1.00 19.80           C
ATOM   1980  C   SER B  30      10.832 -10.099   4.004  1.00 20.52           C
ATOM   1981  O   SER B  30      10.384 -10.765   4.941  1.00 19.34           O
ATOM   1982  CB  SER B  30      10.869  -9.208   1.665  1.00 19.68           C
ATOM   1983  OG  SER B  30      10.291  -9.349   0.385  1.00 20.89           O
ATOM   1984  N   SER B  31      11.979  -9.427   4.096  1.00 22.79           N
ATOM   1985  CA  SER B  31      12.747  -9.418   5.336  1.00 21.28           C
ATOM   1986  C   SER B  31      12.769  -8.059   6.001  1.00 16.87           C
ATOM   1987  O   SER B  31      13.533  -7.861   6.942  1.00 21.35           O
ATOM   1988  CB  SER B  31      14.176  -9.881   5.075  1.00 22.61           C
ATOM   1989  OG  SER B  31      14.174 -11.233   4.674  1.00 23.99           O
ATOM   1990  N   TYR B  32      11.866  -7.159   5.613  1.00 18.84           N
ATOM   1991  CA  TYR B  32      11.835  -5.809   6.159  1.00 18.37           C
ATOM   1992  C   TYR B  32      11.058  -5.800   7.473  1.00 19.13           C
ATOM   1993  O   TYR B  32      10.033  -5.135   7.638  1.00 22.31           O
ATOM   1994  CB  TYR B  32      11.258  -4.856   5.132  1.00 20.23           C
ATOM   1995  CG  TYR B  32      12.216  -4.613   3.983  1.00 22.21           C
ATOM   1996  CD2 TYR B  32      12.086  -5.316   2.785  1.00 21.57           C
ATOM   1997  CD1 TYR B  32      13.274  -3.716   4.106  1.00 21.56           C
ATOM   1998  CE2 TYR B  32      12.978  -5.118   1.737  1.00 23.28           C
ATOM   1999  CE1 TYR B  32      14.171  -3.509   3.060  1.00 22.32           C
ATOM   2000  CZ  TYR B  32      14.018  -4.217   1.882  1.00 22.45           C
ATOM   2001  OH  TYR B  32      14.884  -4.032   0.850  1.00 23.29           O
ATOM   2002  N   LEU B  33      11.634  -6.480   8.460  1.00 16.52           N
ATOM   2003  CA  LEU B  33      11.005  -6.679   9.763  1.00 17.83           C
ATOM   2004  C   LEU B  33      12.058  -6.489  10.843  1.00 21.41           C
ATOM   2005  O   LEU B  33      13.082  -7.185  10.838  1.00 20.06           O
ATOM   2006  CB  LEU B  33      10.402  -8.087   9.838  1.00 20.09           C
ATOM   2007  CG  LEU B  33       9.460  -8.454  10.967  1.00 17.34           C
ATOM   2008  CD1 LEU B  33      10.236  -8.882  12.205  1.00 18.67           C
ATOM   2009  CD2 LEU B  33       8.562  -7.267  11.252  1.00 17.50           C
ATOM   2010  N   ASN B  34      11.796  -5.564  11.769  1.00 16.77           N
ATOM   2011  CA  ASN B  34      12.701  -5.217  12.857  1.00 17.57           C
ATOM   2012  C   ASN B  34      12.043  -5.508  14.200  1.00 19.08           C
ATOM   2013  O   ASN B  34      10.815  -5.419  14.337  1.00 19.53           O
ATOM   2014  CB  ASN B  34      13.092  -3.729  12.782  1.00 17.93           C
ATOM   2015  CG  ASN B  34      13.608  -3.338  11.431  1.00 18.61           C
ATOM   2016  ND2 ASN B  34      12.926  -2.416  10.771  1.00 22.31           N
ATOM   2017  OD1 ASN B  34      14.584  -3.914  10.942  1.00 24.23           O
ATOM   2018  N   TRP B  35      12.864  -5.814  15.211  1.00 16.28           N
```

[1876]

```
ATOM   2019  CA  TRP B  35      12.375  -6.104  16.556  1.00 14.55           C
ATOM   2020  C   TRP B  35      13.000  -5.116  17.520  1.00 16.14           C
ATOM   2021  O   TRP B  35      14.222  -4.929  17.499  1.00 18.54           O
ATOM   2022  CB  TRP B  35      12.754  -7.508  16.985  1.00 15.83           C
ATOM   2023  CG  TRP B  35      12.015  -8.626  16.318  1.00 15.74           C
ATOM   2024  CD1 TRP B  35      12.418  -9.360  15.256  1.00 15.71           C
ATOM   2025  CD2 TRP B  35      10.759  -9.168  16.733  1.00 17.95           C
ATOM   2026  CE2 TRP B  35      10.453 -10.222  15.860  1.00 17.56           C
ATOM   2027  CE3 TRP B  35       9.844  -8.833  17.754  1.00 18.78           C
ATOM   2028  NE1 TRP B  35      11.479 -10.321  14.959  1.00 17.61           N
ATOM   2029  CZ2 TRP B  35       9.287 -10.960  15.965  1.00 18.51           C
ATOM   2030  CZ3 TRP B  35       8.687  -9.574  17.877  1.00 18.67           C
ATOM   2031  CH2 TRP B  35       8.417 -10.628  16.982  1.00 20.16           C
ATOM   2032  N   TYR B  36      12.184  -4.535  18.398  1.00 17.51           N
ATOM   2033  CA  TYR B  36      12.613  -3.539  19.365  1.00 13.89           C
ATOM   2034  C   TYR B  36      12.228  -4.017  20.742  1.00 17.99           C
ATOM   2035  O   TYR B  36      11.235  -4.740  20.915  1.00 20.33           O
ATOM   2036  CB  TYR B  36      11.977  -2.145  19.129  1.00 16.00           C
ATOM   2037  CG  TYR B  36      12.366  -1.538  17.815  1.00 18.00           C
ATOM   2038  CD1 TYR B  36      13.513  -0.750  17.700  1.00 17.96           C
ATOM   2039  CD2 TYR B  36      11.609  -1.769  16.674  1.00 18.10           C
ATOM   2040  CE1 TYR B  36      13.886  -0.239  16.479  1.00 17.35           C
ATOM   2041  CE2 TYR B  36      11.979  -1.247  15.450  1.00 16.07           C
ATOM   2042  CZ  TYR B  36      13.109  -0.482  15.369  1.00 17.52           C
ATOM   2043  OH  TYR B  36      13.477   0.034  14.159  1.00 19.83           O
ATOM   2044  N   GLN B  37      13.067  -3.664  21.714  1.00 17.83           N
ATOM   2045  CA  GLN B  37      12.811  -3.929  23.117  1.00 19.10           C
ATOM   2046  C   GLN B  37      12.568  -2.605  23.799  1.00 18.00           C
ATOM   2047  O   GLN B  37      13.303  -1.644  23.574  1.00 20.24           O
ATOM   2048  CB  GLN B  37      14.005  -4.649  23.765  1.00 21.22           C
ATOM   2049  CG  GLN B  37      13.882  -4.973  25.234  1.00 18.89           C
ATOM   2050  CD  GLN B  37      15.180  -5.529  25.796  1.00 22.29           C
ATOM   2051  NE2 GLN B  37      15.153  -6.798  26.197  1.00 19.76           N
ATOM   2052  OE1 GLN B  37      16.208  -4.825  25.863  1.00 24.56           O
ATOM   2053  N   GLN B  38      11.529  -2.549  24.621  1.00 21.22           N
ATOM   2054  CA  GLN B  38      11.317  -1.381  25.452  1.00 21.30           C
ATOM   2055  C   GLN B  38      11.004  -1.825  26.872  1.00 23.88           C
ATOM   2056  O   GLN B  38      10.029  -2.548  27.131  1.00 22.01           O
ATOM   2057  CB  GLN B  38      10.208  -0.491  24.929  1.00 20.70           C
ATOM   2058  CG  GLN B  38      10.236   0.871  25.620  1.00 26.31           C
ATOM   2059  CD  GLN B  38       9.038   1.734  25.255  1.00 25.82           C
ATOM   2060  NE2 GLN B  38       9.224   3.048  25.295  1.00 23.82           N
ATOM   2061  OE1 GLN B  38       7.964   1.220  24.923  1.00 24.34           O
ATOM   2062  N   LYS B  39      11.768  -1.356  27.751  1.00 23.75           N
ATOM   2063  CA  LYS B  39      11.551  -1.530  29.171  1.00 24.32           C
ATOM   2064  C   LYS B  39      10.858  -0.314  29.756  1.00 22.82           C
ATOM   2065  O   LYS B  39      10.863   0.786  29.191  1.00 25.58           O
ATOM   2066  CB  LYS B  39      12.899  -1.775  29.854  1.00 22.48           C
ATOM   2067  CG  LYS B  39      13.633  -3.103  30.019  1.00 27.55           C
ATOM   2068  CD  LYS B  39      15.181  -2.636  30.066  1.00 33.01           C
ATOM   2069  CE  LYS B  39      16.430  -3.354  29.516  1.00 37.04           C
ATOM   2070  NZ  LYS B  39      16.401  -4.553  30.461  1.00 39.06           N
ATOM   2071  N   PRO B  40      10.192  -0.518  30.888  1.00 26.99           N
ATOM   2072  CA  PRO B  40       9.343   0.526  31.449  1.00 26.06           C
ATOM   2073  C   PRO B  40      10.152   1.767  31.745  1.00 28.11           C
ATOM   2074  O   PRO B  40      11.190   1.707  32.390  1.00 29.49           O
ATOM   2075  CB  PRO B  40       8.786  -0.112  32.714  1.00 26.93           C
ATOM   2076  CG  PRO B  40       8.796  -1.562  32.421  1.00 28.01           C
ATOM   2077  CD  PRO B  40      10.011  -1.806  31.585  1.00 26.92           C
ATOM   2078  N   GLY B  41       9.674   2.922  31.254  1.00 26.36           N
ATOM   2079  CA  GLY B  41      10.370   4.156  31.521  1.00 24.95           C
ATOM   2080  C   GLY B  41      11.617   4.382  30.709  1.00 30.01           C
ATOM   2081  O   GLY B  41      12.352   5.337  30.993  1.00 30.34           O
ATOM   2082  N   CYS B  42      11.903   3.533  29.722  1.00 29.36           N
ATOM   2083  CA  CYS B  42      13.054   3.690  28.843  1.00 25.85           C
ATOM   2084  C   CYS B  42      12.590   3.976  27.426  1.00 24.40           C
ATOM   2085  O   CYS B  42      11.424   3.776  27.086  1.00 25.31           O
ATOM   2086  CB  CYS B  42      13.914   2.431  28.828  1.00 24.40           C
```

[1877]

```
ATOM   2087  SG  CYS B  42      14.420   1.809  30.420  1.00 25.30           S
ATOM   2088  N   ALA B  43      13.524   4.465  26.590  1.00 25.26           N
ATOM   2089  CA  ALA B  43      13.330   4.545  25.151  1.00 24.49           C
ATOM   2090  C   ALA B  43      13.470   3.152  24.531  1.00 26.32           C
ATOM   2091  O   ALA B  43      14.139   2.276  25.103  1.00 23.20           O
ATOM   2092  CB  ALA B  43      14.342   5.492  24.518  1.00 25.58           C
ATOM   2093  N   PRO B  44      12.837   2.913  23.379  1.00 23.88           N
ATOM   2094  CA  PRO B  44      12.993   1.617  22.716  1.00 21.94           C
ATOM   2095  C   PRO B  44      14.435   1.373  22.300  1.00 21.24           C
ATOM   2096  O   PRO B  44      15.234   2.297  22.162  1.00 23.87           O
ATOM   2097  CB  PRO B  44      12.074   1.730  21.499  1.00 21.67           C
ATOM   2098  CG  PRO B  44      11.059   2.808  21.876  1.00 21.36           C
ATOM   2099  CD  PRO B  44      11.836   3.769  22.707  1.00 23.12           C
ATOM   2100  N   LYS B  45      14.766   0.092  22.124  1.00 20.25           N
ATOM   2101  CA  LYS B  45      16.099  -0.342  21.728  1.00 19.63           C
ATOM   2102  C   LYS B  45      15.980  -1.332  20.583  1.00 19.63           C
ATOM   2103  O   LYS B  45      15.179  -2.269  20.658  1.00 20.26           O
ATOM   2104  CB  LYS B  45      16.828  -0.986  22.908  1.00 21.49           C
ATOM   2105  CG  LYS B  45      18.175  -1.627  22.554  1.00 21.58           C
ATOM   2106  CD  LYS B  45      18.749  -2.253  23.820  1.00 25.50           C
ATOM   2107  CE  LYS B  45      20.132  -2.869  23.618  1.00 24.72           C
ATOM   2108  NZ  LYS B  45      20.525  -3.553  24.878  1.00 22.56           N
ATOM   2109  N   LEU B  46      16.790  -1.154  19.538  1.00 20.82           N
ATOM   2110  CA  LEU B  46      16.792  -2.084  18.415  1.00 19.14           C
ATOM   2111  C   LEU B  46      17.511  -3.366  18.797  1.00 19.47           C
ATOM   2112  O   LEU B  46      18.634  -3.329  19.304  1.00 20.54           O
ATOM   2113  CB  LEU B  46      17.485  -1.456  17.207  1.00 19.49           C
ATOM   2114  CG  LEU B  46      17.679  -2.376  16.014  1.00 19.36           C
ATOM   2115  CD1 LEU B  46      16.312  -2.688  15.355  1.00 16.51           C
ATOM   2116  CD2 LEU B  46      18.706  -1.817  15.027  1.00 18.53           C
ATOM   2117  N   LEU B  47      16.860  -4.502  18.595  1.00 17.17           N
ATOM   2118  CA  LEU B  47      17.499  -5.786  18.829  1.00 16.82           C
ATOM   2119  C   LEU B  47      17.837  -6.496  17.527  1.00 17.97           C
ATOM   2120  O   LEU B  47      18.980  -6.907  17.322  1.00 19.40           O
ATOM   2121  CB  LEU B  47      16.616  -6.695  19.689  1.00 18.01           C
ATOM   2122  CG  LEU B  47      16.320  -6.275  21.133  1.00 19.10           C
ATOM   2123  CD1 LEU B  47      15.456  -7.344  21.801  1.00 20.05           C
ATOM   2124  CD2 LEU B  47      17.600  -6.054  21.954  1.00 18.17           C
ATOM   2125  N   ILE B  48      16.865  -6.658  16.631  1.00 18.12           N
ATOM   2126  CA  ILE B  48      17.044  -7.398  15.395  1.00 18.04           C
ATOM   2127  C   ILE B  48      16.556  -6.558  14.235  1.00 18.13           C
ATOM   2128  O   ILE B  48      15.559  -5.832  14.349  1.00 19.50           O
ATOM   2129  CB  ILE B  48      16.308  -8.751  15.436  1.00 19.49           C
ATOM   2130  CG1 ILE B  48      16.770  -9.516  16.662  1.00 19.92           C
ATOM   2131  CG2 ILE B  48      16.587  -9.559  14.176  1.00 20.31           C
ATOM   2132  CD1 ILE B  48      16.179 -10.847  16.799  1.00 23.59           C
ATOM   2133  N   TYR B  49      17.289  -6.627  13.132  1.00 19.72           N
ATOM   2134  CA  TYR B  49      16.902  -6.034  11.870  1.00 16.96           C
ATOM   2135  C   TYR B  49      17.040  -7.053  10.749  1.00 17.76           C
ATOM   2136  O   TYR B  49      17.704  -8.090  10.885  1.00 18.92           O
ATOM   2137  CB  TYR B  49      17.725  -4.811  11.575  1.00 19.87           C
ATOM   2138  CG  TYR B  49      19.207  -5.018  11.359  1.00 19.70           C
ATOM   2139  CD1 TYR B  49      20.072  -5.123  12.431  1.00 21.01           C
ATOM   2140  CD2 TYR B  49      19.739  -5.086  10.082  1.00 19.90           C
ATOM   2141  CE1 TYR B  49      21.412  -5.332  12.244  1.00 21.72           C
ATOM   2142  CE2 TYR B  49      21.075  -5.283   9.893  1.00 20.99           C
ATOM   2143  CZ  TYR B  49      21.908  -5.390  10.978  1.00 23.68           C
ATOM   2144  OH  TYR B  49      23.254  -5.591  10.776  1.00 31.00           O
ATOM   2145  N   ALA B  50      16.375  -6.758   9.639  1.00 20.42           N
ATOM   2146  CA  ALA B  50      16.326  -7.668   8.492  1.00 21.71           C
ATOM   2147  C   ALA B  50      15.880  -9.063   8.942  1.00 19.19           C
ATOM   2148  O   ALA B  50      16.374 -10.085   8.477  1.00 20.24           O
ATOM   2149  CB  ALA B  50      17.659  -7.713   7.753  1.00 19.39           C
ATOM   2150  N   ALA B  51      14.926  -9.079   9.867  1.00 22.09           N
ATOM   2151  CA  ALA B  51      14.260 -10.283  10.354  1.00 22.50           C
ATOM   2152  C   ALA B  51      15.161 -11.128  11.233  1.00 21.33           C
ATOM   2153  O   ALA B  51      14.660 -11.724  12.188  1.00 19.58           O
ATOM   2154  CB  ALA B  51      13.711 -11.140   9.205  1.00 20.64           C
```

[1878]

```
ATOM   2155  N   SER B  52      16.482 -11.169  10.955  1.00 19.82           N
ATOM   2156  CA  SER B  52      17.353 -12.120  11.647  1.00 22.85           C
ATOM   2157  C   SER B  52      18.735 -11.588  12.031  1.00 22.96           C
ATOM   2158  O   SER B  52      19.484 -12.323  12.692  1.00 20.04           O
ATOM   2159  CB  SER B  52      17.532 -13.383  10.792  1.00 18.43           C
ATOM   2160  OG  SER B  52      18.204 -13.058   9.595  1.00 21.09           O
ATOM   2161  N   SER B  53      19.096 -10.351  11.671  1.00 18.22           N
ATOM   2162  CA  SER B  53      20.410  -9.797  12.007  1.00 22.44           C
ATOM   2163  C   SER B  53      20.404  -9.140  13.386  1.00 21.27           C
ATOM   2164  O   SER B  53      19.601  -8.236  13.654  1.00 21.77           O
ATOM   2165  CB  SER B  53      20.864  -8.770  10.957  1.00 21.95           C
ATOM   2166  OG  SER B  53      21.145  -9.335   9.686  1.00 26.52           O
ATOM   2167  N   LEU B  54      21.333  -9.555  14.247  1.00 22.82           N
ATOM   2168  CA  LEU B  54      21.428  -8.969  15.580  1.00 20.62           C
ATOM   2169  C   LEU B  54      22.086  -7.607  15.513  1.00 20.24           C
ATOM   2170  O   LEU B  54      23.094  -7.420  14.825  1.00 20.78           O
ATOM   2171  CB  LEU B  54      22.206  -9.870  16.527  1.00 21.10           C
ATOM   2172  CG  LEU B  54      21.329 -10.811  17.355  1.00 20.28           C
ATOM   2173  CD1 LEU B  54      20.650 -11.751  16.407  1.00 22.76           C
ATOM   2174  CD2 LEU B  54      22.134 -11.579  18.401  1.00 20.39           C
ATOM   2175  N   GLN B  55      21.503  -6.648  16.200  1.00 18.09           N
ATOM   2176  CA  GLN B  55      22.164  -5.367  16.293  1.00 21.55           C
ATOM   2177  C   GLN B  55      23.459  -5.550  17.069  1.00 24.18           C
ATOM   2178  O   GLN B  55      23.593  -6.454  17.895  1.00 21.82           O
ATOM   2179  CB  GLN B  55      21.251  -4.327  16.950  1.00 22.22           C
ATOM   2180  CG  GLN B  55      21.959  -3.070  17.457  1.00 21.34           C
ATOM   2181  CD  GLN B  55      22.565  -2.224  16.342  1.00 28.95           C
ATOM   2182  NE2 GLN B  55      23.119  -1.080  16.707  1.00 34.62           N
ATOM   2183  OE1 GLN B  55      22.518  -2.581  15.174  1.00 30.91           O
ATOM   2184  N   SER B  56      24.449  -4.726  16.733  1.00 25.08           N
ATOM   2185  CA  SER B  56      25.745  -4.827  17.386  1.00 26.16           C
ATOM   2186  C   SER B  56      25.593  -4.794  18.897  1.00 24.29           C
ATOM   2187  O   SER B  56      24.876  -3.952  19.437  1.00 26.92           O
ATOM   2188  CB  SER B  56      26.617  -3.660  16.931  1.00 26.24           C
ATOM   2189  OG  SER B  56      27.867  -3.742  17.568  1.00 35.33           O
ATOM   2190  N   GLY B  57      26.225  -5.740  19.588  1.00 21.79           N
ATOM   2191  CA  GLY B  57      26.194  -5.722  21.035  1.00 23.53           C
ATOM   2192  C   GLY B  57      25.049  -6.471  21.676  1.00 25.03           C
ATOM   2193  O   GLY B  57      25.046  -6.643  22.898  1.00 26.21           O
ATOM   2194  N   VAL B  58      24.098  -6.958  20.898  1.00 24.67           N
ATOM   2195  CA  VAL B  58      22.955  -7.669  21.468  1.00 22.27           C
ATOM   2196  C   VAL B  58      23.401  -9.075  21.860  1.00 23.17           C
ATOM   2197  O   VAL B  58      24.166  -9.698  21.107  1.00 20.19           O
ATOM   2198  CB  VAL B  58      21.816  -7.703  20.461  1.00 19.85           C
ATOM   2199  CG1 VAL B  58      20.689  -8.592  20.915  1.00 19.86           C
ATOM   2200  CG2 VAL B  58      21.290  -6.313  20.345  1.00 21.14           C
ATOM   2201  N   PRO B  59      23.052  -9.547  23.061  1.00 21.40           N
ATOM   2202  CA  PRO B  59      23.445 -10.901  23.480  1.00 21.06           C
ATOM   2203  C   PRO B  59      22.930 -11.931  22.493  1.00 18.81           C
ATOM   2204  O   PRO B  59      21.891 -11.744  21.866  1.00 21.39           O
ATOM   2205  CB  PRO B  59      22.761 -11.063  24.839  1.00 16.98           C
ATOM   2206  CG  PRO B  59      22.477  -9.658  25.291  1.00 22.07           C
ATOM   2207  CD  PRO B  59      22.270  -8.846  24.089  1.00 18.51           C
ATOM   2208  N   SER B  60      23.696 -13.000  22.298  1.00 16.78           N
ATOM   2209  CA  SER B  60      23.312 -13.986  21.302  1.00 18.98           C
ATOM   2210  C   SER B  60      22.222 -14.945  21.797  1.00 18.20           C
ATOM   2211  O   SER B  60      21.859 -15.876  21.070  1.00 18.19           O
ATOM   2212  CB  SER B  60      24.548 -14.731  20.796  1.00 19.92           C
ATOM   2213  OG  SER B  60      25.331 -15.197  21.867  1.00 22.16           O
ATOM   2214  N   ARG B  61      21.715 -14.788  23.013  1.00 19.59           N
ATOM   2215  CA  ARG B  61      20.546 -15.571  23.361  1.00 17.58           C
ATOM   2216  C   ARG B  61      19.317 -15.100  22.585  1.00 17.29           C
ATOM   2217  O   ARG B  61      18.303 -15.811  22.547  1.00 20.52           O
ATOM   2218  CB  ARG B  61      20.316 -15.535  24.867  1.00 19.61           C
ATOM   2219  CG  ARG B  61      20.018 -14.149  25.485  1.00 20.06           C
ATOM   2220  CD  ARG B  61      19.778 -14.265  26.993  1.00 21.59           C
ATOM   2221  NE  ARG B  61      19.472 -12.969  27.583  1.00 18.04           N
ATOM   2222  CZ  ARG B  61      20.400 -12.094  27.941  1.00 20.01           C
```

[1879]

```
ATOM   2223  NH1 ARG B  61      21.679 -12.377  27.758  1.00 20.80           N
ATOM   2224  NH2 ARG B  61      20.057 -10.929  28.457  1.00 20.98           N
ATOM   2225  N   PHE B  62      19.385 -13.924  21.969  1.00 20.19           N
ATOM   2226  CA  PHE B  62      18.342 -13.419  21.070  1.00 19.82           C
ATOM   2227  C   PHE B  62      18.578 -13.900  19.642  1.00 18.60           C
ATOM   2228  O   PHE B  62      19.680 -13.738  19.110  1.00 21.01           O
ATOM   2229  CB  PHE B  62      18.327 -11.890  21.078  1.00 17.94           C
ATOM   2230  CG  PHE B  62      17.853 -11.296  22.356  1.00 19.34           C
ATOM   2231  CD1 PHE B  62      18.744 -11.052  23.417  1.00 20.35           C
ATOM   2232  CD2 PHE B  62      16.509 -10.997  22.538  1.00 19.70           C
ATOM   2233  CE1 PHE B  62      18.307 -10.505  24.654  1.00 19.16           C
ATOM   2234  CE2 PHE B  62      16.075 -10.471  23.749  1.00 17.49           C
ATOM   2235  CZ  PHE B  62      16.985 -10.198  24.808  1.00 19.09           C
ATOM   2236  N   SER B  63      17.522 -14.408  18.996  1.00 17.64           N
ATOM   2237  CA  SER B  63      17.557 -14.776  17.582  1.00 18.67           C
ATOM   2238  C   SER B  63      16.232 -14.398  16.949  1.00 19.26           C
ATOM   2239  O   SER B  63      15.212 -14.265  17.627  1.00 20.80           O
ATOM   2240  CB  SER B  63      17.788 -16.279  17.327  1.00 19.88           C
ATOM   2241  OG  SER B  63      19.042 -16.706  17.842  1.00 21.09           O
ATOM   2242  N   GLY B  64      16.286 -14.178  15.648  1.00 17.93           N
ATOM   2243  CA  GLY B  64      15.119 -13.819  14.881  1.00 17.61           C
ATOM   2244  C   GLY B  64      15.025 -14.676  13.640  1.00 20.48           C
ATOM   2245  O   GLY B  64      16.028 -15.104  13.069  1.00 22.11           O
ATOM   2246  N   SER B  65      13.800 -14.856  13.170  1.00 19.36           N
ATOM   2247  CA  SER B  65      13.617 -15.777  12.077  1.00 19.41           C
ATOM   2248  C   SER B  65      12.376 -15.373  11.297  1.00 21.22           C
ATOM   2249  O   SER B  65      11.473 -14.711  11.828  1.00 22.33           O
ATOM   2250  CB  SER B  65      13.527 -17.189  12.667  1.00 19.89           C
ATOM   2251  OG  SER B  65      12.836 -18.055  11.816  1.00 34.52           O
ATOM   2252  N   GLY B  66      12.346 -15.762  10.023  1.00 21.58           N
ATOM   2253  CA  GLY B  66      11.155 -15.595   9.220  1.00 21.65           C
ATOM   2254  C   GLY B  66      11.337 -14.777   7.967  1.00 19.55           C
ATOM   2255  O   GLY B  66      12.326 -14.059   7.803  1.00 23.63           O
ATOM   2256  N   SER B  67      10.381 -14.881   7.057  1.00 21.01           N
ATOM   2257  CA  SER B  67      10.345 -14.010   5.894  1.00 24.33           C
ATOM   2258  C   SER B  67       8.942 -14.037   5.306  1.00 25.55           C
ATOM   2259  O   SER B  67       8.170 -14.973   5.523  1.00 31.08           O
ATOM   2260  CB  SER B  67      11.371 -14.416   4.845  1.00 24.69           C
ATOM   2261  OG  SER B  67      11.031 -15.668   4.324  1.00 30.17           O
ATOM   2262  N   GLY B  68       8.622 -13.006   4.555  1.00 22.58           N
ATOM   2263  CA  GLY B  68       7.304 -12.944   3.985  1.00 23.66           C
ATOM   2264  C   GLY B  68       6.314 -12.463   5.015  1.00 25.21           C
ATOM   2265  O   GLY B  68       6.260 -11.262   5.298  1.00 23.64           O
ATOM   2266  N   THR B  69       5.560 -13.372   5.630  1.00 24.87           N
ATOM   2267  CA  THR B  69       4.469 -12.950   6.502  1.00 24.87           C
ATOM   2268  C   THR B  69       4.564 -13.406   7.953  1.00 22.04           C
ATOM   2269  O   THR B  69       3.979 -12.744   8.818  1.00 22.34           O
ATOM   2270  CB  THR B  69       3.135 -13.431   5.923  1.00 23.21           C
ATOM   2271  CG2 THR B  69       2.943 -12.851   4.559  1.00 24.45           C
ATOM   2272  OG1 THR B  69       3.194 -14.846   5.790  1.00 28.95           O
ATOM   2273  N   ASP B  70       5.325 -14.447   8.269  1.00 23.19           N
ATOM   2274  CA  ASP B  70       5.408 -14.957   9.629  1.00 23.91           C
ATOM   2275  C   ASP B  70       6.831 -14.840  10.161  1.00 25.43           C
ATOM   2276  O   ASP B  70       7.790 -15.295   9.521  1.00 21.99           O
ATOM   2277  CB  ASP B  70       4.925 -16.395   9.711  1.00 26.05           C
ATOM   2278  CG  ASP B  70       3.537 -16.569   9.141  1.00 33.19           C
ATOM   2279  OD1 ASP B  70       2.577 -16.038   9.745  1.00 34.69           O
ATOM   2280  OD2 ASP B  70       3.398 -17.247   8.106  1.00 39.93           O
ATOM   2281  N   PHE B  71       6.955 -14.212  11.328  1.00 19.71           N
ATOM   2282  CA  PHE B  71       8.230 -13.930  11.955  1.00 21.13           C
ATOM   2283  C   PHE B  71       8.167 -14.318  13.420  1.00 20.19           C
ATOM   2284  O   PHE B  71       7.098 -14.290  14.044  1.00 22.06           O
ATOM   2285  CB  PHE B  71       8.603 -12.437  11.814  1.00 17.70           C
ATOM   2286  CG  PHE B  71       8.645 -11.972  10.398  1.00 18.18           C
ATOM   2287  CD1 PHE B  71       7.493 -11.587   9.745  1.00 20.78           C
ATOM   2288  CD2 PHE B  71       9.831 -11.947   9.710  1.00 18.54           C
ATOM   2289  CE1 PHE B  71       7.528 -11.180   8.441  1.00 19.67           C
ATOM   2290  CE2 PHE B  71       9.884 -11.543   8.420  1.00 21.72           C
```

[1880]

```
ATOM   2291  CZ  PHE B  71       8.729 -11.146   7.767  1.00 20.83           C
ATOM   2292  N   THR B  72       9.323 -14.694  13.960  1.00 17.86           N
ATOM   2293  CA  THR B  72       9.441 -15.086  15.353  1.00 18.16           C
ATOM   2294  C   THR B  72      10.699 -14.496  15.970  1.00 19.94           C
ATOM   2295  O   THR B  72      11.732 -14.376  15.301  1.00 22.44           O
ATOM   2296  CB  THR B  72       9.502 -16.599  15.520  1.00 21.85           C
ATOM   2297  CG2 THR B  72       8.356 -17.300  14.836  1.00 21.28           C
ATOM   2298  OG1 THR B  72      10.732 -17.063  14.961  1.00 28.85           O
ATOM   2299  N   LEU B  73      10.596 -14.114  17.232  1.00 19.04           N
ATOM   2300  CA  LEU B  73      11.726 -13.724  18.064  1.00 18.57           C
ATOM   2301  C   LEU B  73      11.895 -14.761  19.157  1.00 19.33           C
ATOM   2302  O   LEU B  73      10.936 -15.048  19.876  1.00 20.22           O
ATOM   2303  CB  LEU B  73      11.490 -12.350  18.687  1.00 19.23           C
ATOM   2304  CG  LEU B  73      12.515 -11.910  19.721  1.00 20.44           C
ATOM   2305  CD1 LEU B  73      13.750 -11.579  18.963  1.00 19.23           C
ATOM   2306  CD2 LEU B  73      12.047 -10.687  20.424  1.00 19.55           C
ATOM   2307  N   THR B  74      13.106 -15.302  19.309  1.00 19.88           N
ATOM   2308  CA  THR B  74      13.371 -16.349  20.287  1.00 19.09           C
ATOM   2309  C   THR B  74      14.455 -15.862  21.226  1.00 19.18           C
ATOM   2310  O   THR B  74      15.449 -15.287  20.771  1.00 19.77           O
ATOM   2311  CB  THR B  74      13.813 -17.657  19.631  1.00 18.95           C
ATOM   2312  CG2 THR B  74      13.900 -18.733  20.687  1.00 18.69           C
ATOM   2313  OG1 THR B  74      12.838 -18.070  18.670  1.00 20.61           O
ATOM   2314  N   ILE B  75      14.232 -16.030  22.528  1.00 20.12           N
ATOM   2315  CA  ILE B  75      15.263 -15.861  23.548  1.00 17.36           C
ATOM   2316  C   ILE B  75      15.528 -17.250  24.079  1.00 19.41           C
ATOM   2317  O   ILE B  75      14.639 -17.877  24.661  1.00 20.16           O
ATOM   2318  CB  ILE B  75      14.842 -14.916  24.682  1.00 21.10           C
ATOM   2319  CG1 ILE B  75      14.241 -13.634  24.125  1.00 20.32           C
ATOM   2320  CG2 ILE B  75      16.030 -14.561  25.566  1.00 16.85           C
ATOM   2321  CD1 ILE B  75      13.607 -12.762  25.183  1.00 20.31           C
ATOM   2322  N   SER B  76      16.731 -17.748  23.861  1.00 20.59           N
ATOM   2323  CA  SER B  76      17.001 -19.147  24.140  1.00 19.80           C
ATOM   2324  C   SER B  76      17.052 -19.452  25.637  1.00 23.85           C
ATOM   2325  O   SER B  76      16.902 -20.620  26.018  1.00 22.35           O
ATOM   2326  CB  SER B  76      18.285 -19.538  23.420  1.00 19.06           C
ATOM   2327  OG  SER B  76      19.341 -18.742  23.899  1.00 23.12           O
ATOM   2328  N   SER B  77      17.371 -18.456  26.475  1.00 21.85           N
ATOM   2329  CA  SER B  77      17.350 -18.601  27.960  1.00 21.45           C
ATOM   2330  C   SER B  77      16.954 -17.250  28.577  1.00 20.12           C
ATOM   2331  O   SER B  77      17.822 -16.402  28.684  1.00 20.74           O
ATOM   2332  CB  SER B  77      18.613 -19.158  28.540  1.00 19.58           C
ATOM   2333  OG  SER B  77      18.548 -19.210  29.953  1.00 23.46           O
ATOM   2334  N   LEU B  78      15.695 -17.103  28.971  1.00 20.05           N
ATOM   2335  CA  LEU B  78      15.178 -15.798  29.456  1.00 21.11           C
ATOM   2336  C   LEU B  78      15.964 -15.343  30.677  1.00 21.56           C
ATOM   2337  O   LEU B  78      16.047 -16.100  31.641  1.00 20.76           O
ATOM   2338  CB  LEU B  78      13.682 -15.888  29.742  1.00 23.96           C
ATOM   2339  CG  LEU B  78      12.991 -14.567  30.065  1.00 24.84           C
ATOM   2340  CD1 LEU B  78      13.009 -13.638  28.866  1.00 23.47           C
ATOM   2341  CD2 LEU B  78      11.569 -14.802  30.530  1.00 23.28           C
ATOM   2342  N   GLN B  79      16.466 -14.115  30.615  1.00 22.32           N
ATOM   2343  CA  GLN B  79      17.311 -13.598  31.709  1.00 21.24           C
ATOM   2344  C   GLN B  79      16.562 -12.471  32.433  1.00 21.56           C
ATOM   2345  O   GLN B  79      15.697 -11.863  31.816  1.00 23.04           O
ATOM   2346  CB  GLN B  79      18.710 -13.220  31.232  1.00 23.33           C
ATOM   2347  CG  GLN B  79      19.559 -14.391  30.769  1.00 22.24           C
ATOM   2348  CD  GLN B  79      19.754 -15.408  31.863  1.00 23.71           C
ATOM   2349  NE2 GLN B  79      19.455 -16.657  31.550  1.00 22.19           N
ATOM   2350  OE1 GLN B  79      20.159 -15.079  32.972  1.00 25.08           O
ATOM   2351  N   PRO B  80      16.808 -12.224  33.741  1.00 22.94           N
ATOM   2352  CA  PRO B  80      16.026 -11.210  34.477  1.00 21.10           C
ATOM   2353  C   PRO B  80      16.028  -9.868  33.795  1.00 23.30           C
ATOM   2354  O   PRO B  80      15.016  -9.163  33.853  1.00 24.52           O
ATOM   2355  CB  PRO B  80      16.666 -11.165  35.876  1.00 23.96           C
ATOM   2356  CG  PRO B  80      17.916 -11.964  35.782  1.00 26.50           C
ATOM   2357  CD  PRO B  80      17.890 -12.814  34.551  1.00 22.19           C
ATOM   2358  N   GLU B  81      17.112  -9.498  33.108  1.00 25.14           N
```

[1881]

```
ATOM   2359  CA  GLU B  81      17.137  -8.211  32.433  1.00 24.04           C
ATOM   2360  C   GLU B  81      16.339  -8.219  31.140  1.00 25.14           C
ATOM   2361  O   GLU B  81      16.326  -7.196  30.445  1.00 25.40           O
ATOM   2362  CB  GLU B  81      18.571  -7.781  32.137  1.00 24.15           C
ATOM   2363  CG  GLU B  81      19.298  -8.741  31.203  1.00 29.81           C
ATOM   2364  CD  GLU B  81      20.383  -9.644  31.878  1.00 35.34           C
ATOM   2365  OE1 GLU B  81      20.110 -10.294  32.943  1.00 25.50           O
ATOM   2366  OE2 GLU B  81      21.521  -9.693  31.294  1.00 32.97           O
ATOM   2367  N   ASP B  82      15.720  -9.350  30.767  1.00 22.18           N
ATOM   2368  CA  ASP B  82      14.982  -9.466  29.514  1.00 23.61           C
ATOM   2369  C   ASP B  82      13.484  -9.245  29.685  1.00 22.56           C
ATOM   2370  O   ASP B  82      12.755  -9.275  28.689  1.00 21.26           O
ATOM   2371  CB  ASP B  82      15.187 -10.843  28.871  1.00 19.96           C
ATOM   2372  CG  ASP B  82      16.645 -11.152  28.510  1.00 21.66           C
ATOM   2373  OD1 ASP B  82      17.460 -10.218  28.362  1.00 22.93           O
ATOM   2374  OD2 ASP B  82      16.973 -12.363  28.350  1.00 22.03           O
ATOM   2375  N   PHE B  83      13.003  -9.049  30.910  1.00 23.49           N
ATOM   2376  CA  PHE B  83      11.584  -8.779  31.140  1.00 22.43           C
ATOM   2377  C   PHE B  83      11.261  -7.370  30.665  1.00 24.05           C
ATOM   2378  O   PHE B  83      11.793  -6.389  31.199  1.00 25.59           O
ATOM   2379  CB  PHE B  83      11.246  -8.950  32.622  1.00 21.21           C
ATOM   2380  CG  PHE B  83      11.285 -10.370  33.080  1.00 22.53           C
ATOM   2381  CD2 PHE B  83      12.280 -10.813  33.892  1.00 20.67           C
ATOM   2382  CD1 PHE B  83      10.299 -11.269  32.684  1.00 26.53           C
ATOM   2383  CE2 PHE B  83      12.313 -12.110  34.277  1.00 24.94           C
ATOM   2384  CE1 PHE B  83      10.316 -12.584  33.089  1.00 25.73           C
ATOM   2385  CZ  PHE B  83      11.331 -13.005  33.882  1.00 24.51           C
ATOM   2386  N   ALA B  84      10.364  -7.271  29.685  1.00 23.17           N
ATOM   2387  CA  ALA B  84      10.183  -6.061  28.893  1.00 21.07           C
ATOM   2388  C   ALA B  84       9.074  -6.288  27.882  1.00 20.09           C
ATOM   2389  O   ALA B  84       8.515  -7.389  27.821  1.00 19.84           O
ATOM   2390  CB  ALA B  84      11.472  -5.688  28.176  1.00 19.46           C
ATOM   2391  N   THR B  85       8.731  -5.255  27.115  1.00 19.34           N
ATOM   2392  CA  THR B  85       7.825  -5.397  25.980  1.00 21.04           C
ATOM   2393  C   THR B  85       8.603  -5.356  24.660  1.00 19.80           C
ATOM   2394  O   THR B  85       9.460  -4.488  24.452  1.00 20.10           O
ATOM   2395  CB  THR B  85       6.747  -4.302  25.982  1.00 22.50           C
ATOM   2396  CG2 THR B  85       5.757  -4.511  24.845  1.00 24.36           C
ATOM   2397  OG1 THR B  85       5.997  -4.366  27.195  1.00 21.87           O
ATOM   2398  N   TYR B  86       8.238  -6.246  23.739  1.00 21.63           N
ATOM   2399  CA  TYR B  86       8.934  -6.426  22.468  1.00 22.01           C
ATOM   2400  C   TYR B  86       7.989  -6.041  21.341  1.00 20.35           C
ATOM   2401  O   TYR B  86       6.832  -6.479  21.320  1.00 21.26           O
ATOM   2402  CB  TYR B  86       9.413  -7.880  22.296  1.00 22.00           C
ATOM   2403  CG  TYR B  86      10.449  -8.230  23.338  1.00 19.16           C
ATOM   2404  CD1 TYR B  86      10.063  -8.650  24.607  1.00 18.07           C
ATOM   2405  CD2 TYR B  86      11.814  -8.096  23.071  1.00 17.44           C
ATOM   2406  CE1 TYR B  86      11.007  -8.957  25.584  1.00 16.75           C
ATOM   2407  CE2 TYR B  86      12.766  -8.385  24.046  1.00 14.86           C
ATOM   2408  CZ  TYR B  86      12.357  -8.817  25.296  1.00 16.04           C
ATOM   2409  OH  TYR B  86      13.286  -9.108  26.266  1.00 15.88           O
ATOM   2410  N   TYR B  87       8.477  -5.224  20.414  1.00 18.94           N
ATOM   2411  CA  TYR B  87       7.674  -4.731  19.312  1.00 17.50           C
ATOM   2412  C   TYR B  87       8.312  -5.147  17.990  1.00 21.21           C
ATOM   2413  O   TYR B  87       9.528  -5.014  17.808  1.00 19.24           O
ATOM   2414  CB  TYR B  87       7.563  -3.199  19.374  1.00 19.98           C
ATOM   2415  CG  TYR B  87       6.833  -2.636  20.572  1.00 22.58           C
ATOM   2416  CD2 TYR B  87       7.512  -2.298  21.733  1.00 16.35           C
ATOM   2417  CD1 TYR B  87       5.451  -2.434  20.533  1.00 21.60           C
ATOM   2418  CE2 TYR B  87       6.838  -1.779  22.825  1.00 19.75           C
ATOM   2419  CE1 TYR B  87       4.772  -1.930  21.620  1.00 19.49           C
ATOM   2420  CZ  TYR B  87       5.467  -1.588  22.753  1.00 20.89           C
ATOM   2421  OH  TYR B  87       4.778  -1.092  23.827  1.00 23.95           O
ATOM   2422  N   CYS B  88       7.461  -5.552  17.042  1.00 21.45           N
ATOM   2423  CA  CYS B  88       7.926  -5.797  15.660  1.00 20.45           C
ATOM   2424  C   CYS B  88       7.498  -4.596  14.823  1.00 18.33           C
ATOM   2425  O   CYS B  88       6.477  -4.007  15.153  1.00 22.30           O
ATOM   2426  CB  CYS B  88       7.400  -7.099  15.047  1.00 21.88           C
```

[1882]

```
ATOM   2427  SG  CYS B  88       5.620  -7.359  14.873  1.00 23.88           S
ATOM   2428  N   GLN B  89       8.311  -4.215  13.842  1.00 21.71           N
ATOM   2429  CA  GLN B  89       7.910  -3.141  12.902  1.00 21.40           C
ATOM   2430  C   GLN B  89       8.227  -3.547  11.461  1.00 20.96           C
ATOM   2431  O   GLN B  89       9.345  -3.971  11.202  1.00 19.87           O
ATOM   2432  CB  GLN B  89       8.460  -1.771  13.286  1.00 19.57           C
ATOM   2433  CG  GLN B  89       9.698  -1.334  12.518  1.00 25.80           C
ATOM   2434  CD  GLN B  89       9.743   0.153  12.275  1.00 30.41           C
ATOM   2435  NE2 GLN B  89      10.949   0.686  12.184  1.00 29.80           N
ATOM   2436  OE1 GLN B  89       8.716   0.815  12.160  1.00 32.06           O
ATOM   2437  N   GLN B  90       7.245  -3.405  10.583  1.00 21.24           N
ATOM   2438  CA  GLN B  90       7.477  -3.656   9.137  1.00 21.10           C
ATOM   2439  C   GLN B  90       8.097  -2.399   8.520  1.00 23.01           C
ATOM   2440  O   GLN B  90       7.618  -1.294   8.807  1.00 22.72           O
ATOM   2441  CB  GLN B  90       6.198  -4.102   8.426  1.00 19.01           C
ATOM   2442  CG  GLN B  90       5.082  -3.074   8.357  1.00 20.36           C
ATOM   2443  CD  GLN B  90       5.133  -2.231   7.106  1.00 21.33           C
ATOM   2444  NE2 GLN B  90       4.226  -1.277   7.016  1.00 19.01           N
ATOM   2445  OE1 GLN B  90       5.981  -2.418   6.242  1.00 20.19           O
ATOM   2446  N   SER B  91       9.154  -2.573   7.742  1.00 19.66           N
ATOM   2447  CA  SER B  91       9.724  -1.441   7.033  1.00 23.66           C
ATOM   2448  C   SER B  91       9.647  -1.642   5.522  1.00 24.38           C
ATOM   2449  O   SER B  91      10.461  -1.109   4.767  1.00 24.80           O
ATOM   2450  CB  SER B  91      11.151  -1.209   7.516  1.00 23.70           C
ATOM   2451  OG  SER B  91      11.891  -2.408   7.339  1.00 25.63           O
ATOM   2452  N   TYR B  92       8.648  -2.406   5.067  1.00 22.95           N
ATOM   2453  CA  TYR B  92       8.474  -2.760   3.666  1.00 21.17           C
ATOM   2454  C   TYR B  92       7.685  -1.713   2.899  1.00 23.80           C
ATOM   2455  O   TYR B  92       8.032  -1.375   1.758  1.00 23.46           O
ATOM   2456  CB  TYR B  92       7.770  -4.111   3.591  1.00 20.59           C
ATOM   2457  CG  TYR B  92       7.499  -4.642   2.225  1.00 20.66           C
ATOM   2458  CD1 TYR B  92       8.471  -5.325   1.510  1.00 21.94           C
ATOM   2459  CD2 TYR B  92       6.238  -4.515   1.663  1.00 25.20           C
ATOM   2460  CE1 TYR B  92       8.198  -5.842   0.243  1.00 24.80           C
ATOM   2461  CE2 TYR B  92       5.957  -5.009   0.401  1.00 20.68           C
ATOM   2462  CZ  TYR B  92       6.935  -5.663  -0.300  1.00 24.86           C
ATOM   2463  OH  TYR B  92       6.637  -6.146  -1.548  1.00 24.29           O
ATOM   2464  N   SER B  93       6.654  -1.158   3.525  1.00 22.27           N
ATOM   2465  CA  SER B  93       5.755  -0.254   2.839  1.00 25.05           C
ATOM   2466  C   SER B  93       5.291   0.856   3.775  1.00 29.25           C
ATOM   2467  O   SER B  93       4.804   0.588   4.876  1.00 30.38           O
ATOM   2468  CB  SER B  93       4.549  -1.045   2.339  1.00 25.67           C
ATOM   2469  OG  SER B  93       3.460  -0.180   2.102  1.00 34.48           O
ATOM   2470  N   THR B  94       5.390   2.098   3.320  1.00 28.82           N
ATOM   2471  CA  THR B  94       4.863   3.208   4.100  1.00 31.23           C
ATOM   2472  C   THR B  94       3.327   3.175   3.953  1.00 29.81           C
ATOM   2473  O   THR B  94       2.828   2.883   2.870  1.00 34.27           O
ATOM   2474  CB  THR B  94       5.423   4.542   3.612  1.00 30.34           C
ATOM   2475  CG2 THR B  94       6.929   4.402   3.321  1.00 26.76           C
ATOM   2476  OG1 THR B  94       4.787   4.884   2.384  1.00 35.21           O
ATOM   2477  N   PRO B  95       2.572   3.495   5.016  1.00 29.92           N
ATOM   2478  CA  PRO B  95       3.083   3.873   6.327  1.00 29.00           C
ATOM   2479  C   PRO B  95       3.712   2.725   7.055  1.00 27.21           C
ATOM   2480  O   PRO B  95       3.148   1.639   7.097  1.00 27.98           O
ATOM   2481  CB  PRO B  95       1.834   4.353   7.067  1.00 33.98           C
ATOM   2482  CG  PRO B  95       0.689   3.760   6.362  1.00 30.53           C
ATOM   2483  CD  PRO B  95       1.101   3.495   4.966  1.00 30.00           C
ATOM   2484  N   LEU B  96       4.875   2.988   7.642  1.00 28.19           N
ATOM   2485  CA  LEU B  96       5.572   1.978   8.430  1.00 27.84           C
ATOM   2486  C   LEU B  96       4.758   1.732   9.686  1.00 28.12           C
ATOM   2487  O   LEU B  96       4.233   2.688  10.262  1.00 29.98           O
ATOM   2488  CB  LEU B  96       6.991   2.452   8.758  1.00 27.86           C
ATOM   2489  CG  LEU B  96       7.838   2.775   7.513  1.00 28.34           C
ATOM   2490  CD1 LEU B  96       9.303   2.975   7.869  1.00 31.69           C
ATOM   2491  CD2 LEU B  96       7.714   1.674   6.482  1.00 26.39           C
ATOM   2492  N   THR B  97       4.520   0.459  10.031  1.00 21.29           N
ATOM   2493  CA  THR B  97       3.642   0.139  11.147  1.00 24.83           C
ATOM   2494  C   THR B  97       4.312  -0.795  12.137  1.00 23.09           C
```

[1883]

```
ATOM   2495  O   THR B  97       5.133  -1.631  11.763  1.00 21.57           O
ATOM   2496  CB  THR B  97       2.319  -0.475  10.683  1.00 23.42           C
ATOM   2497  CG2 THR B  97       1.469   0.562  10.045  1.00 27.09           C
ATOM   2498  OG1 THR B  97       2.589  -1.454   9.697  1.00 27.26           O
ATOM   2499  N   PHE B  98       3.961  -0.624  13.409  1.00 24.04           N
ATOM   2500  CA  PHE B  98       4.388  -1.476  14.512  1.00 19.39           C
ATOM   2501  C   PHE B  98       3.337  -2.532  14.818  1.00 21.35           C
ATOM   2502  O   PHE B  98       2.145  -2.335  14.575  1.00 23.75           O
ATOM   2503  CB  PHE B  98       4.621  -0.670  15.782  1.00 21.33           C
ATOM   2504  CG  PHE B  98       5.870   0.149  15.765  1.00 21.96           C
ATOM   2505  CD1 PHE B  98       5.849   1.449  15.317  1.00 20.35           C
ATOM   2506  CD2 PHE B  98       7.058  -0.379  16.246  1.00 20.76           C
ATOM   2507  CE1 PHE B  98       6.995   2.211  15.310  1.00 21.73           C
ATOM   2508  CE2 PHE B  98       8.205   0.375  16.250  1.00 24.48           C
ATOM   2509  CZ  PHE B  98       8.176   1.675  15.783  1.00 22.01           C
ATOM   2510  N   GLY B  99       3.793  -3.671  15.341  1.00 21.61           N
ATOM   2511  CA  GLY B  99       2.907  -4.570  16.041  1.00 19.72           C
ATOM   2512  C   GLY B  99       2.482  -3.972  17.367  1.00 23.48           C
ATOM   2513  O   GLY B  99       2.963  -2.926  17.806  1.00 21.98           O
ATOM   2514  N   GLN B 100       1.520  -4.630  18.013  1.00 22.46           N
ATOM   2515  CA  GLN B 100       0.976  -4.058  19.233  1.00 24.07           C
ATOM   2516  C   GLN B 100       1.854  -4.316  20.457  1.00 24.20           C
ATOM   2517  O   GLN B 100       1.627  -3.707  21.505  1.00 25.74           O
ATOM   2518  CB  GLN B 100      -0.432  -4.599  19.489  1.00 22.99           C
ATOM   2519  CG  GLN B 100      -0.474  -5.934  20.213  1.00 29.31           C
ATOM   2520  CD  GLN B 100      -0.373  -7.128  19.306  1.00 26.08           C
ATOM   2521  NE2 GLN B 100      -0.608  -8.297  19.880  1.00 28.49           N
ATOM   2522  OE1 GLN B 100      -0.046  -7.019  18.107  1.00 25.99           O
ATOM   2523  N   GLY B 101       2.857  -5.159  20.353  1.00 19.35           N
ATOM   2524  CA  GLY B 101       3.725  -5.424  21.478  1.00 20.27           C
ATOM   2525  C   GLY B 101       3.369  -6.699  22.232  1.00 22.36           C
ATOM   2526  O   GLY B 101       2.207  -7.110  22.318  1.00 23.80           O
ATOM   2527  N   THR B 102       4.394  -7.345  22.775  1.00 23.12           N
ATOM   2528  CA  THR B 102       4.254  -8.523  23.623  1.00 20.79           C
ATOM   2529  C   THR B 102       4.980  -8.186  24.916  1.00 21.48           C
ATOM   2530  O   THR B 102       6.198  -7.981  24.914  1.00 21.51           O
ATOM   2531  CB  THR B 102       4.845  -9.781  22.966  1.00 22.66           C
ATOM   2532  CG2 THR B 102       4.735 -10.970  23.889  1.00 21.79           C
ATOM   2533  OG1 THR B 102       4.152 -10.109  21.746  1.00 23.54           O
ATOM   2534  N   LYS B 103       4.244  -8.112  26.022  1.00 22.08           N
ATOM   2535  CA  LYS B 103       4.861  -7.842  27.312  1.00 22.24           C
ATOM   2536  C   LYS B 103       5.352  -9.171  27.858  1.00 23.25           C
ATOM   2537  O   LYS B 103       4.569 -10.116  27.992  1.00 25.46           O
ATOM   2538  CB  LYS B 103       3.860  -7.219  28.279  1.00 24.70           C
ATOM   2539  CG  LYS B 103       4.450  -7.014  29.640  1.00 26.58           C
ATOM   2540  CD  LYS B 103       3.409  -6.560  30.637  1.00 36.78           C
ATOM   2541  CE  LYS B 103       4.008  -5.767  31.784  1.00 43.37           C
ATOM   2542  NZ  LYS B 103       3.082  -5.674  32.987  1.00 48.51           N
ATOM   2543  N   VAL B 104       6.632  -9.278  28.171  1.00 21.34           N
ATOM   2544  CA  VAL B 104       7.123 -10.503  28.788  1.00 21.53           C
ATOM   2545  C   VAL B 104       7.199 -10.271  30.286  1.00 24.84           C
ATOM   2546  O   VAL B 104       7.953  -9.402  30.738  1.00 24.45           O
ATOM   2547  CB  VAL B 104       8.479 -10.923  28.213  1.00 18.70           C
ATOM   2548  CG1 VAL B 104       9.011 -12.078  29.000  1.00 24.36           C
ATOM   2549  CG2 VAL B 104       8.331 -11.299  26.761  1.00 18.41           C
ATOM   2550  N   GLU B 105       6.412 -11.040  31.054  1.00 24.39           N
ATOM   2551  CA  GLU B 105       6.196 -10.852  32.487  1.00 29.12           C
ATOM   2552  C   GLU B 105       6.750 -12.019  33.288  1.00 28.98           C
ATOM   2553  O   GLU B 105       7.000 -13.108  32.773  1.00 30.27           O
ATOM   2554  CB  GLU B 105       4.701 -10.734  32.808  1.00 30.63           C
ATOM   2555  CG  GLU B 105       4.062  -9.369  32.595  1.00 39.92           C
ATOM   2556  CD  GLU B 105       2.526  -9.459  32.506  1.00 42.62           C
ATOM   2557  OE1 GLU B 105       2.005  -9.648  31.381  1.00 42.57           O
ATOM   2558  OE2 GLU B 105       1.843  -9.350  33.551  1.00 45.19           O
ATOM   2559  N   ILE B 106       6.876 -11.799  34.570  1.00 33.12           N
ATOM   2560  CA  ILE B 106       7.267 -12.868  35.482  1.00 35.68           C
ATOM   2561  C   ILE B 106       6.054 -13.726  35.830  1.00 37.13           C
ATOM   2562  O   ILE B 106       4.956 -13.209  36.085  1.00 41.31           O
```

[1884]

```
ATOM   2563  CB  ILE B 106       7.921 -12.269  36.737  1.00 33.78           C
ATOM   2564  CG1 ILE B 106       8.710 -11.002  36.315  1.00 32.66           C
ATOM   2565  CG2 ILE B 106       8.792 -13.339  37.396  1.00 36.63           C
ATOM   2566  CD1 ILE B 106       9.375 -10.136  37.429  1.00 31.61           C
ATOM   2567  N   LYS B 107       6.247 -15.049  35.827  1.00 38.50           N
ATOM   2568  CA  LYS B 107       5.171 -15.966  36.194  1.00 43.25           C
ATOM   2569  C   LYS B 107       4.590 -15.549  37.543  1.00 43.18           C
ATOM   2570  O   LYS B 107       5.308 -15.070  38.427  1.00 43.15           O
ATOM   2571  CB  LYS B 107       5.685 -17.425  36.233  1.00 38.91           C
ATOM   2572  CG  LYS B 107       4.650 -18.526  35.828  1.00 43.75           C
ATOM   2573  CD  LYS B 107       3.295 -18.273  36.514  1.00 52.38           C
ATOM   2574  CE  LYS B 107       2.099 -19.082  36.010  1.00 50.72           C
ATOM   2575  NZ  LYS B 107       0.954 -18.652  36.857  1.00 54.53           N
ATOM   2576  O   ALA B 108       3.447 -17.683  39.558  1.00 49.22           O
ATOM   2577  N   ALA B 108       3.258 -15.627  37.633  1.00 47.74           N
ATOM   2578  CA  ALA B 108       2.550 -15.545  38.904  1.00 49.48           C
ATOM   2579  C   ALA B 108       3.149 -16.530  39.898  1.00 52.31           C
ATOM   2580  CB  ALA B 108       1.062 -15.852  38.699  1.00 48.49           C
ATOM   2581  O   GLY B 109       6.009 -17.808  42.831  1.00 52.49           O
ATOM   2582  N   GLY B 109       3.325 -16.073  41.136  1.00 48.10           N
ATOM   2583  CA  GLY B 109       3.917 -16.928  42.141  1.00 50.21           C
ATOM   2584  C   GLY B 109       5.402 -17.141  41.985  1.00 46.42           C
ATOM   2585  O   GLY B 110       7.298 -14.190  40.959  1.00 41.83           O
ATOM   2586  N   GLY B 110       6.006 -16.593  40.938  1.00 47.53           N
ATOM   2587  CA  GLY B 110       7.448 -16.573  40.809  1.00 43.24           C
ATOM   2588  C   GLY B 110       8.022 -15.186  41.010  1.00 40.23           C
ATOM   2589  O   GLY B 111      11.695 -14.792  39.956  1.00 31.31           O
ATOM   2590  N   GLY B 111       9.333 -15.111  41.247  1.00 37.46           N
ATOM   2591  CA  GLY B 111      10.009 -13.845  41.385  1.00 29.38           C
ATOM   2592  C   GLY B 111      11.230 -13.784  40.483  1.00 28.76           C
ATOM   2593  O   SER B 112      12.507 -10.048  40.195  1.00 25.00           O
ATOM   2594  N   SER B 112      11.726 -12.566  40.303  1.00 28.90           N
ATOM   2595  CA  SER B 112      12.841 -12.286  39.420  1.00 24.33           C
ATOM   2596  C   SER B 112      13.290 -10.860  39.706  1.00 25.79           C
ATOM   2597  CB  SER B 112      12.427 -12.481  37.968  1.00 26.67           C
ATOM   2598  OG  SER B 112      13.215 -11.710  37.104  1.00 30.88           O
ATOM   2599  O   GLY B 113      17.278  -9.542  38.872  1.00 25.34           O
ATOM   2600  N   GLY B 113      14.557 -10.564  39.420  1.00 23.84           N
ATOM   2601  CA  GLY B 113      15.050  -9.229  39.647  1.00 21.14           C
ATOM   2602  C   GLY B 113      16.241  -8.876  38.791  1.00 24.04           C
ATOM   2603  O   GLY B 114      17.395  -5.663  38.898  1.00 28.64           O
ATOM   2604  N   GLY B 114      16.103  -7.836  37.962  1.00 26.11           N
ATOM   2605  CA  GLY B 114      17.194  -7.317  37.162  1.00 26.48           C
ATOM   2606  C   GLY B 114      17.843  -6.124  37.847  1.00 28.44           C
ATOM   2607  O   SER B 115      19.989  -2.216  37.729  1.00 32.50           O
ATOM   2608  N   SER B 115      18.963  -5.676  37.282  1.00 29.13           N
ATOM   2609  CA  SER B 115      19.741  -4.590  37.889  1.00 31.21           C
ATOM   2610  C   SER B 115      19.290  -3.205  37.442  1.00 35.35           C
ATOM   2611  CB  SER B 115      21.237  -4.769  37.613  1.00 27.58           C
ATOM   2612  OG  SER B 115      21.485  -4.833  36.230  1.00 30.87           O
ATOM   2613  O   GLY B 116      18.990  -2.201  34.244  1.00 28.23           O
ATOM   2614  N   GLY B 116      18.195  -3.123  36.674  1.00 31.52           N
ATOM   2615  CA  GLY B 116      17.698  -1.839  36.247  1.00 28.56           C
ATOM   2616  C   GLY B 116      18.462  -1.391  35.014  1.00 30.49           C
ATOM   2617  O   GLY B 117      17.603  -0.307  32.244  1.00 26.96           O
ATOM   2618  N   GLY B 117      18.544  -0.076  34.845  1.00 30.17           N
ATOM   2619  CA  GLY B 117      19.287   0.469  33.732  1.00 24.17           C
ATOM   2620  C   GLY B 117      18.387   0.600  32.521  1.00 25.53           C
ATOM   2621  O   CYS B 118      20.096   2.354  29.740  1.00 25.57           O
ATOM   2622  N   CYS B 118      18.465   1.711  31.818  1.00 26.05           N
ATOM   2623  CA  CYS B 118      17.875   1.934  30.513  1.00 21.91           C
ATOM   2624  C   CYS B 118      18.952   2.007  29.441  1.00 23.69           C
ATOM   2625  CB  CYS B 118      17.099   3.246  30.488  1.00 23.18           C
ATOM   2626  SG  CYS B 118      15.533   3.238  31.325  1.00 30.35           S
ATOM   2627  O   PRO B 119      18.994   4.280  27.300  1.00 25.58           O
ATOM   2628  N   PRO B 119      18.635   1.700  28.186  1.00 23.37           N
ATOM   2629  CA  PRO B 119      19.597   1.968  27.117  1.00 24.83           C
ATOM   2630  C   PRO B 119      19.871   3.439  27.010  1.00 23.12           C
```

[1885]

```
ATOM   2631  CB  PRO B 119      18.875   1.454  25.864  1.00 23.00           C
ATOM   2632  CG  PRO B 119      17.775   0.630  26.346  1.00 24.98           C
ATOM   2633  CD  PRO B 119      17.379   1.146  27.674  1.00 23.24           C
ATOM   2634  O   PRO B 120      20.200   5.251  24.254  1.00 28.92           O
ATOM   2635  N   PRO B 120      21.071   3.834  26.568  1.00 25.94           N
ATOM   2636  CA  PRO B 120      21.362   5.252  26.336  1.00 27.84           C
ATOM   2637  C   PRO B 120      20.426   5.841  25.302  1.00 27.20           C
ATOM   2638  CB  PRO B 120      22.793   5.238  25.804  1.00 30.18           C
ATOM   2639  CG  PRO B 120      23.309   3.900  26.094  1.00 30.58           C
ATOM   2640  CD  PRO B 120      22.192   2.968  26.186  1.00 26.42           C
ATOM   2641  O   CYS B 121      20.016   9.667  25.619  1.00 32.31           O
ATOM   2642  N   CYS B 121      19.932   7.038  25.569  1.00 28.75           N
ATOM   2643  CA  CYS B 121      19.055   7.721  24.624  1.00 29.34           C
ATOM   2644  C   CYS B 121      19.354   9.203  24.696  1.00 31.70           C
ATOM   2645  CB  CYS B 121      17.560   7.500  24.925  1.00 25.64           C
ATOM   2646  SG  CYS B 121      17.019   8.000  26.588  1.00 28.79           S
ATOM   2647  O   GLY B 122      21.173  11.433  22.892  1.00 33.96           O
ATOM   2648  N   GLY B 122      18.829   9.958  23.739  1.00 30.67           N
ATOM   2649  CA  GLY B 122      18.959  11.405  23.842  1.00 32.27           C
ATOM   2650  C   GLY B 122      20.407  11.851  23.772  1.00 36.32           C
ATOM   2651  O   GLY B 123      24.235  12.820  25.794  1.00 41.56           O
ATOM   2652  N   GLY B 123      20.788  12.725  24.710  1.00 37.46           N
ATOM   2653  CA  GLY B 123      22.126  13.261  24.813  1.00 32.56           C
ATOM   2654  C   GLY B 123      23.070  12.443  25.647  1.00 35.62           C
ATOM   2655  O   SER B 124      24.781   8.571  27.129  1.00 47.36           O
ATOM   2656  N   SER B 124      22.592  11.343  26.238  1.00 35.34           N
ATOM   2657  CA  SER B 124      23.440  10.536  27.161  1.00 36.51           C
ATOM   2658  C   SER B 124      24.223   9.433  26.440  1.00 40.86           C
ATOM   2659  CB  SER B 124      22.613   9.986  28.270  1.00 33.04           C
ATOM   2660  O   GLY B 125      26.869   9.841  24.611  1.00 48.72           O
ATOM   2661  N   GLY B 125      24.258   9.450  25.112  1.00 42.60           N
ATOM   2662  CA  GLY B 125      24.977   8.444  24.307  1.00 43.91           C
ATOM   2663  C   GLY B 125      26.442   8.775  24.135  1.00 50.70           C
ATOM   2664  O   GLY B 126      29.290   9.732  21.548  1.00 52.10           O
ATOM   2665  N   GLY B 126      27.210   7.866  23.538  1.00 46.79           N
ATOM   2666  CA  GLY B 126      28.604   8.227  23.247  1.00 50.77           C
ATOM   2667  C   GLY B 126      28.797   8.621  21.794  1.00 53.15           C
ATOM   2668  N   GLU B 127      28.405   7.749  20.866  1.00 53.46           N
ATOM   2669  CA  GLU B 127      28.618   8.021  19.419  1.00 46.62           C
ATOM   2670  C   GLU B 127      27.731   9.155  18.908  1.00 43.50           C
ATOM   2671  O   GLU B 127      28.265  10.059  18.262  1.00 47.22           O
ATOM   2672  CB  GLU B 127      28.342   6.764  18.592  1.00 43.37           C
ATOM   2673  N   VAL B 128      26.452   9.144  19.248  1.00 39.87           N
ATOM   2674  CA  VAL B 128      25.513  10.121  18.634  1.00 35.47           C
ATOM   2675  C   VAL B 128      24.596  10.712  19.698  1.00 32.73           C
ATOM   2676  O   VAL B 128      24.448  10.104  20.758  1.00 35.97           O
ATOM   2677  CB  VAL B 128      24.717   9.474  17.480  1.00 31.71           C
ATOM   2678  CG1 VAL B 128      25.625   9.074  16.331  1.00 33.97           C
ATOM   2679  CG2 VAL B 128      23.941   8.265  17.950  1.00 28.77           C
ATOM   2680  N   GLN B 129      24.010  11.861  19.399  1.00 26.00           N
ATOM   2681  CA  GLN B 129      23.161  12.554  20.382  1.00 27.51           C
ATOM   2682  C   GLN B 129      21.886  13.077  19.720  1.00 27.35           C
ATOM   2683  O   GLN B 129      21.979  13.606  18.615  1.00 29.72           O
ATOM   2684  CB  GLN B 129      23.973  13.671  21.045  1.00 31.38           C
ATOM   2685  CG  GLN B 129      25.249  13.208  21.736  1.00 33.76           C
ATOM   2686  CD  GLN B 129      26.465  13.344  20.852  1.00 40.70           C
ATOM   2687  NE2 GLN B 129      27.365  12.378  20.932  1.00 42.51           N
ATOM   2688  OE1 GLN B 129      26.595  14.295  20.091  1.00 39.32           O
ATOM   2689  N   LEU B 130      20.745  12.915  20.382  1.00 26.42           N
ATOM   2690  CA  LEU B 130      19.471  13.452  19.888  1.00 29.27           C
ATOM   2691  C   LEU B 130      18.737  14.149  21.023  1.00 30.29           C
ATOM   2692  O   LEU B 130      18.176  13.492  21.911  1.00 30.15           O
ATOM   2693  CB  LEU B 130      18.582  12.361  19.277  1.00 25.56           C
ATOM   2694  CG  LEU B 130      18.960  11.659  17.980  1.00 26.49           C
ATOM   2695  CD1 LEU B 130      17.935  10.564  17.729  1.00 23.75           C
ATOM   2696  CD2 LEU B 130      19.035  12.627  16.812  1.00 22.18           C
ATOM   2697  N   LEU B 131      18.692  15.477  20.970  1.00 28.23           N
ATOM   2698  CA  LEU B 131      18.129  16.280  22.045  1.00 28.92           C
```

[1886]

```
ATOM   2699  C   LEU B 131      16.773  16.828  21.629  1.00 27.58           C
ATOM   2700  O   LEU B 131      16.667  17.526  20.616  1.00 31.59           O
ATOM   2701  CB  LEU B 131      19.132  17.379  22.376  1.00 29.52           C
ATOM   2702  CG  LEU B 131      20.329  16.581  22.890  1.00 34.26           C
ATOM   2703  CD1 LEU B 131      21.656  17.283  22.673  1.00 38.39           C
ATOM   2704  CD2 LEU B 131      20.114  16.109  24.364  1.00 35.67           C
ATOM   2705  N   GLU B 132      15.732  16.517  22.372  1.00 26.90           N
ATOM   2706  CA  GLU B 132      14.395  16.946  21.983  1.00 30.53           C
ATOM   2707  C   GLU B 132      13.951  18.175  22.767  1.00 32.85           C
ATOM   2708  O   GLU B 132      14.551  18.537  23.774  1.00 36.09           O
ATOM   2709  CB  GLU B 132      13.410  15.788  22.137  1.00 27.64           C
ATOM   2710  CG  GLU B 132      13.790  14.676  21.197  1.00 28.34           C
ATOM   2711  CD  GLU B 132      12.833  13.530  21.185  1.00 30.61           C
ATOM   2712  OE1 GLU B 132      13.304  12.392  21.417  1.00 29.15           O
ATOM   2713  OE2 GLU B 132      11.631  13.757  20.925  1.00 27.92           O
ATOM   2714  N   SER B 133      12.911  18.833  22.259  1.00 32.45           N
ATOM   2715  CA  SER B 133      12.290  19.995  22.881  1.00 33.36           C
ATOM   2716  C   SER B 133      11.003  20.312  22.127  1.00 32.35           C
ATOM   2717  O   SER B 133      10.828  19.888  20.981  1.00 35.23           O
ATOM   2718  CB  SER B 133      13.232  21.192  22.869  1.00 32.00           C
ATOM   2719  OG  SER B 133      13.461  21.572  21.534  1.00 34.50           O
ATOM   2720  N   GLY B 134      10.078  20.997  22.794  1.00 30.64           N
ATOM   2721  CA  GLY B 134       8.860  21.456  22.141  1.00 29.87           C
ATOM   2722  C   GLY B 134       7.561  20.924  22.719  1.00 32.96           C
ATOM   2723  O   GLY B 134       6.481  21.349  22.268  1.00 37.06           O
ATOM   2724  N   GLY B 135       7.605  19.962  23.633  1.00 35.76           N
ATOM   2725  CA  GLY B 135       6.402  19.418  24.236  1.00 37.36           C
ATOM   2726  C   GLY B 135       5.696  20.379  25.193  1.00 34.99           C
ATOM   2727  O   GLY B 135       6.121  21.508  25.435  1.00 39.18           O
ATOM   2728  N   GLY B 136       4.582  19.911  25.741  1.00 31.06           N
ATOM   2729  CA  GLY B 136       3.859  20.669  26.739  1.00 31.79           C
ATOM   2730  C   GLY B 136       2.363  20.475  26.579  1.00 36.48           C
ATOM   2731  O   GLY B 136       1.902  19.595  25.855  1.00 35.62           O
ATOM   2732  N   LEU B 137       1.602  21.312  27.287  1.00 35.76           N
ATOM   2733  CA  LEU B 137       0.146  21.285  27.206  1.00 36.65           C
ATOM   2734  C   LEU B 137      -0.435  22.204  26.146  1.00 38.92           C
ATOM   2735  O   LEU B 137       0.056  23.315  25.924  1.00 40.71           O
ATOM   2736  CB  LEU B 137      -0.458  21.534  28.592  1.00 39.31           C
ATOM   2737  CG  LEU B 137      -1.971  21.539  28.668  1.00 38.67           C
ATOM   2738  CD1 LEU B 137      -2.417  20.250  29.175  1.00 41.49           C
ATOM   2739  CD2 LEU B 137      -2.188  22.467  29.814  1.00 41.71           C
ATOM   2740  N   VAL B 138      -1.452  21.684  25.445  1.00 37.82           N
ATOM   2741  CA  VAL B 138      -2.199  22.368  24.398  1.00 35.28           C
ATOM   2742  C   VAL B 138      -3.637  21.870  24.431  1.00 38.00           C
ATOM   2743  O   VAL B 138      -3.922  20.775  24.927  1.00 37.76           O
ATOM   2744  CB  VAL B 138      -1.612  22.108  23.003  1.00 37.30           C
ATOM   2745  CG1 VAL B 138      -2.114  23.127  22.021  1.00 37.30           C
ATOM   2746  CG2 VAL B 138      -0.129  22.155  23.059  1.00 38.67           C
ATOM   2747  N   GLN B 139      -4.551  22.718  23.988  1.00 37.12           N
ATOM   2748  CA  GLN B 139      -5.955  22.376  23.880  1.00 37.92           C
ATOM   2749  C   GLN B 139      -6.305  21.929  22.474  1.00 33.44           C
ATOM   2750  O   GLN B 139      -5.625  22.281  21.504  1.00 34.63           O
ATOM   2751  CB  GLN B 139      -6.840  23.552  24.310  1.00 42.15           C
ATOM   2752  CG  GLN B 139      -6.484  24.047  25.703  1.00 45.10           C
ATOM   2753  CD  GLN B 139      -7.172  25.339  26.086  1.00 55.86           C
ATOM   2754  NE2 GLN B 139      -6.930  25.796  27.326  1.00 51.00           N
ATOM   2755  OE1 GLN B 139      -7.937  25.908  25.299  1.00 58.24           O
ATOM   2756  N   PRO B 140      -7.362  21.127  22.333  1.00 34.81           N
ATOM   2757  CA  PRO B 140      -7.779  20.647  21.010  1.00 34.53           C
ATOM   2758  C   PRO B 140      -7.930  21.796  20.035  1.00 32.60           C
ATOM   2759  O   PRO B 140      -8.409  22.868  20.397  1.00 37.26           O
ATOM   2760  CB  PRO B 140      -9.117  19.963  21.303  1.00 32.22           C
ATOM   2761  CG  PRO B 140      -8.944  19.453  22.692  1.00 35.02           C
ATOM   2762  CD  PRO B 140      -8.177  20.540  23.411  1.00 36.17           C
ATOM   2763  N   GLY B 141      -7.415  21.611  18.816  1.00 32.78           N
ATOM   2764  CA  GLY B 141      -7.422  22.643  17.814  1.00 33.61           C
ATOM   2765  C   GLY B 141      -6.066  23.290  17.626  1.00 34.38           C
ATOM   2766  O   GLY B 141      -5.775  23.808  16.537  1.00 36.61           O
```

[1887]

```
ATOM   2767  N   GLY B 142      -5.256  23.320  18.687  1.00 35.06           N
ATOM   2768  CA  GLY B 142      -4.046  24.106  18.695  1.00 34.44           C
ATOM   2769  C   GLY B 142      -2.907  23.413  17.986  1.00 30.09           C
ATOM   2770  O   GLY B 142      -3.085  22.453  17.235  1.00 32.10           O
ATOM   2771  N   SER B 143      -1.705  23.928  18.228  1.00 27.99           N
ATOM   2772  CA  SER B 143      -0.561  23.556  17.419  1.00 31.46           C
ATOM   2773  C   SER B 143       0.708  23.504  18.266  1.00 32.08           C
ATOM   2774  O   SER B 143       0.812  24.152  19.307  1.00 31.89           O
ATOM   2775  CB  SER B 143      -0.438  24.522  16.241  1.00 29.99           C
ATOM   2776  OG  SER B 143       0.861  24.511  15.684  1.00 36.71           O
ATOM   2777  N   LEU B 144       1.716  22.805  17.745  1.00 32.77           N
ATOM   2778  CA  LEU B 144       2.993  22.640  18.424  1.00 33.17           C
ATOM   2779  C   LEU B 144       4.034  22.225  17.410  1.00 32.86           C
ATOM   2780  O   LEU B 144       3.720  21.613  16.387  1.00 37.13           O
ATOM   2781  CB  LEU B 144       2.950  21.571  19.513  1.00 32.61           C
ATOM   2782  CG  LEU B 144       2.475  21.853  20.923  1.00 35.37           C
ATOM   2783  CD1 LEU B 144       2.574  20.566  21.749  1.00 33.61           C
ATOM   2784  CD2 LEU B 144       3.315  22.953  21.532  1.00 34.81           C
ATOM   2785  N   ARG B 145       5.279  22.559  17.704  1.00 32.90           N
ATOM   2786  CA  ARG B 145       6.384  22.201  16.836  1.00 31.10           C
ATOM   2787  C   ARG B 145       7.419  21.525  17.709  1.00 32.43           C
ATOM   2788  O   ARG B 145       7.935  22.143  18.642  1.00 34.71           O
ATOM   2789  CB  ARG B 145       7.001  23.427  16.183  1.00 31.31           C
ATOM   2790  CG  ARG B 145       8.074  23.055  15.198  1.00 31.34           C
ATOM   2791  CD  ARG B 145       8.836  24.272  14.809  1.00 32.41           C
ATOM   2792  NE  ARG B 145       9.381  24.144  13.471  1.00 34.47           N
ATOM   2793  CZ  ARG B 145      10.228  25.014  12.935  1.00 34.61           C
ATOM   2794  NH1 ARG B 145      10.647  26.056  13.659  1.00 37.08           N
ATOM   2795  NH2 ARG B 145      10.643  24.841  11.681  1.00 30.31           N
ATOM   2796  N   LEU B 146       7.717  20.265  17.424  1.00 33.05           N
ATOM   2797  CA  LEU B 146       8.776  19.573  18.132  1.00 27.89           C
ATOM   2798  C   LEU B 146      10.060  19.754  17.343  1.00 27.14           C
ATOM   2799  O   LEU B 146      10.037  19.840  16.114  1.00 29.10           O
ATOM   2800  CB  LEU B 146       8.435  18.085  18.280  1.00 29.59           C
ATOM   2801  CG  LEU B 146       7.025  17.894  18.860  1.00 28.90           C
ATOM   2802  CD1 LEU B 146       6.596  16.430  18.903  1.00 26.16           C
ATOM   2803  CD2 LEU B 146       6.918  18.550  20.246  1.00 28.94           C
ATOM   2804  N   SER B 147      11.174  19.829  18.059  1.00 29.08           N
ATOM   2805  CA  SER B 147      12.510  19.902  17.483  1.00 28.09           C
ATOM   2806  C   SER B 147      13.315  18.723  18.000  1.00 29.23           C
ATOM   2807  O   SER B 147      13.042  18.173  19.068  1.00 28.70           O
ATOM   2808  CB  SER B 147      13.274  21.192  17.862  1.00 30.96           C
ATOM   2809  OG  SER B 147      12.594  22.381  17.501  1.00 36.73           O
ATOM   2810  N   CYS B 148      14.322  18.353  17.229  1.00 27.76           N
ATOM   2811  CA  CYS B 148      15.173  17.219  17.554  1.00 27.04           C
ATOM   2812  C   CYS B 148      16.544  17.608  17.019  1.00 27.20           C
ATOM   2813  O   CYS B 148      16.779  17.572  15.807  1.00 29.99           O
ATOM   2814  CB  CYS B 148      14.647  15.937  16.917  1.00 28.98           C
ATOM   2815  SG  CYS B 148      15.698  14.488  17.138  1.00 32.89           S
ATOM   2816  N   ALA B 149      17.420  18.025  17.909  1.00 25.74           N
ATOM   2817  CA  ALA B 149      18.712  18.531  17.487  1.00 27.30           C
ATOM   2818  C   ALA B 149      19.682  17.368  17.525  1.00 23.00           C
ATOM   2819  O   ALA B 149      19.861  16.744  18.571  1.00 27.11           O
ATOM   2820  CB  ALA B 149      19.172  19.682  18.382  1.00 26.54           C
ATOM   2821  N   ALA B 150      20.288  17.067  16.388  1.00 25.98           N
ATOM   2822  CA  ALA B 150      21.148  15.904  16.249  1.00 25.41           C
ATOM   2823  C   ALA B 150      22.600  16.336  16.304  1.00 24.10           C
ATOM   2824  O   ALA B 150      22.936  17.443  15.891  1.00 28.76           O
ATOM   2825  CB  ALA B 150      20.879  15.190  14.929  1.00 24.20           C
ATOM   2826  N   SER B 151      23.455  15.468  16.835  1.00 26.00           N
ATOM   2827  CA  SER B 151      24.886  15.735  16.778  1.00 26.86           C
ATOM   2828  C   SER B 151      25.634  14.421  16.890  1.00 25.55           C
ATOM   2829  O   SER B 151      25.079  13.397  17.296  1.00 29.67           O
ATOM   2830  CB  SER B 151      25.327  16.738  17.860  1.00 30.45           C
ATOM   2831  OG  SER B 151      25.072  16.273  19.178  1.00 31.87           O
ATOM   2832  N   GLY B 152      26.891  14.453  16.478  1.00 22.51           N
ATOM   2833  CA  GLY B 152      27.737  13.277  16.539  1.00 28.23           C
ATOM   2834  C   GLY B 152      27.771  12.407  15.292  1.00 31.32           C
```

[1888]

```
ATOM   2835  O   GLY B 152      28.512  11.409  15.268  1.00 29.93           O
ATOM   2836  N   PHE B 153      27.059  12.777  14.230  1.00 28.47           N
ATOM   2837  CA  PHE B 153      27.064  11.980  13.007  1.00 27.79           C
ATOM   2838  C   PHE B 153      26.736  12.894  11.836  1.00 27.24           C
ATOM   2839  O   PHE B 153      26.358  14.056  12.021  1.00 25.01           O
ATOM   2840  CB  PHE B 153      26.096  10.791  13.103  1.00 26.41           C
ATOM   2841  CG  PHE B 153      24.651  11.183  13.285  1.00 23.35           C
ATOM   2842  CD1 PHE B 153      24.172  11.547  14.515  1.00 24.53           C
ATOM   2843  CD2 PHE B 153      23.777  11.159  12.212  1.00 24.31           C
ATOM   2844  CE1 PHE B 153      22.831  11.885  14.692  1.00 25.08           C
ATOM   2845  CE2 PHE B 153      22.443  11.496  12.371  1.00 23.91           C
ATOM   2846  CZ  PHE B 153      21.970  11.860  13.614  1.00 22.21           C
ATOM   2847  N   THR B 154      26.935  12.385  10.617  1.00 24.95           N
ATOM   2848  CA  THR B 154      26.661  13.183   9.426  1.00 23.49           C
ATOM   2849  C   THR B 154      25.151  13.193   9.211  1.00 24.07           C
ATOM   2850  O   THR B 154      24.575  12.306   8.582  1.00 25.64           O
ATOM   2851  CB  THR B 154      27.420  12.618   8.239  1.00 26.67           C
ATOM   2852  CG2 THR B 154      27.467  13.615   7.109  1.00 20.06           C
ATOM   2853  OG1 THR B 154      28.771  12.386   8.641  1.00 31.03           O
ATOM   2854  N   PHE B 155      24.508  14.231   9.741  1.00 22.87           N
ATOM   2855  CA  PHE B 155      23.048  14.302   9.788  1.00 23.68           C
ATOM   2856  C   PHE B 155      22.396  13.985   8.442  1.00 27.61           C
ATOM   2857  O   PHE B 155      21.436  13.205   8.371  1.00 24.60           O
ATOM   2858  CB  PHE B 155      22.656  15.685  10.258  1.00 23.71           C
ATOM   2859  CG  PHE B 155      21.222  15.843  10.532  1.00 23.38           C
ATOM   2860  CD1 PHE B 155      20.596  15.040  11.460  1.00 24.44           C
ATOM   2861  CD2 PHE B 155      20.502  16.856   9.912  1.00 26.91           C
ATOM   2862  CE1 PHE B 155      19.240  15.216  11.764  1.00 23.55           C
ATOM   2863  CE2 PHE B 155      19.143  17.051  10.203  1.00 26.78           C
ATOM   2864  CZ  PHE B 155      18.514  16.214  11.136  1.00 24.50           C
ATOM   2865  N   SER B 156      22.915  14.574   7.356  1.00 28.95           N
ATOM   2866  CA  SER B 156      22.299  14.477   6.036  1.00 27.89           C
ATOM   2867  C   SER B 156      22.438  13.088   5.414  1.00 28.95           C
ATOM   2868  O   SER B 156      21.726  12.789   4.445  1.00 26.42           O
ATOM   2869  CB  SER B 156      22.928  15.510   5.107  1.00 25.08           C
ATOM   2870  OG  SER B 156      24.310  15.228   4.946  1.00 25.77           O
ATOM   2871  N   SER B 157      23.293  12.227   5.968  1.00 25.60           N
ATOM   2872  CA  SER B 157      23.431  10.859   5.503  1.00 26.19           C
ATOM   2873  C   SER B 157      22.420   9.913   6.125  1.00 23.53           C
ATOM   2874  O   SER B 157      22.482   8.711   5.868  1.00 24.25           O
ATOM   2875  CB  SER B 157      24.846  10.352   5.780  1.00 27.44           C
ATOM   2876  OG  SER B 157      25.783  11.112   5.042  1.00 28.69           O
ATOM   2877  N   TYR B 158      21.467  10.417   6.903  1.00 24.28           N
ATOM   2878  CA  TYR B 158      20.557   9.545   7.620  1.00 23.17           C
ATOM   2879  C   TYR B 158      19.139  10.062   7.508  1.00 24.69           C
ATOM   2880  O   TYR B 158      18.866  11.232   7.804  1.00 25.23           O
ATOM   2881  CB  TYR B 158      20.965   9.421   9.098  1.00 23.60           C
ATOM   2882  CG  TYR B 158      22.312   8.761   9.263  1.00 23.09           C
ATOM   2883  CD1 TYR B 158      22.410   7.384   9.355  1.00 25.26           C
ATOM   2884  CD2 TYR B 158      23.493   9.508   9.273  1.00 24.56           C
ATOM   2885  CE1 TYR B 158      23.641   6.751   9.484  1.00 27.94           C
ATOM   2886  CE2 TYR B 158      24.744   8.876   9.404  1.00 26.48           C
ATOM   2887  CZ  TYR B 158      24.801   7.501   9.516  1.00 27.27           C
ATOM   2888  OH  TYR B 158      26.005   6.841   9.653  1.00 29.04           O
ATOM   2889  N   ALA B 159      18.243   9.189   7.076  1.00 22.45           N
ATOM   2890  CA  ALA B 159      16.839   9.497   7.245  1.00 23.52           C
ATOM   2891  C   ALA B 159      16.497   9.502   8.736  1.00 23.16           C
ATOM   2892  O   ALA B 159      17.183   8.908   9.569  1.00 22.95           O
ATOM   2893  CB  ALA B 159      15.984   8.498   6.470  1.00 22.94           C
ATOM   2894  N   MET B 160      15.415  10.176   9.076  1.00 22.55           N
ATOM   2895  CA  MET B 160      14.992  10.313  10.455  1.00 24.48           C
ATOM   2896  C   MET B 160      13.519   9.968  10.550  1.00 23.85           C
ATOM   2897  O   MET B 160      12.822   9.904   9.534  1.00 24.55           O
ATOM   2898  CB  MET B 160      15.238  11.738  10.980  1.00 24.06           C
ATOM   2899  CG  MET B 160      16.716  12.167  11.022  1.00 25.73           C
ATOM   2900  SD  MET B 160      17.621  11.510  12.446  1.00 29.26           S
ATOM   2901  CE  MET B 160      19.083  10.923  11.640  1.00 25.43           C
ATOM   2902  N   SER B 161      13.053   9.734  11.781  1.00 23.58           N
```

[1889]

```
ATOM   2903  CA  SER B 161      11.672   9.330  11.999  1.00 23.49           C
ATOM   2904  C   SER B 161      11.119   9.963  13.272  1.00 25.69           C
ATOM   2905  O   SER B 161      11.867  10.333  14.178  1.00 25.24           O
ATOM   2906  CB  SER B 161      11.560   7.815  12.082  1.00 25.78           C
ATOM   2907  OG  SER B 161      10.202   7.448  12.246  1.00 27.33           O
ATOM   2908  N   TRP B 162       9.790  10.094  13.340  1.00 23.69           N
ATOM   2909  CA  TRP B 162       9.097  10.403  14.586  1.00 23.38           C
ATOM   2910  C   TRP B 162       8.210   9.220  14.938  1.00 23.21           C
ATOM   2911  O   TRP B 162       7.440   8.731  14.098  1.00 23.88           O
ATOM   2912  CB  TRP B 162       8.238  11.682  14.487  1.00 21.24           C
ATOM   2913  CG  TRP B 162       9.011  12.926  14.380  1.00 21.47           C
ATOM   2914  CD1 TRP B 162       9.338  13.598  13.240  1.00 26.31           C
ATOM   2915  CD2 TRP B 162       9.575  13.667  15.454  1.00 25.43           C
ATOM   2916  CE2 TRP B 162      10.234  14.780  14.895  1.00 26.17           C
ATOM   2917  CE3 TRP B 162       9.586  13.504  16.840  1.00 22.94           C
ATOM   2918  NE1 TRP B 162      10.079  14.715  13.538  1.00 23.73           N
ATOM   2919  CZ2 TRP B 162      10.905  15.711  15.672  1.00 27.11           C
ATOM   2920  CZ3 TRP B 162      10.245  14.429  17.612  1.00 23.95           C
ATOM   2921  CH2 TRP B 162      10.900  15.521  17.027  1.00 27.24           C
ATOM   2922  N   VAL B 163       8.303   8.790  16.183  1.00 25.27           N
ATOM   2923  CA  VAL B 163       7.530   7.684  16.731  1.00 24.73           C
ATOM   2924  C   VAL B 163       6.918   8.190  18.033  1.00 23.35           C
ATOM   2925  O   VAL B 163       7.601   8.842  18.828  1.00 23.95           O
ATOM   2926  CB  VAL B 163       8.427   6.440  16.968  1.00 24.14           C
ATOM   2927  CG1 VAL B 163       7.697   5.369  17.775  1.00 22.98           C
ATOM   2928  CG2 VAL B 163       8.929   5.859  15.630  1.00 21.27           C
ATOM   2929  N   ARG B 164       5.632   7.945  18.239  1.00 23.27           N
ATOM   2930  CA  ARG B 164       5.003   8.426  19.457  1.00 23.66           C
ATOM   2931  C   ARG B 164       4.488   7.241  20.254  1.00 26.06           C
ATOM   2932  O   ARG B 164       4.312   6.139  19.719  1.00 25.41           O
ATOM   2933  CB  ARG B 164       3.847   9.397  19.172  1.00 26.74           C
ATOM   2934  CG  ARG B 164       2.655   8.783  18.429  1.00 23.71           C
ATOM   2935  CD  ARG B 164       1.667   9.868  18.149  1.00 25.47           C
ATOM   2936  NE  ARG B 164       0.461   9.394  17.485  1.00 30.43           N
ATOM   2937  CZ  ARG B 164      -0.474  10.212  17.000  1.00 30.43           C
ATOM   2938  NH1 ARG B 164      -0.322  11.526  17.114  1.00 29.54           N
ATOM   2939  NH2 ARG B 164      -1.561   9.727  16.417  1.00 30.90           N
ATOM   2940  N   GLN B 165       4.221   7.484  21.537  1.00 23.04           N
ATOM   2941  CA  GLN B 165       3.698   6.449  22.421  1.00 25.78           C
ATOM   2942  C   GLN B 165       2.703   7.061  23.388  1.00 25.71           C
ATOM   2943  O   GLN B 165       3.089   7.796  24.295  1.00 26.62           O
ATOM   2944  CB  GLN B 165       4.842   5.775  23.161  1.00 24.10           C
ATOM   2945  CG  GLN B 165       4.395   4.709  24.078  1.00 24.28           C
ATOM   2946  CD  GLN B 165       5.532   3.840  24.448  1.00 25.57           C
ATOM   2947  NE2 GLN B 165       5.314   2.537  24.365  1.00 21.71           N
ATOM   2948  OE1 GLN B 165       6.617   4.329  24.825  1.00 26.03           O
ATOM   2949  N   ALA B 166       1.424   6.781  23.196  1.00 29.73           N
ATOM   2950  CA  ALA B 166       0.435   7.282  24.148  1.00 30.83           C
ATOM   2951  C   ALA B 166       0.606   6.590  25.496  1.00 33.53           C
ATOM   2952  O   ALA B 166       1.107   5.464  25.568  1.00 34.83           O
ATOM   2953  CB  ALA B 166      -0.985   7.069  23.650  1.00 28.05           C
ATOM   2954  N   PRO B 167       0.227   7.263  26.581  1.00 33.62           N
ATOM   2955  CA  PRO B 167       0.455   6.709  27.927  1.00 32.87           C
ATOM   2956  C   PRO B 167      -0.067   5.288  28.085  1.00 35.13           C
ATOM   2957  O   PRO B 167      -1.246   4.989  27.822  1.00 37.68           O
ATOM   2958  CB  PRO B 167      -0.257   7.707  28.833  1.00 34.78           C
ATOM   2959  CG  PRO B 167      -0.416   8.948  28.045  1.00 37.22           C
ATOM   2960  CD  PRO B 167      -0.212   8.677  26.637  1.00 35.56           C
ATOM   2961  N   GLY B 168       0.829   4.377  28.480  1.00 31.17           N
ATOM   2962  CA  GLY B 168       0.462   2.993  28.685  1.00 32.00           C
ATOM   2963  C   GLY B 168       0.112   2.238  27.426  1.00 33.30           C
ATOM   2964  O   GLY B 168      -0.377   1.112  27.518  1.00 34.49           O
ATOM   2965  N   LYS B 169       0.361   2.803  26.248  1.00 33.98           N
ATOM   2966  CA  LYS B 169       0.051   2.142  24.988  1.00 29.10           C
ATOM   2967  C   LYS B 169       1.308   1.871  24.173  1.00 26.75           C
ATOM   2968  O   LYS B 169       2.432   2.092  24.624  1.00 28.40           O
ATOM   2969  CB  LYS B 169      -0.977   2.950  24.197  1.00 32.27           C
ATOM   2970  CG  LYS B 169      -2.367   2.989  24.880  1.00 37.36           C
```

[1890]

```
ATOM   2971  CD  LYS B 169      -2.907   1.545  24.940  1.00 39.46           C
ATOM   2972  CE  LYS B 169      -4.177   1.363  25.766  1.00 42.41           C
ATOM   2973  NZ  LYS B 169      -4.710  -0.028  25.562  1.00 44.71           N
ATOM   2974  N   GLY B 170       1.095   1.357  22.949  1.00 29.20           N
ATOM   2975  CA  GLY B 170       2.185   0.859  22.139  1.00 23.58           C
ATOM   2976  C   GLY B 170       2.885   1.939  21.347  1.00 24.50           C
ATOM   2977  O   GLY B 170       2.507   3.110  21.329  1.00 27.27           O
ATOM   2978  N   LEU B 171       3.961   1.534  20.688  1.00 22.58           N
ATOM   2979  CA  LEU B 171       4.662   2.427  19.786  1.00 23.58           C
ATOM   2980  C   LEU B 171       3.843   2.622  18.520  1.00 23.00           C
ATOM   2981  O   LEU B 171       3.301   1.660  17.971  1.00 23.42           O
ATOM   2982  CB  LEU B 171       6.033   1.851  19.439  1.00 22.03           C
ATOM   2983  CG  LEU B 171       6.979   1.595  20.608  1.00 21.27           C
ATOM   2984  CD1 LEU B 171       8.202   0.934  20.029  1.00 17.81           C
ATOM   2985  CD2 LEU B 171       7.341   2.895  21.322  1.00 21.47           C
ATOM   2986  N   GLU B 172       3.811   3.860  18.016  1.00 28.11           N
ATOM   2987  CA  GLU B 172       3.039   4.200  16.819  1.00 27.06           C
ATOM   2988  C   GLU B 172       3.910   5.069  15.930  1.00 24.37           C
ATOM   2989  O   GLU B 172       4.326   6.162  16.341  1.00 23.43           O
ATOM   2990  CB  GLU B 172       1.743   4.957  17.170  1.00 27.62           C
ATOM   2991  CG  GLU B 172       0.927   5.329  15.904  1.00 34.78           C
ATOM   2992  CD  GLU B 172      -0.331   6.168  16.177  1.00 36.08           C
ATOM   2993  OE1 GLU B 172      -1.223   6.193  15.320  1.00 42.29           O
ATOM   2994  OE2 GLU B 172      -0.506   6.679  17.286  1.00 36.43           O
ATOM   2995  N   TRP B 173       4.170   4.597  14.715  1.00 24.51           N
ATOM   2996  CA  TRP B 173       4.995   5.354  13.784  1.00 23.18           C
ATOM   2997  C   TRP B 173       4.219   6.572  13.327  1.00 25.12           C
ATOM   2998  O   TRP B 173       3.012   6.494  13.090  1.00 24.98           O
ATOM   2999  CB  TRP B 173       5.402   4.492  12.589  1.00 26.17           C
ATOM   3000  CG  TRP B 173       6.307   5.162  11.576  1.00 25.13           C
ATOM   3001  CD1 TRP B 173       7.656   5.344  11.663  1.00 22.53           C
ATOM   3002  CD2 TRP B 173       5.909   5.716  10.325  1.00 23.66           C
ATOM   3003  CE2 TRP B 173       7.064   6.212   9.699  1.00 24.77           C
ATOM   3004  CE3 TRP B 173       4.685   5.829   9.665  1.00 25.94           C
ATOM   3005  NE1 TRP B 173       8.121   5.969  10.538  1.00 23.47           N
ATOM   3006  CZ2 TRP B 173       7.031   6.829   8.449  1.00 25.96           C
ATOM   3007  CZ3 TRP B 173       4.654   6.439   8.426  1.00 24.97           C
ATOM   3008  CH2 TRP B 173       5.821   6.931   7.829  1.00 23.70           C
ATOM   3009  N   VAL B 174       4.894   7.718  13.297  1.00 21.80           N
ATOM   3010  CA  VAL B 174       4.287   8.981  12.906  1.00 24.67           C
ATOM   3011  C   VAL B 174       4.752   9.425  11.528  1.00 24.78           C
ATOM   3012  O   VAL B 174       3.935   9.692  10.642  1.00 24.39           O
ATOM   3013  CB  VAL B 174       4.567  10.069  13.965  1.00 26.25           C
ATOM   3014  CG1 VAL B 174       4.037  11.430  13.511  1.00 25.71           C
ATOM   3015  CG2 VAL B 174       3.924   9.643  15.292  1.00 26.55           C
ATOM   3016  N   SER B 175       6.062   9.484  11.318  1.00 23.44           N
ATOM   3017  CA  SER B 175       6.537  10.143  10.120  1.00 23.99           C
ATOM   3018  C   SER B 175       8.008   9.815   9.914  1.00 22.78           C
ATOM   3019  O   SER B 175       8.727   9.550  10.883  1.00 23.11           O
ATOM   3020  CB  SER B 175       6.343  11.656  10.267  1.00 23.41           C
ATOM   3021  OG  SER B 175       6.753  12.312   9.097  1.00 27.48           O
ATOM   3022  N   ALA B 176       8.449   9.868   8.658  1.00 23.09           N
ATOM   3023  CA  ALA B 176       9.864   9.751   8.327  1.00 24.50           C
ATOM   3024  C   ALA B 176      10.191  10.691   7.187  1.00 22.45           C
ATOM   3025  O   ALA B 176       9.313  11.072   6.409  1.00 23.36           O
ATOM   3026  CB  ALA B 176      10.261   8.330   7.931  1.00 25.90           C
ATOM   3027  N   ILE B 177      11.481  11.028   7.079  1.00 21.51           N
ATOM   3028  CA  ILE B 177      11.998  11.979   6.107  1.00 22.85           C
ATOM   3029  C   ILE B 177      13.387  11.519   5.653  1.00 24.99           C
ATOM   3030  O   ILE B 177      14.209  11.080   6.465  1.00 20.94           O
ATOM   3031  CB  ILE B 177      12.037  13.405   6.715  1.00 25.43           C
ATOM   3032  CG1 ILE B 177      12.402  14.463   5.654  1.00 25.44           C
ATOM   3033  CG2 ILE B 177      13.015  13.495   7.873  1.00 20.98           C
ATOM   3034  CD1 ILE B 177      12.216  15.902   6.135  1.00 22.56           C
ATOM   3035  N   SER B 178      13.656  11.620   4.351  1.00 23.94           N
ATOM   3036  CA  SER B 178      14.940  11.166   3.826  1.00 24.45           C
ATOM   3037  C   SER B 178      16.070  12.090   4.269  1.00 26.54           C
ATOM   3038  O   SER B 178      15.850  13.211   4.752  1.00 25.83           O
```

[1891]

```
ATOM   3039  CB  SER B 178      14.898  11.098   2.302  1.00 30.98           C
ATOM   3040  OG  SER B 178      14.689  12.403   1.768  1.00 28.94           O
ATOM   3041  N   GLY B 179      17.304  11.620   4.065  1.00 24.26           N
ATOM   3042  CA  GLY B 179      18.449  12.400   4.509  1.00 26.15           C
ATOM   3043  C   GLY B 179      18.457  13.815   3.960  1.00 30.08           C
ATOM   3044  O   GLY B 179      18.659  14.780   4.703  1.00 31.17           O
ATOM   3045  N   SER B 180      18.163  13.963   2.669  1.00 29.74           N
ATOM   3046  CA  SER B 180      18.161  15.254   2.003  1.00 27.35           C
ATOM   3047  C   SER B 180      16.933  16.073   2.331  1.00 28.36           C
ATOM   3048  O   SER B 180      16.963  17.297   2.160  1.00 31.67           O
ATOM   3049  CB  SER B 180      18.164  15.070   0.487  1.00 31.35           C
ATOM   3050  OG  SER B 180      16.859  14.659   0.066  1.00 27.81           O
ATOM   3051  N   GLY B 181      15.863  15.431   2.800  1.00 28.23           N
ATOM   3052  CA  GLY B 181      14.582  16.089   2.968  1.00 25.91           C
ATOM   3053  C   GLY B 181      13.651  15.976   1.782  1.00 27.94           C
ATOM   3054  O   GLY B 181      12.492  16.411   1.883  1.00 29.27           O
ATOM   3055  N   GLY B 182      14.094  15.359   0.680  1.00 29.59           N
ATOM   3056  CA  GLY B 182      13.303  15.347  -0.541  1.00 28.87           C
ATOM   3057  C   GLY B 182      12.087  14.448  -0.509  1.00 28.72           C
ATOM   3058  O   GLY B 182      11.201  14.595  -1.354  1.00 31.82           O
ATOM   3059  N   SER B 183      12.030  13.507   0.428  1.00 32.23           N
ATOM   3060  CA  SER B 183      10.919  12.578   0.547  1.00 27.09           C
ATOM   3061  C   SER B 183      10.419  12.575   1.983  1.00 26.30           C
ATOM   3062  O   SER B 183      11.219  12.527   2.920  1.00 27.53           O
ATOM   3063  CB  SER B 183      11.361  11.161   0.172  1.00 29.53           C
ATOM   3064  OG  SER B 183      12.131  11.151  -1.023  1.00 29.11           O
ATOM   3065  N   THR B 184       9.100  12.606   2.159  1.00 24.50           N
ATOM   3066  CA  THR B 184       8.501  12.569   3.483  1.00 25.68           C
ATOM   3067  C   THR B 184       7.320  11.611   3.472  1.00 27.55           C
ATOM   3068  O   THR B 184       6.619  11.479   2.456  1.00 26.64           O
ATOM   3069  CB  THR B 184       8.008  13.933   3.954  1.00 24.94           C
ATOM   3070  CG2 THR B 184       9.152  14.925   4.029  1.00 24.47           C
ATOM   3071  OG1 THR B 184       7.026  14.404   3.029  1.00 30.04           O
ATOM   3072  N   TYR B 185       7.089  10.968   4.623  1.00 24.72           N
ATOM   3073  CA  TYR B 185       6.073   9.938   4.768  1.00 24.67           C
ATOM   3074  C   TYR B 185       5.270  10.200   6.024  1.00 25.05           C
ATOM   3075  O   TYR B 185       5.801  10.718   6.998  1.00 28.50           O
ATOM   3076  CB  TYR B 185       6.712   8.549   4.826  1.00 24.78           C
ATOM   3077  CG  TYR B 185       7.646   8.344   3.669  1.00 25.94           C
ATOM   3078  CD2 TYR B 185       8.993   8.687   3.757  1.00 25.55           C
ATOM   3079  CD1 TYR B 185       7.166   7.878   2.462  1.00 27.40           C
ATOM   3080  CE2 TYR B 185       9.845   8.511   2.679  1.00 25.07           C
ATOM   3081  CE1 TYR B 185       8.006   7.711   1.372  1.00 27.67           C
ATOM   3082  CZ  TYR B 185       9.345   8.025   1.488  1.00 25.56           C
ATOM   3083  OH  TYR B 185      10.168   7.856   0.391  1.00 27.43           O
ATOM   3084  N   TYR B 186       3.978   9.854   5.995  1.00 25.14           N
ATOM   3085  CA  TYR B 186       3.111  10.146   7.127  1.00 24.49           C
ATOM   3086  C   TYR B 186       2.203   8.966   7.412  1.00 26.91           C
ATOM   3087  O   TYR B 186       1.752   8.270   6.499  1.00 25.55           O
ATOM   3088  CB  TYR B 186       2.234  11.378   6.890  1.00 27.16           C
ATOM   3089  CG  TYR B 186       3.026  12.627   6.692  1.00 24.12           C
ATOM   3090  CD1 TYR B 186       3.406  13.402   7.764  1.00 24.00           C
ATOM   3091  CD2 TYR B 186       3.417  13.011   5.424  1.00 24.94           C
ATOM   3092  CE1 TYR B 186       4.148  14.548   7.571  1.00 26.76           C
ATOM   3093  CE2 TYR B 186       4.149  14.145   5.220  1.00 25.38           C
ATOM   3094  CZ  TYR B 186       4.514  14.912   6.292  1.00 25.30           C
ATOM   3095  OH  TYR B 186       5.266  16.042   6.068  1.00 25.27           O
ATOM   3096  N   ALA B 187       1.915   8.783   8.695  1.00 22.96           N
ATOM   3097  CA  ALA B 187       0.890   7.858   9.115  1.00 28.54           C
ATOM   3098  C   ALA B 187      -0.482   8.365   8.695  1.00 29.86           C
ATOM   3099  O   ALA B 187      -0.727   9.567   8.609  1.00 29.05           O
ATOM   3100  CB  ALA B 187       0.942   7.673  10.625  1.00 25.45           C
ATOM   3101  N   ASP B 188      -1.391   7.425   8.454  1.00 32.76           N
ATOM   3102  CA  ASP B 188      -2.730   7.795   8.020  1.00 34.36           C
ATOM   3103  C   ASP B 188      -3.321   8.843   8.947  1.00 34.51           C
ATOM   3104  O   ASP B 188      -3.788   9.896   8.496  1.00 38.78           O
ATOM   3105  CB  ASP B 188      -3.631   6.557   7.987  1.00 33.30           C
ATOM   3106  CG  ASP B 188      -3.259   5.581   6.882  1.00 36.26           C
```

[1892]

```
ATOM   3107  OD1 ASP B 188      -2.429   5.924   6.006  1.00 36.01           O
ATOM   3108  OD2 ASP B 188      -3.808   4.457   6.892  1.00 38.70           O
ATOM   3109  N   SER B 189      -3.233   8.606  10.255  1.00 36.31           N
ATOM   3110  CA  SER B 189      -3.959   9.430  11.221  1.00 34.36           C
ATOM   3111  C   SER B 189      -3.423  10.843  11.361  1.00 35.77           C
ATOM   3112  O   SER B 189      -4.038  11.647  12.071  1.00 38.11           O
ATOM   3113  CB  SER B 189      -3.933   8.759  12.598  1.00 32.94           C
ATOM   3114  OG  SER B 189      -2.594   8.593  13.054  1.00 36.56           O
ATOM   3115  N   VAL B 190      -2.310  11.186  10.720  1.00 34.11           N
ATOM   3116  CA  VAL B 190      -1.736  12.518  10.885  1.00 33.92           C
ATOM   3117  C   VAL B 190      -1.574  13.249   9.563  1.00 36.54           C
ATOM   3118  O   VAL B 190      -1.076  14.378   9.557  1.00 33.27           O
ATOM   3119  CB  VAL B 190      -0.397  12.481  11.663  1.00 31.03           C
ATOM   3120  CG1 VAL B 190      -0.567  11.694  12.939  1.00 29.28           C
ATOM   3121  CG2 VAL B 190       0.767  11.935  10.823  1.00 25.72           C
ATOM   3122  N   LYS B 191      -1.916  12.623   8.423  1.00 35.06           N
ATOM   3123  CA  LYS B 191      -1.809  13.382   7.175  1.00 37.35           C
ATOM   3124  C   LYS B 191      -2.773  14.564   7.146  1.00 39.07           C
ATOM   3125  O   LYS B 191      -3.889  14.504   7.675  1.00 42.78           O
ATOM   3126  CB  LYS B 191      -2.032  12.576   5.897  1.00 36.96           C
ATOM   3127  CG  LYS B 191      -1.104  11.494   5.395  1.00 40.09           C
ATOM   3128  CD  LYS B 191      -1.884  11.290   4.118  1.00 43.79           C
ATOM   3129  CE  LYS B 191      -1.404  12.172   2.960  1.00 48.48           C
ATOM   3130  NZ  LYS B 191      -2.256  12.021   1.705  1.00 53.91           N
ATOM   3131  N   GLY B 192      -2.335  15.653   6.521  1.00 36.33           N
ATOM   3132  CA  GLY B 192      -3.126  16.866   6.517  1.00 37.68           C
ATOM   3133  C   GLY B 192      -3.044  17.669   7.800  1.00 39.42           C
ATOM   3134  O   GLY B 192      -3.528  18.814   7.838  1.00 39.75           O
ATOM   3135  N   ARG B 193      -2.494  17.086   8.873  1.00 34.72           N
ATOM   3136  CA  ARG B 193      -2.330  17.803  10.124  1.00 33.87           C
ATOM   3137  C   ARG B 193      -0.883  17.997  10.569  1.00 33.45           C
ATOM   3138  O   ARG B 193      -0.592  19.011  11.198  1.00 32.48           O
ATOM   3139  CB  ARG B 193      -3.102  17.074  11.228  1.00 35.06           C
ATOM   3140  CG  ARG B 193      -4.512  16.781  10.797  1.00 34.61           C
ATOM   3141  CD  ARG B 193      -5.336  16.230  11.920  1.00 34.29           C
ATOM   3142  NE  ARG B 193      -4.748  15.026  12.481  1.00 36.56           N
ATOM   3143  CZ  ARG B 193      -4.377  14.919  13.754  1.00 38.21           C
ATOM   3144  NH1 ARG B 193      -4.541  15.940  14.587  1.00 35.55           N
ATOM   3145  NH2 ARG B 193      -3.845  13.789  14.203  1.00 37.60           N
ATOM   3146  N   PHE B 194       0.040  17.079  10.252  1.00 34.05           N
ATOM   3147  CA  PHE B 194       1.424  17.200  10.704  1.00 27.11           C
ATOM   3148  C   PHE B 194       2.339  17.339   9.509  1.00 25.87           C
ATOM   3149  O   PHE B 194       2.014  16.904   8.407  1.00 30.09           O
ATOM   3150  CB  PHE B 194       1.939  15.987  11.535  1.00 28.73           C
ATOM   3151  CG  PHE B 194       1.171  15.702  12.823  1.00 30.17           C
ATOM   3152  CD1 PHE B 194       0.138  16.519  13.265  1.00 33.19           C
ATOM   3153  CD2 PHE B 194       1.553  14.646  13.635  1.00 34.23           C
ATOM   3154  CE1 PHE B 194      -0.555  16.235  14.449  1.00 31.80           C
ATOM   3155  CE2 PHE B 194       0.876  14.376  14.836  1.00 30.28           C
ATOM   3156  CZ  PHE B 194      -0.175  15.170  15.235  1.00 33.01           C
ATOM   3157  N   THR B 195       3.487  17.956   9.720  1.00 27.15           N
ATOM   3158  CA  THR B 195       4.491  18.021   8.665  1.00 28.30           C
ATOM   3159  C   THR B 195       5.859  17.729   9.268  1.00 27.90           C
ATOM   3160  O   THR B 195       6.271  18.384  10.226  1.00 28.62           O
ATOM   3161  CB  THR B 195       4.498  19.385   7.974  1.00 27.08           C
ATOM   3162  CG2 THR B 195       5.546  19.385   6.888  1.00 27.89           C
ATOM   3163  OG1 THR B 195       3.224  19.615   7.371  1.00 27.00           O
ATOM   3164  N   ILE B 196       6.526  16.754   8.745  1.00 27.17           N
ATOM   3165  CA  ILE B 196       7.903  16.484   9.125  1.00 27.46           C
ATOM   3166  C   ILE B 196       8.765  17.384   8.263  1.00 27.31           C
ATOM   3167  O   ILE B 196       8.425  17.696   7.121  1.00 30.05           O
ATOM   3168  CB  ILE B 196       8.269  14.990   8.943  1.00 26.71           C
ATOM   3169  CG1 ILE B 196       9.586  14.649   9.659  1.00 25.67           C
ATOM   3170  CG2 ILE B 196       8.374  14.627   7.482  1.00 22.15           C
ATOM   3171  CD1 ILE B 196       9.918  13.151   9.682  1.00 23.95           C
ATOM   3172  N   SER B 197       9.860  17.863   8.819  1.00 27.63           N
ATOM   3173  CA  SER B 197      10.769  18.667   8.026  1.00 26.89           C
ATOM   3174  C   SER B 197      12.149  18.528   8.629  1.00 29.93           C
```

[1893]

```
ATOM   3175  O   SER B 197      12.335  17.936   9.695  1.00 30.37           O
ATOM   3176  CB  SER B 197      10.377  20.148   7.985  1.00 27.57           C
ATOM   3177  OG  SER B 197      10.480  20.723   9.285  1.00 26.70           O
ATOM   3178  N   ARG B 198      13.118  19.095   7.937  1.00 29.57           N
ATOM   3179  CA  ARG B 198      14.494  18.913   8.336  1.00 27.93           C
ATOM   3180  C   ARG B 198      15.301  20.105   7.814  1.00 33.57           C
ATOM   3181  O   ARG B 198      14.998  20.638   6.740  1.00 33.32           O
ATOM   3182  CB  ARG B 198      14.929  17.564   7.767  1.00 28.91           C
ATOM   3183  CG  ARG B 198      16.341  17.390   7.478  1.00 30.36           C
ATOM   3184  CD  ARG B 198      16.555  16.089   6.759  1.00 26.43           C
ATOM   3185  NE  ARG B 198      17.792  15.514   7.269  1.00 27.43           N
ATOM   3186  CZ  ARG B 198      17.939  14.250   7.634  1.00 26.87           C
ATOM   3187  NH1 ARG B 198      16.926  13.396   7.493  1.00 27.56           N
ATOM   3188  NH2 ARG B 198      19.108  13.842   8.128  1.00 26.73           N
ATOM   3189  N   ASP B 199      16.280  20.556   8.607  1.00 33.58           N
ATOM   3190  CA  ASP B 199      17.191  21.644   8.244  1.00 31.98           C
ATOM   3191  C   ASP B 199      18.609  21.123   8.420  1.00 29.47           C
ATOM   3192  O   ASP B 199      19.154  21.161   9.525  1.00 30.32           O
ATOM   3193  CB  ASP B 199      16.951  22.885   9.098  1.00 30.24           C
ATOM   3194  CG  ASP B 199      17.873  24.055   8.724  1.00 35.39           C
ATOM   3195  OD1 ASP B 199      18.973  23.842   8.146  1.00 37.36           O
ATOM   3196  OD2 ASP B 199      17.495  25.206   9.021  1.00 36.97           O
ATOM   3197  N   ASN B 200      19.225  20.675   7.339  1.00 31.96           N
ATOM   3198  CA  ASN B 200      20.514  20.008   7.491  1.00 32.26           C
ATOM   3199  C   ASN B 200      21.642  20.960   7.876  1.00 31.58           C
ATOM   3200  O   ASN B 200      22.663  20.502   8.400  1.00 33.64           O
ATOM   3201  CB  ASN B 200      20.852  19.252   6.207  1.00 32.43           C
ATOM   3202  CG  ASN B 200      19.984  18.003   6.021  1.00 31.07           C
ATOM   3203  ND2 ASN B 200      20.077  17.375   4.844  1.00 28.45           N
ATOM   3204  OD1 ASN B 200      19.262  17.598   6.937  1.00 28.29           O
ATOM   3205  N   SER B 201      21.475  22.273   7.667  1.00 35.38           N
ATOM   3206  CA  SER B 201      22.490  23.225   8.123  1.00 34.15           C
ATOM   3207  C   SER B 201      22.452  23.374   9.637  1.00 35.45           C
ATOM   3208  O   SER B 201      23.499  23.550  10.268  1.00 38.78           O
ATOM   3209  CB  SER B 201      22.304  24.591   7.460  1.00 37.28           C
ATOM   3210  OG  SER B 201      21.071  25.186   7.828  1.00 36.68           O
ATOM   3211  N   LYS B 202      21.256  23.319  10.236  1.00 34.08           N
ATOM   3212  CA  LYS B 202      21.079  23.387  11.684  1.00 31.85           C
ATOM   3213  C   LYS B 202      20.996  22.005  12.364  1.00 33.10           C
ATOM   3214  O   LYS B 202      20.780  21.934  13.585  1.00 29.48           O
ATOM   3215  CB  LYS B 202      19.831  24.221  11.998  1.00 34.50           C
ATOM   3216  N   ASN B 203      21.164  20.917  11.601  1.00 33.47           N
ATOM   3217  CA  ASN B 203      21.121  19.523  12.083  1.00 29.47           C
ATOM   3218  C   ASN B 203      19.907  19.293  12.968  1.00 26.14           C
ATOM   3219  O   ASN B 203      19.994  18.681  14.026  1.00 26.65           O
ATOM   3220  CB  ASN B 203      22.387  19.134  12.840  1.00 26.85           C
ATOM   3221  CG  ASN B 203      23.607  19.262  11.994  1.00 30.62           C
ATOM   3222  ND2 ASN B 203      24.321  18.173  11.762  1.00 28.59           N
ATOM   3223  OD1 ASN B 203      23.928  20.371  11.580  1.00 40.33           O
ATOM   3224  N   THR B 204      18.750  19.743  12.512  1.00 28.32           N
ATOM   3225  CA  THR B 204      17.574  19.682  13.363  1.00 30.04           C
ATOM   3226  C   THR B 204      16.436  19.024  12.602  1.00 28.23           C
ATOM   3227  O   THR B 204      16.250  19.265  11.405  1.00 30.04           O
ATOM   3228  CB  THR B 204      17.177  21.084  13.824  1.00 29.22           C
ATOM   3229  CG2 THR B 204      16.072  21.032  14.848  1.00 26.63           C
ATOM   3230  OG1 THR B 204      18.309  21.680  14.454  1.00 35.84           O
ATOM   3231  N   LEU B 205      15.699  18.175  13.293  1.00 23.55           N
ATOM   3232  CA  LEU B 205      14.508  17.572  12.740  1.00 26.77           C
ATOM   3233  C   LEU B 205      13.325  18.290  13.354  1.00 24.91           C
ATOM   3234  O   LEU B 205      13.394  18.735  14.497  1.00 27.17           O
ATOM   3235  CB  LEU B 205      14.445  16.075  13.057  1.00 29.88           C
ATOM   3236  CG  LEU B 205      13.202  15.290  12.629  1.00 24.23           C
ATOM   3237  CD1 LEU B 205      13.245  15.081  11.138  1.00 20.43           C
ATOM   3238  CD2 LEU B 205      13.125  13.962  13.418  1.00 24.10           C
ATOM   3239  N   TYR B 206      12.253  18.444  12.581  1.00 27.47           N
ATOM   3240  CA  TYR B 206      11.067  19.126  13.086  1.00 29.35           C
ATOM   3241  C   TYR B 206       9.818  18.284  12.880  1.00 24.79           C
ATOM   3242  O   TYR B 206       9.686  17.552  11.890  1.00 24.14           O
```

[1894]

```
ATOM   3243  CB  TYR B 206      10.862  20.506  12.411  1.00 29.80           C
ATOM   3244  CG  TYR B 206      12.041  21.446  12.561  1.00 30.17           C
ATOM   3245  CD1 TYR B 206      12.222  22.183  13.724  1.00 31.01           C
ATOM   3246  CD2 TYR B 206      12.965  21.607  11.531  1.00 28.23           C
ATOM   3247  CE1 TYR B 206      13.284  23.045  13.865  1.00 29.56           C
ATOM   3248  CE2 TYR B 206      14.030  22.458  11.665  1.00 29.61           C
ATOM   3249  CZ  TYR B 206      14.185  23.181  12.835  1.00 32.37           C
ATOM   3250  OH  TYR B 206      15.258  24.044  12.979  1.00 36.54           O
ATOM   3251  N   LEU B 207       8.878  18.436  13.807  1.00 23.47           N
ATOM   3252  CA  LEU B 207       7.530  17.924  13.604  1.00 29.72           C
ATOM   3253  C   LEU B 207       6.557  19.062  13.863  1.00 31.11           C
ATOM   3254  O   LEU B 207       6.358  19.465  15.013  1.00 32.52           O
ATOM   3255  CB  LEU B 207       7.225  16.724  14.495  1.00 27.15           C
ATOM   3256  CG  LEU B 207       5.840  16.118  14.214  1.00 25.22           C
ATOM   3257  CD1 LEU B 207       5.733  15.536  12.783  1.00 26.36           C
ATOM   3258  CD2 LEU B 207       5.564  15.071  15.226  1.00 24.14           C
ATOM   3259  N   GLN B 208       5.946  19.578  12.802  1.00 31.47           N
ATOM   3260  CA  GLN B 208       4.959  20.634  12.958  1.00 32.51           C
ATOM   3261  C   GLN B 208       3.596  19.963  13.082  1.00 31.60           C
ATOM   3262  O   GLN B 208       3.181  19.215  12.190  1.00 33.63           O
ATOM   3263  CB  GLN B 208       4.997  21.604  11.782  1.00 31.10           C
ATOM   3264  CG  GLN B 208       3.872  22.632  11.817  1.00 32.16           C
ATOM   3265  CD  GLN B 208       4.043  23.600  12.956  1.00 31.03           C
ATOM   3266  NE2 GLN B 208       2.975  23.816  13.708  1.00 33.75           N
ATOM   3267  OE1 GLN B 208       5.143  24.124  13.181  1.00 32.53           O
ATOM   3268  N   MET B 209       2.929  20.181  14.200  1.00 29.29           N
ATOM   3269  CA  MET B 209       1.665  19.514  14.463  1.00 32.84           C
ATOM   3270  C   MET B 209       0.596  20.592  14.485  1.00 35.22           C
ATOM   3271  O   MET B 209       0.708  21.556  15.252  1.00 34.65           O
ATOM   3272  CB  MET B 209       1.725  18.772  15.804  1.00 33.19           C
ATOM   3273  CG  MET B 209       2.941  17.858  15.959  1.00 29.31           C
ATOM   3274  SD  MET B 209       2.899  16.879  17.466  1.00 33.20           S
ATOM   3275  CE  MET B 209       3.071  18.130  18.683  1.00 31.81           C
ATOM   3276  N   ASN B 210      -0.447  20.413  13.680  1.00 31.48           N
ATOM   3277  CA  ASN B 210      -1.576  21.326  13.650  1.00 32.23           C
ATOM   3278  C   ASN B 210      -2.839  20.531  13.901  1.00 34.97           C
ATOM   3279  O   ASN B 210      -2.859  19.305  13.772  1.00 36.46           O
ATOM   3280  CB  ASN B 210      -1.739  22.069  12.314  1.00 30.70           C
ATOM   3281  CG  ASN B 210      -0.546  22.932  11.963  1.00 32.97           C
ATOM   3282  ND2 ASN B 210      -0.294  23.075  10.661  1.00 32.54           N
ATOM   3283  OD1 ASN B 210       0.088  23.539  12.841  1.00 31.90           O
ATOM   3284  N   SER B 211      -3.935  21.233  14.209  1.00 33.49           N
ATOM   3285  CA  SER B 211      -5.252  20.598  14.479  1.00 35.86           C
ATOM   3286  C   SER B 211      -5.089  19.459  15.486  1.00 35.11           C
ATOM   3287  O   SER B 211      -5.635  18.384  15.245  1.00 37.37           O
ATOM   3288  CB  SER B 211      -5.987  20.181  13.230  1.00 35.58           C
ATOM   3289  OG  SER B 211      -7.315  19.778  13.524  1.00 39.97           O
ATOM   3290  N   LEU B 212      -4.402  19.736  16.589  1.00 33.76           N
ATOM   3291  CA  LEU B 212      -4.118  18.689  17.606  1.00 33.58           C
ATOM   3292  C   LEU B 212      -5.409  18.174  18.232  1.00 35.92           C
ATOM   3293  O   LEU B 212      -6.346  18.955  18.382  1.00 36.00           O
ATOM   3294  CB  LEU B 212      -3.152  19.229  18.662  1.00 32.19           C
ATOM   3295  CG  LEU B 212      -1.663  19.035  18.392  1.00 33.59           C
ATOM   3296  CD1 LEU B 212      -1.328  17.583  18.116  1.00 34.29           C
ATOM   3297  CD2 LEU B 212      -1.214  19.903  17.242  1.00 34.30           C
ATOM   3298  N   ARG B 213      -5.445  16.875  18.528  1.00 34.65           N
ATOM   3299  CA  ARG B 213      -6.610  16.253  19.191  1.00 37.56           C
ATOM   3300  C   ARG B 213      -6.077  15.387  20.339  1.00 40.40           C
ATOM   3301  O   ARG B 213      -4.889  15.105  20.339  1.00 41.11           O
ATOM   3302  CB  ARG B 213      -7.482  15.484  18.197  1.00 35.56           C
ATOM   3303  CG  ARG B 213      -6.778  15.009  16.939  1.00 34.95           C
ATOM   3304  CD  ARG B 213      -7.788  14.970  15.814  1.00 37.49           C
ATOM   3305  NE  ARG B 213      -7.507  13.913  14.860  1.00 40.33           N
ATOM   3306  CZ  ARG B 213      -7.960  13.887  13.615  1.00 45.42           C
ATOM   3307  NH1 ARG B 213      -8.725  14.867  13.169  1.00 47.91           N
ATOM   3308  NH2 ARG B 213      -7.647  12.881  12.821  1.00 41.44           N
ATOM   3309  N   ALA B 214      -6.919  15.052  21.313  1.00 40.59           N
ATOM   3310  CA  ALA B 214      -6.481  14.278  22.501  1.00 38.77           C
```

[1895]

```
ATOM   3311  C   ALA B 214      -5.814  12.970  22.083  1.00 40.16           C
ATOM   3312  O   ALA B 214      -4.902  12.537  22.780  1.00 44.17           O
ATOM   3313  CB  ALA B 214      -7.657  14.050  23.411  1.00 36.33           C
ATOM   3314  N   GLU B 215      -6.257  12.377  20.983  1.00 39.25           N
ATOM   3315  CA  GLU B 215      -5.629  11.151  20.440  1.00 37.60           C
ATOM   3316  C   GLU B 215      -4.128  11.364  20.224  1.00 38.95           C
ATOM   3317  O   GLU B 215      -3.396  10.378  20.250  1.00 37.43           O
ATOM   3318  CB  GLU B 215      -6.350  10.857  19.124  1.00 41.53           C
ATOM   3319  CG  GLU B 215      -7.812  10.492  19.310  1.00 47.46           C
ATOM   3320  CD  GLU B 215      -8.842  11.598  19.145  1.00 49.14           C
ATOM   3321  OE1 GLU B 215      -9.865  11.348  18.488  1.00 58.27           O
ATOM   3322  OE2 GLU B 215      -8.636  12.693  19.691  1.00 51.39           O
ATOM   3323  N   ASP B 216      -3.693  12.610  20.037  1.00 36.24           N
ATOM   3324  CA  ASP B 216      -2.267  12.931  19.789  1.00 34.12           C
ATOM   3325  C   ASP B 216      -1.454  13.014  21.086  1.00 30.05           C
ATOM   3326  O   ASP B 216      -0.250  13.174  21.006  1.00 27.40           O
ATOM   3327  CB  ASP B 216      -2.147  14.222  18.981  1.00 33.26           C
ATOM   3328  CG  ASP B 216      -2.832  14.173  17.629  1.00 34.65           C
ATOM   3329  OD2 ASP B 216      -3.504  15.149  17.286  1.00 36.54           O
ATOM   3330  OD1 ASP B 216      -2.670  13.169  16.931  1.00 36.35           O
ATOM   3331  N   THR B 217      -2.114  12.918  22.236  1.00 31.78           N
ATOM   3332  CA  THR B 217      -1.401  12.963  23.538  1.00 32.88           C
ATOM   3333  C   THR B 217      -0.435  11.777  23.640  1.00 33.08           C
ATOM   3334  O   THR B 217      -0.861  10.695  23.735  1.00 31.24           O
ATOM   3335  CB  THR B 217      -2.392  13.102  24.703  1.00 34.49           C
ATOM   3336  CG2 THR B 217      -1.736  13.020  26.064  1.00 32.78           C
ATOM   3337  OG1 THR B 217      -3.136  14.311  24.579  1.00 36.07           O
ATOM   3338  N   ALA B 218       0.852  12.002  23.696  1.00 26.96           N
ATOM   3339  CA  ALA B 218       1.792  10.893  23.669  1.00 28.84           C
ATOM   3340  C   ALA B 218       3.169  11.443  23.969  1.00 28.06           C
ATOM   3341  O   ALA B 218       3.394  12.655  23.913  1.00 27.88           O
ATOM   3342  CB  ALA B 218       1.788  10.190  22.312  1.00 26.50           C
ATOM   3343  N   VAL B 219       4.092  10.535  24.274  1.00 25.27           N
ATOM   3344  CA  VAL B 219       5.515  10.857  24.209  1.00 24.41           C
ATOM   3345  C   VAL B 219       5.976  10.728  22.772  1.00 25.61           C
ATOM   3346  O   VAL B 219       5.700   9.716  22.108  1.00 24.64           O
ATOM   3347  CB  VAL B 219       6.333   9.944  25.132  1.00 24.34           C
ATOM   3348  CG1 VAL B 219       7.818  10.208  24.925  1.00 22.29           C
ATOM   3349  CG2 VAL B 219       5.948  10.189  26.580  1.00 25.70           C
ATOM   3350  N   TYR B 220       6.672  11.745  22.284  1.00 21.68           N
ATOM   3351  CA  TYR B 220       7.123  11.796  20.913  1.00 22.25           C
ATOM   3352  C   TYR B 220       8.621  11.581  20.925  1.00 22.43           C
ATOM   3353  O   TYR B 220       9.353  12.320  21.592  1.00 24.14           O
ATOM   3354  CB  TYR B 220       6.733  13.128  20.254  1.00 23.28           C
ATOM   3355  CG  TYR B 220       5.277  13.139  19.824  1.00 23.25           C
ATOM   3356  CD1 TYR B 220       4.255  13.289  20.749  1.00 24.97           C
ATOM   3357  CD2 TYR B 220       4.921  12.948  18.506  1.00 22.61           C
ATOM   3358  CE1 TYR B 220       2.909  13.254  20.362  1.00 24.38           C
ATOM   3359  CE2 TYR B 220       3.579  12.919  18.108  1.00 22.39           C
ATOM   3360  CZ  TYR B 220       2.589  13.071  19.044  1.00 22.02           C
ATOM   3361  OH  TYR B 220       1.267  13.056  18.653  1.00 22.92           O
ATOM   3362  N   TYR B 221       9.059  10.565  20.193  1.00 19.51           N
ATOM   3363  CA  TYR B 221      10.452  10.198  20.029  1.00 20.58           C
ATOM   3364  C   TYR B 221      10.903  10.548  18.623  1.00 23.39           C
ATOM   3365  O   TYR B 221      10.180  10.291  17.661  1.00 23.07           O
ATOM   3366  CB  TYR B 221      10.646   8.685  20.212  1.00 22.62           C
ATOM   3367  CG  TYR B 221      10.307   8.105  21.558  1.00 22.51           C
ATOM   3368  CD1 TYR B 221      11.263   8.073  22.577  1.00 24.45           C
ATOM   3369  CD2 TYR B 221       9.079   7.527  21.802  1.00 20.69           C
ATOM   3370  CE1 TYR B 221      10.984   7.538  23.802  1.00 23.11           C
ATOM   3371  CE2 TYR B 221       8.792   7.001  23.041  1.00 21.38           C
ATOM   3372  CZ  TYR B 221       9.750   7.010  24.032  1.00 23.31           C
ATOM   3373  OH  TYR B 221       9.484   6.462  25.277  1.00 29.98           O
ATOM   3374  N   CYS B 222      12.099  11.107  18.487  1.00 23.83           N
ATOM   3375  CA  CYS B 222      12.786  11.075  17.206  1.00 22.02           C
ATOM   3376  C   CYS B 222      13.818   9.951  17.229  1.00 25.78           C
ATOM   3377  O   CYS B 222      14.284   9.540  18.298  1.00 21.28           O
ATOM   3378  CB  CYS B 222      13.456  12.415  16.872  1.00 26.32           C
```

[1896]

```
ATOM   3379  SG  CYS B 222      14.597  13.026  18.107  1.00 32.36           S
ATOM   3380  N   ALA B 223      14.125   9.416  16.044  1.00 22.34           N
ATOM   3381  CA  ALA B 223      15.021   8.280  15.916  1.00 21.89           C
ATOM   3382  C   ALA B 223      15.721   8.325  14.572  1.00 22.32           C
ATOM   3383  O   ALA B 223      15.150   8.739  13.562  1.00 23.96           O
ATOM   3384  CB  ALA B 223      14.292   6.943  16.047  1.00 21.59           C
ATOM   3385  N   LYS B 224      16.959   7.857  14.577  1.00 21.36           N
ATOM   3386  CA  LYS B 224      17.807   7.837  13.404  1.00 21.16           C
ATOM   3387  C   LYS B 224      17.760   6.467  12.749  1.00 24.13           C
ATOM   3388  O   LYS B 224      17.945   5.448  13.423  1.00 23.79           O
ATOM   3389  CB  LYS B 224      19.239   8.159  13.811  1.00 21.19           C
ATOM   3390  N   TYR B 225      17.590   6.478  11.437  1.00 22.93           N
ATOM   3391  CA  TYR B 225      17.653   5.209  10.684  1.00 21.90           C
ATOM   3392  C   TYR B 225      19.115   4.826  10.497  1.00 22.26           C
ATOM   3393  O   TYR B 225      19.986   5.665  10.693  1.00 20.88           O
ATOM   3394  CB  TYR B 225      16.910   5.327   9.350  1.00 21.39           C
ATOM   3395  CG  TYR B 225      15.408   5.302   9.394  1.00 22.72           C
ATOM   3396  CD2 TYR B 225      14.680   6.472   9.303  1.00 23.82           C
ATOM   3397  CD1 TYR B 225      14.713   4.109   9.471  1.00 23.04           C
ATOM   3398  CE2 TYR B 225      13.299   6.464   9.318  1.00 24.40           C
ATOM   3399  CE1 TYR B 225      13.329   4.083   9.488  1.00 24.49           C
ATOM   3400  CZ  TYR B 225      12.620   5.267   9.419  1.00 27.45           C
ATOM   3401  OH  TYR B 225      11.259   5.261   9.441  1.00 28.39           O
ATOM   3402  N   ASP B 226      19.361   3.573  10.143  1.00 24.59           N
ATOM   3403  CA  ASP B 226      20.723   3.095   9.827  1.00 22.58           C
ATOM   3404  C   ASP B 226      20.550   1.957   8.827  1.00 27.19           C
ATOM   3405  O   ASP B 226      19.536   1.292   8.877  1.00 36.02           O
ATOM   3406  CB  ASP B 226      21.461   2.552  11.049  1.00 25.58           C
ATOM   3407  CG  ASP B 226      22.951   2.374  10.838  1.00 32.17           C
ATOM   3408  OD1 ASP B 226      23.631   3.379  10.585  1.00 33.17           O
ATOM   3409  OD2 ASP B 226      23.415   1.230  10.926  1.00 40.14           O
ATOM   3410  N   GLY B 227      21.498   1.761   7.946  1.00 22.99           N
ATOM   3411  CA  GLY B 227      21.393   0.593   7.050  1.00 29.51           C
ATOM   3412  C   GLY B 227      20.467   0.790   5.862  1.00 26.16           C
ATOM   3413  O   GLY B 227      20.348   1.934   5.407  1.00 26.31           O
ATOM   3414  N   ILE B 228      19.836  -0.285   5.387  1.00 21.97           N
ATOM   3415  CA  ILE B 228      18.965  -0.245   4.178  1.00 23.97           C
ATOM   3416  C   ILE B 228      17.668  -0.997   4.475  1.00 23.62           C
ATOM   3417  O   ILE B 228      16.791  -1.007   3.627  1.00 24.69           O
ATOM   3418  CB  ILE B 228      19.730  -0.857   2.980  1.00 22.99           C
ATOM   3419  CG1 ILE B 228      20.276  -2.249   3.305  1.00 22.69           C
ATOM   3420  CG2 ILE B 228      20.821   0.068   2.477  1.00 23.99           C
ATOM   3421  CD1 ILE B 228      20.788  -3.001   2.106  1.00 25.23           C
ATOM   3422  N   TYR B 229      17.565  -1.617   5.653  1.00 25.12           N
ATOM   3423  CA  TYR B 229      16.391  -2.388   6.031  1.00 23.38           C
ATOM   3424  C   TYR B 229      15.479  -1.607   6.952  1.00 21.91           C
ATOM   3425  O   TYR B 229      14.532  -2.172   7.513  1.00 23.64           O
ATOM   3426  CB  TYR B 229      16.804  -3.716   6.666  1.00 23.32           C
ATOM   3427  CG  TYR B 229      17.215  -4.737   5.625  1.00 25.64           C
ATOM   3428  CD2 TYR B 229      18.550  -4.910   5.294  1.00 24.50           C
ATOM   3429  CD1 TYR B 229      16.260  -5.510   4.961  1.00 39.00           C
ATOM   3430  CE2 TYR B 229      18.936  -5.836   4.343  1.00 25.31           C
ATOM   3431  CE1 TYR B 229      16.631  -6.442   4.012  1.00 26.64           C
ATOM   3432  CZ  TYR B 229      17.974  -6.594   3.700  1.00 27.58           C
ATOM   3433  OH  TYR B 229      18.370  -7.509   2.750  1.00 30.40           O
ATOM   3434  N   GLY B 230      15.711  -0.308   7.091  1.00 20.88           N
ATOM   3435  CA  GLY B 230      14.798   0.498   7.856  1.00 22.62           C
ATOM   3436  C   GLY B 230      14.941   0.403   9.350  1.00 20.54           C
ATOM   3437  O   GLY B 230      13.967   0.709  10.042  1.00 22.20           O
ATOM   3438  N   GLU B 231      16.113  -0.002   9.871  1.00 23.53           N
ATOM   3439  CA  GLU B 231      16.342  -0.036  11.324  1.00 21.86           C
ATOM   3440  C   GLU B 231      16.504   1.361  11.905  1.00 21.35           C
ATOM   3441  O   GLU B 231      17.177   2.206  11.327  1.00 23.29           O
ATOM   3442  CB  GLU B 231      17.662  -0.722  11.689  1.00 17.38           C
ATOM   3443  CG  GLU B 231      17.949  -1.844  10.989  1.00 23.46           C
ATOM   3444  CD  GLU B 231      18.755  -1.572   9.774  1.00 21.01           C
ATOM   3445  OE1 GLU B 231      19.971  -1.753   9.758  1.00 20.33           O
ATOM   3446  OE2 GLU B 231      18.148  -1.243   8.776  1.00 24.32           O
```

[1897]

```
ATOM   3447  N   LEU B 232      15.965   1.553  13.106  1.00 23.62           N
ATOM   3448  CA  LEU B 232      16.128   2.788  13.867  1.00 21.30           C
ATOM   3449  C   LEU B 232      17.116   2.467  14.978  1.00 20.33           C
ATOM   3450  O   LEU B 232      16.743   1.924  16.020  1.00 21.45           O
ATOM   3451  CB  LEU B 232      14.788   3.276  14.423  1.00 21.19           C
ATOM   3452  CG  LEU B 232      13.664   3.675  13.446  1.00 22.22           C
ATOM   3453  CD1 LEU B 232      12.352   3.798  14.197  1.00 19.15           C
ATOM   3454  CD2 LEU B 232      13.986   4.990  12.776  1.00 23.10           C
ATOM   3455  N   ASP B 233      18.377   2.838  14.795  1.00 22.82           N
ATOM   3456  CA  ASP B 233      19.375   2.364  15.746  1.00 24.54           C
ATOM   3457  C   ASP B 233      19.631   3.330  16.905  1.00 19.42           C
ATOM   3458  O   ASP B 233      20.256   2.940  17.874  1.00 23.11           O
ATOM   3459  CB  ASP B 233      20.687   1.999  15.021  1.00 23.47           C
ATOM   3460  CG  ASP B 233      21.442   3.195  14.485  1.00 27.77           C
ATOM   3461  OD2 ASP B 233      22.689   3.093  14.344  1.00 28.86           O
ATOM   3462  OD1 ASP B 233      20.811   4.232  14.170  1.00 28.60           O
ATOM   3463  N   PHE B 234      19.148   4.566  16.876  1.00 21.02           N
ATOM   3464  CA  PHE B 234      19.365   5.446  18.011  1.00 20.29           C
ATOM   3465  C   PHE B 234      18.139   6.328  18.198  1.00 20.14           C
ATOM   3466  O   PHE B 234      17.533   6.770  17.223  1.00 20.99           O
ATOM   3467  CB  PHE B 234      20.633   6.296  17.831  1.00 22.40           C
ATOM   3468  CG  PHE B 234      21.049   7.010  19.069  1.00 23.76           C
ATOM   3469  CD2 PHE B 234      20.673   8.321  19.273  1.00 27.13           C
ATOM   3470  CD1 PHE B 234      21.786   6.375  20.043  1.00 26.55           C
ATOM   3471  CE2 PHE B 234      21.045   9.014  20.435  1.00 29.60           C
ATOM   3472  CE1 PHE B 234      22.154   7.047  21.212  1.00 29.20           C
ATOM   3473  CZ  PHE B 234      21.776   8.367  21.405  1.00 29.62           C
ATOM   3474  N   TRP B 235      17.756   6.542  19.448  1.00 22.45           N
ATOM   3475  CA  TRP B 235      16.518   7.234  19.752  1.00 22.41           C
ATOM   3476  C   TRP B 235      16.756   8.362  20.740  1.00 25.98           C
ATOM   3477  O   TRP B 235      17.550   8.221  21.673  1.00 25.20           O
ATOM   3478  CB  TRP B 235      15.503   6.288  20.364  1.00 23.09           C
ATOM   3479  CG  TRP B 235      15.081   5.176  19.518  1.00 22.27           C
ATOM   3480  CD1 TRP B 235      15.868   4.185  18.989  1.00 21.14           C
ATOM   3481  CD2 TRP B 235      13.741   4.869  19.149  1.00 21.72           C
ATOM   3482  CE2 TRP B 235      13.780   3.709  18.364  1.00 20.64           C
ATOM   3483  CE3 TRP B 235      12.511   5.480  19.397  1.00 23.69           C
ATOM   3484  NE1 TRP B 235      15.090   3.303  18.281  1.00 23.42           N
ATOM   3485  CZ2 TRP B 235      12.638   3.138  17.828  1.00 21.01           C
ATOM   3486  CZ3 TRP B 235      11.379   4.913  18.865  1.00 22.41           C
ATOM   3487  CH2 TRP B 235      11.450   3.760  18.078  1.00 22.17           C
ATOM   3488  N   GLY B 236      15.998   9.454  20.573  1.00 26.17           N
ATOM   3489  CA  GLY B 236      15.872  10.442  21.630  1.00 24.82           C
ATOM   3490  C   GLY B 236      15.113   9.896  22.828  1.00 26.63           C
ATOM   3491  O   GLY B 236      14.480   8.841  22.782  1.00 28.74           O
ATOM   3492  N   CYS B 237      15.191  10.604  23.952  1.00 26.76           N
ATOM   3493  CA  CYS B 237      14.526  10.053  25.127  1.00 27.79           C
ATOM   3494  C   CYS B 237      13.038  10.357  25.149  1.00 27.83           C
ATOM   3495  O   CYS B 237      12.346   9.843  26.029  1.00 29.95           O
ATOM   3496  CB  CYS B 237      15.184  10.544  26.418  1.00 28.71           C
ATOM   3497  SG  CYS B 237      16.953  10.054  26.557  1.00 33.67           S
ATOM   3498  N   GLY B 238      12.540  11.179  24.230  1.00 27.81           N
ATOM   3499  CA  GLY B 238      11.130  11.503  24.136  1.00 24.09           C
ATOM   3500  C   GLY B 238      10.796  12.854  24.747  1.00 29.08           C
ATOM   3501  O   GLY B 238      11.479  13.349  25.649  1.00 26.38           O
ATOM   3502  N   THR B 239       9.730  13.473  24.240  1.00 28.52           N
ATOM   3503  CA  THR B 239       9.197  14.695  24.829  1.00 31.63           C
ATOM   3504  C   THR B 239       7.683  14.543  24.881  1.00 29.72           C
ATOM   3505  O   THR B 239       7.082  13.954  23.979  1.00 29.23           O
ATOM   3506  CB  THR B 239       9.617  15.967  24.050  1.00 30.03           C
ATOM   3507  CG2 THR B 239       9.030  15.975  22.671  1.00 30.67           C
ATOM   3508  OG1 THR B 239       9.158  17.141  24.741  1.00 32.42           O
ATOM   3509  N   LEU B 240       7.081  14.980  25.980  1.00 29.20           N
ATOM   3510  CA  LEU B 240       5.675  14.706  26.219  1.00 27.86           C
ATOM   3511  C   LEU B 240       4.821  15.807  25.612  1.00 31.10           C
ATOM   3512  O   LEU B 240       5.068  16.993  25.851  1.00 35.65           O
ATOM   3513  CB  LEU B 240       5.391  14.582  27.712  1.00 29.64           C
ATOM   3514  CG  LEU B 240       3.924  14.407  28.099  1.00 27.87           C
```

[1898]

```
ATOM   3515  CD1 LEU B 240       3.341  13.179  27.472  1.00 28.68           C
ATOM   3516  CD2 LEU B 240       3.812  14.328  29.601  1.00 29.79           C
ATOM   3517  N   VAL B 241       3.820  15.407  24.829  1.00 30.35           N
ATOM   3518  CA  VAL B 241       2.828  16.307  24.248  1.00 28.95           C
ATOM   3519  C   VAL B 241       1.465  15.964  24.847  1.00 30.85           C
ATOM   3520  O   VAL B 241       0.982  14.835  24.692  1.00 28.97           O
ATOM   3521  CB  VAL B 241       2.796  16.175  22.721  1.00 26.48           C
ATOM   3522  CG1 VAL B 241       1.483  16.704  22.169  1.00 26.34           C
ATOM   3523  CG2 VAL B 241       4.006  16.885  22.101  1.00 26.33           C
ATOM   3524  N   THR B 242       0.839  16.928  25.523  1.00 30.56           N
ATOM   3525  CA  THR B 242      -0.466  16.702  26.147  1.00 31.82           C
ATOM   3526  C   THR B 242      -1.517  17.613  25.517  1.00 38.71           C
ATOM   3527  O   THR B 242      -1.349  18.843  25.481  1.00 36.21           O
ATOM   3528  CB  THR B 242      -0.389  16.931  27.654  1.00 34.14           C
ATOM   3529  CG2 THR B 242      -1.647  16.381  28.325  1.00 34.40           C
ATOM   3530  OG1 THR B 242       0.764  16.252  28.180  1.00 31.63           O
ATOM   3531  N   VAL B 243      -2.578  17.007  24.986  1.00 37.86           N
ATOM   3532  CA  VAL B 243      -3.718  17.724  24.410  1.00 36.85           C
ATOM   3533  C   VAL B 243      -4.925  17.511  25.311  1.00 42.16           C
ATOM   3534  O   VAL B 243      -5.519  16.428  25.306  1.00 41.60           O
ATOM   3535  CB  VAL B 243      -4.031  17.250  22.988  1.00 38.06           C
ATOM   3536  CG1 VAL B 243      -5.151  18.099  22.374  1.00 36.42           C
ATOM   3537  CG2 VAL B 243      -2.763  17.254  22.115  1.00 35.49           C
ATOM   3538  N   SER B 244      -5.330  18.533  26.057  1.00 43.24           N
ATOM   3539  CA  SER B 244      -6.586  18.435  26.793  1.00 43.90           C
ATOM   3540  C   SER B 244      -7.146  19.827  26.988  1.00 45.82           C
ATOM   3541  O   SER B 244      -6.467  20.833  26.765  1.00 43.12           O
ATOM   3542  CB  SER B 244      -6.436  17.757  28.151  1.00 43.38           C
ATOM   3543  OG  SER B 244      -7.720  17.565  28.732  1.00 47.64           O
ATOM   3544  N   SER B 245      -8.391  19.898  27.417  1.00 49.01           N
ATOM   3545  CA  SER B 245      -8.933  21.237  27.381  1.00 52.92           C
ATOM   3546  C   SER B 245      -9.392  21.666  28.746  1.00 50.33           C
ATOM   3547  O   SER B 245      -8.685  22.393  29.441  1.00 50.05           O
ATOM   3548  CB  SER B 245     -10.087  21.336  26.376  1.00 54.62           C
ATOM   3549  OG  SER B 245     -10.979  22.359  26.706  1.00 65.67           O
TER    3551       SER B 245
ATOM   3550  N   ASP C   1       9.162  15.389 -61.410  1.00 50.15           N
ATOM   3551  CA  ASP C   1       9.107  14.214 -60.541  1.00 49.42           C
ATOM   3552  C   ASP C   1       7.875  14.301 -59.658  1.00 46.83           C
ATOM   3553  O   ASP C   1       7.271  15.366 -59.515  1.00 45.43           O
ATOM   3554  CB  ASP C   1      10.368  14.034 -59.691  1.00 44.11           C
ATOM   3555  CG  ASP C   1      10.667  15.211 -58.828  1.00 47.52           C
ATOM   3556  OD1 ASP C   1       9.811  16.118 -58.715  1.00 50.13           O
ATOM   3557  OD2 ASP C   1      11.789  15.224 -58.264  1.00 52.65           O
ATOM   3558  N   ILE C   2       7.506  13.168 -59.075  1.00 42.97           N
ATOM   3559  CA  ILE C   2       6.279  13.065 -58.309  1.00 38.09           C
ATOM   3560  C   ILE C   2       6.550  13.491 -56.879  1.00 39.67           C
ATOM   3561  O   ILE C   2       7.465  12.976 -56.231  1.00 38.54           O
ATOM   3562  CB  ILE C   2       5.719  11.642 -58.359  1.00 34.01           C
ATOM   3563  CG1 ILE C   2       5.408  11.243 -59.804  1.00 34.86           C
ATOM   3564  CG2 ILE C   2       4.458  11.572 -57.547  1.00 35.27           C
ATOM   3565  CD1 ILE C   2       6.550  10.619 -60.550  1.00 34.57           C
ATOM   3566  N   GLN C   3       5.767  14.455 -56.408  1.00 35.11           N
ATOM   3567  CA  GLN C   3       5.764  14.875 -55.023  1.00 33.78           C
ATOM   3568  C   GLN C   3       4.683  14.094 -54.301  1.00 35.09           C
ATOM   3569  O   GLN C   3       3.517  14.116 -54.719  1.00 34.90           O
ATOM   3570  CB  GLN C   3       5.471  16.370 -54.928  1.00 42.48           C
ATOM   3571  CG  GLN C   3       6.453  17.239 -55.674  1.00 46.08           C
ATOM   3572  CD  GLN C   3       7.745  17.400 -54.913  1.00 51.53           C
ATOM   3573  NE2 GLN C   3       8.857  17.002 -55.541  1.00 52.44           N
ATOM   3574  OE1 GLN C   3       7.750  17.868 -53.764  1.00 50.68           O
ATOM   3575  N   MET C   4       5.059  13.400 -53.229  1.00 33.53           N
ATOM   3576  CA  MET C   4       4.096  12.668 -52.414  1.00 34.04           C
ATOM   3577  C   MET C   4       3.787  13.499 -51.178  1.00 31.60           C
ATOM   3578  O   MET C   4       4.704  13.942 -50.474  1.00 33.41           O
ATOM   3579  CB  MET C   4       4.619  11.281 -52.015  1.00 31.46           C
ATOM   3580  CG  MET C   4       5.044  10.413 -53.193  1.00 32.58           C
ATOM   3581  SD  MET C   4       3.738  10.143 -54.417  1.00 30.55           S
```

[1899]

```
ATOM   3582  CE  MET C   4       2.615   9.097 -53.505  1.00 29.46           C
ATOM   3583  N   THR C   5       2.502  13.764 -50.949  1.00 31.50           N
ATOM   3584  CA  THR C   5       2.070  14.551 -49.800  1.00 32.65           C
ATOM   3585  C   THR C   5       1.063  13.721 -49.016  1.00 31.55           C
ATOM   3586  O   THR C   5       0.052  13.274 -49.574  1.00 30.38           O
ATOM   3587  CB  THR C   5       1.494  15.915 -50.229  1.00 35.10           C
ATOM   3588  CG2 THR C   5       2.570  16.740 -50.935  1.00 30.18           C
ATOM   3589  OG1 THR C   5       0.396  15.739 -51.139  1.00 37.63           O
ATOM   3590  N   GLN C   6       1.369  13.474 -47.744  1.00 31.02           N
ATOM   3591  CA  GLN C   6       0.497  12.723 -46.851  1.00 32.16           C
ATOM   3592  C   GLN C   6      -0.268  13.664 -45.942  1.00 30.02           C
ATOM   3593  O   GLN C   6       0.215  14.741 -45.601  1.00 30.01           O
ATOM   3594  CB  GLN C   6       1.291  11.741 -45.977  1.00 32.14           C
ATOM   3595  CG  GLN C   6       2.081  10.692 -46.723  1.00 32.21           C
ATOM   3596  CD  GLN C   6       2.916   9.825 -45.796  1.00 29.33           C
ATOM   3597  NE2 GLN C   6       2.372   9.485 -44.628  1.00 26.60           N
ATOM   3598  OE1 GLN C   6       4.050   9.473 -46.133  1.00 29.39           O
ATOM   3599  N   SER C   7      -1.463  13.241 -45.536  1.00 31.04           N
ATOM   3600  CA  SER C   7      -2.203  13.960 -44.500  1.00 33.88           C
ATOM   3601  C   SER C   7      -2.909  12.933 -43.624  1.00 33.61           C
ATOM   3602  O   SER C   7      -3.409  11.926 -44.133  1.00 32.85           O
ATOM   3603  CB  SER C   7      -3.241  14.923 -45.084  1.00 37.17           C
ATOM   3604  OG  SER C   7      -4.359  14.195 -45.587  1.00 40.00           O
ATOM   3605  N   PRO C   8      -2.973  13.191 -42.310  1.00 28.80           N
ATOM   3606  CA  PRO C   8      -2.375  14.374 -41.707  1.00 28.99           C
ATOM   3607  C   PRO C   8      -0.897  14.166 -41.550  1.00 30.97           C
ATOM   3608  O   PRO C   8      -0.435  13.074 -41.848  1.00 32.43           O
ATOM   3609  CB  PRO C   8      -3.043  14.439 -40.349  1.00 27.94           C
ATOM   3610  CG  PRO C   8      -3.242  13.003 -39.990  1.00 30.17           C
ATOM   3611  CD  PRO C   8      -3.536  12.290 -41.291  1.00 31.12           C
ATOM   3612  N   SER C   9      -0.164  15.178 -41.104  1.00 31.50           N
ATOM   3613  CA  SER C   9       1.254  14.973 -40.840  1.00 32.11           C
ATOM   3614  C   SER C   9       1.502  14.308 -39.478  1.00 31.91           C
ATOM   3615  O   SER C   9       2.516  13.623 -39.297  1.00 29.77           O
ATOM   3616  CB  SER C   9       1.975  16.310 -40.986  1.00 31.00           C
ATOM   3617  OG  SER C   9       3.235  16.243 -40.382  1.00 38.94           O
ATOM   3618  N   SER C  10       0.606  14.496 -38.512  1.00 29.97           N
ATOM   3619  CA  SER C  10       0.699  13.834 -37.219  1.00 32.35           C
ATOM   3620  C   SER C  10      -0.716  13.699 -36.672  1.00 35.11           C
ATOM   3621  O   SER C  10      -1.618  14.442 -37.064  1.00 34.29           O
ATOM   3622  CB  SER C  10       1.615  14.570 -36.235  1.00 34.46           C
ATOM   3623  OG  SER C  10       1.008  15.739 -35.735  1.00 42.78           O
ATOM   3624  N   LEU C  11      -0.925  12.706 -35.815  1.00 33.19           N
ATOM   3625  CA  LEU C  11      -2.279  12.357 -35.412  1.00 30.06           C
ATOM   3626  C   LEU C  11      -2.281  11.692 -34.043  1.00 35.50           C
ATOM   3627  O   LEU C  11      -1.492  10.773 -33.798  1.00 35.85           O
ATOM   3628  CB  LEU C  11      -2.913  11.470 -36.476  1.00 33.62           C
ATOM   3629  CG  LEU C  11      -4.276  10.854 -36.224  1.00 34.22           C
ATOM   3630  CD1 LEU C  11      -5.082  10.872 -37.510  1.00 38.91           C
ATOM   3631  CD2 LEU C  11      -4.068   9.428 -35.794  1.00 31.56           C
ATOM   3632  N   SER C  12      -3.160  12.154 -33.148  1.00 36.26           N
ATOM   3633  CA  SER C  12      -3.320  11.554 -31.829  1.00 32.28           C
ATOM   3634  C   SER C  12      -4.535  10.644 -31.850  1.00 32.44           C
ATOM   3635  O   SER C  12      -5.597  11.031 -32.356  1.00 35.60           O
ATOM   3636  CB  SER C  12      -3.479  12.614 -30.736  1.00 32.33           C
ATOM   3637  OG  SER C  12      -2.336  13.458 -30.659  1.00 41.20           O
ATOM   3638  N   ALA C  13      -4.378   9.440 -31.308  1.00 27.66           N
ATOM   3639  CA  ALA C  13      -5.470   8.483 -31.303  1.00 27.60           C
ATOM   3640  C   ALA C  13      -5.373   7.611 -30.060  1.00 29.10           C
ATOM   3641  O   ALA C  13      -4.398   7.660 -29.302  1.00 28.26           O
ATOM   3642  CB  ALA C  13      -5.470   7.632 -32.576  1.00 28.53           C
ATOM   3643  N   SER C  14      -6.435   6.850 -29.819  1.00 31.40           N
ATOM   3644  CA  SER C  14      -6.497   5.920 -28.704  1.00 30.27           C
ATOM   3645  C   SER C  14      -6.516   4.501 -29.233  1.00 29.91           C
ATOM   3646  O   SER C  14      -6.938   4.258 -30.370  1.00 31.92           O
ATOM   3647  CB  SER C  14      -7.742   6.132 -27.826  1.00 35.93           C
ATOM   3648  OG  SER C  14      -7.877   7.466 -27.353  1.00 36.54           O
ATOM   3649  N   VAL C  15      -6.056   3.573 -28.389  1.00 27.63           N
```

[1900]

```
ATOM   3650  CA  VAL C  15      -6.130   2.157 -28.706  1.00 26.42           C
ATOM   3651  C   VAL C  15      -7.559   1.824 -29.064  1.00 27.36           C
ATOM   3652  O   VAL C  15      -8.492   2.314 -28.428  1.00 30.81           O
ATOM   3653  CB  VAL C  15      -5.628   1.311 -27.523  1.00 26.96           C
ATOM   3654  CG1 VAL C  15      -5.842  -0.175 -27.805  1.00 28.21           C
ATOM   3655  CG2 VAL C  15      -4.167   1.590 -27.266  1.00 24.35           C
ATOM   3656  N   GLY C  16      -7.741   1.073 -30.140  1.00 29.39           N
ATOM   3657  CA  GLY C  16      -9.052   0.723 -30.621  1.00 27.37           C
ATOM   3658  C   GLY C  16      -9.602   1.634 -31.699  1.00 31.53           C
ATOM   3659  O   GLY C  16     -10.538   1.234 -32.407  1.00 33.13           O
ATOM   3660  N   ASP C  17      -9.050   2.840 -31.852  1.00 29.66           N
ATOM   3661  CA  ASP C  17      -9.537   3.763 -32.865  1.00 28.47           C
ATOM   3662  C   ASP C  17      -9.305   3.214 -34.263  1.00 29.60           C
ATOM   3663  O   ASP C  17      -8.344   2.488 -34.523  1.00 30.52           O
ATOM   3664  CB  ASP C  17      -8.846   5.118 -32.742  1.00 29.51           C
ATOM   3665  CG  ASP C  17      -9.336   5.930 -31.555  1.00 34.87           C
ATOM   3666  OD1 ASP C  17     -10.382   5.569 -30.963  1.00 35.49           O
ATOM   3667  OD2 ASP C  17      -8.683   6.947 -31.225  1.00 32.65           O
ATOM   3668  N   ARG C  18     -10.188   3.586 -35.177  1.00 33.25           N
ATOM   3669  CA  ARG C  18      -9.940   3.375 -36.593  1.00 30.70           C
ATOM   3670  C   ARG C  18      -9.211   4.610 -37.108  1.00 30.58           C
ATOM   3671  O   ARG C  18      -9.661   5.738 -36.898  1.00 36.26           O
ATOM   3672  CB  ARG C  18     -11.242   3.113 -37.348  1.00 30.37           C
ATOM   3673  CG  ARG C  18     -11.100   3.069 -38.852  1.00 37.11           C
ATOM   3674  CD  ARG C  18     -12.454   2.819 -39.519  1.00 41.16           C
ATOM   3675  NE  ARG C  18     -12.356   2.313 -40.890  1.00 45.19           N
ATOM   3676  CZ  ARG C  18     -12.273   1.026 -41.226  1.00 44.08           C
ATOM   3677  NH1 ARG C  18     -12.285   0.082 -40.294  1.00 41.95           N
ATOM   3678  NH2 ARG C  18     -12.202   0.684 -42.511  1.00 47.62           N
ATOM   3679  N   VAL C  19      -8.052   4.401 -37.726  1.00 32.56           N
ATOM   3680  CA  VAL C  19      -7.151   5.476 -38.126  1.00 30.10           C
ATOM   3681  C   VAL C  19      -7.025   5.466 -39.642  1.00 31.72           C
ATOM   3682  O   VAL C  19      -6.930   4.391 -40.247  1.00 31.53           O
ATOM   3683  CB  VAL C  19      -5.770   5.314 -37.462  1.00 30.85           C
ATOM   3684  CG1 VAL C  19      -4.754   6.319 -38.039  1.00 29.07           C
ATOM   3685  CG2 VAL C  19      -5.900   5.441 -35.961  1.00 28.14           C
ATOM   3686  N   THR C  20      -7.025   6.656 -40.260  1.00 32.34           N
ATOM   3687  CA  THR C  20      -6.917   6.757 -41.713  1.00 33.19           C
ATOM   3688  C   THR C  20      -5.831   7.734 -42.126  1.00 30.37           C
ATOM   3689  O   THR C  20      -5.841   8.896 -41.718  1.00 34.94           O
ATOM   3690  CB  THR C  20      -8.241   7.194 -42.336  1.00 29.33           C
ATOM   3691  CG2 THR C  20      -8.021   7.657 -43.743  1.00 30.23           C
ATOM   3692  OG1 THR C  20      -9.139   6.077 -42.344  1.00 33.56           O
ATOM   3693  N   ILE C  21      -4.931   7.281 -42.985  1.00 30.02           N
ATOM   3694  CA  ILE C  21      -3.853   8.115 -43.500  1.00 29.24           C
ATOM   3695  C   ILE C  21      -4.011   8.217 -45.012  1.00 29.85           C
ATOM   3696  O   ILE C  21      -4.272   7.215 -45.688  1.00 30.16           O
ATOM   3697  CB  ILE C  21      -2.484   7.525 -43.117  1.00 29.07           C
ATOM   3698  CG1 ILE C  21      -2.391   7.425 -41.599  1.00 29.03           C
ATOM   3699  CG2 ILE C  21      -1.361   8.399 -43.637  1.00 33.64           C
ATOM   3700  CD1 ILE C  21      -1.126   6.827 -41.148  1.00 24.68           C
ATOM   3701  N   THR C  22      -3.844   9.424 -45.544  1.00 34.39           N
ATOM   3702  CA  THR C  22      -4.014   9.685 -46.969  1.00 32.56           C
ATOM   3703  C   THR C  22      -2.680  10.052 -47.587  1.00 28.92           C
ATOM   3704  O   THR C  22      -1.828  10.650 -46.927  1.00 29.58           O
ATOM   3705  CB  THR C  22      -5.062  10.783 -47.192  1.00 31.98           C
ATOM   3706  CG2 THR C  22      -5.067  11.275 -48.601  1.00 32.36           C
ATOM   3707  OG1 THR C  22      -6.347  10.231 -46.882  1.00 37.01           O
ATOM   3708  N   CYS C  23      -2.496   9.639 -48.843  1.00 32.18           N
ATOM   3709  CA  CYS C  23      -1.270   9.866 -49.596  1.00 32.35           C
ATOM   3710  C   CYS C  23      -1.620  10.199 -51.040  1.00 30.63           C
ATOM   3711  O   CYS C  23      -2.229   9.386 -51.745  1.00 30.25           O
ATOM   3712  CB  CYS C  23      -0.384   8.623 -49.541  1.00 31.78           C
ATOM   3713  SG  CYS C  23       1.056   8.693 -50.589  1.00 38.27           S
ATOM   3714  N   ARG C  24      -1.208  11.372 -51.498  1.00 31.98           N
ATOM   3715  CA  ARG C  24      -1.567  11.832 -52.830  1.00 34.62           C
ATOM   3716  C   ARG C  24      -0.319  12.162 -53.633  1.00 27.89           C
ATOM   3717  O   ARG C  24       0.660  12.691 -53.094  1.00 31.32           O
```

[1901]

```
ATOM   3718  CB  ARG C  24      -2.515  13.047 -52.753  1.00 34.38           C
ATOM   3719  CG  ARG C  24      -3.848  12.722 -52.037  1.00 37.43           C
ATOM   3720  CD  ARG C  24      -4.945  13.720 -52.399  1.00 46.02           C
ATOM   3721  NE  ARG C  24      -6.244  13.330 -51.853  1.00 53.72           N
ATOM   3722  CZ  ARG C  24      -7.410  13.519 -52.474  1.00 56.04           C
ATOM   3723  NH1 ARG C  24      -7.443  14.090 -53.679  1.00 54.11           N
ATOM   3724  NH2 ARG C  24      -8.544  13.129 -51.893  1.00 52.34           N
ATOM   3725  N   ALA C  25      -0.374  11.842 -54.925  1.00 30.01           N
ATOM   3726  CA  ALA C  25       0.735  12.014 -55.859  1.00 30.59           C
ATOM   3727  C   ALA C  25       0.441  13.135 -56.843  1.00 31.41           C
ATOM   3728  O   ALA C  25      -0.696  13.290 -57.307  1.00 33.12           O
ATOM   3729  CB  ALA C  25       1.007  10.724 -56.641  1.00 30.33           C
ATOM   3730  N   SER C  26       1.486  13.888 -57.189  1.00 33.39           N
ATOM   3731  CA  SER C  26       1.380  15.012 -58.108  1.00 33.73           C
ATOM   3732  C   SER C  26       1.103  14.598 -59.547  1.00 33.87           C
ATOM   3733  O   SER C  26       0.861  15.473 -60.384  1.00 38.07           O
ATOM   3734  CB  SER C  26       2.669  15.832 -58.079  1.00 36.35           C
ATOM   3735  OG  SER C  26       3.775  15.042 -58.480  1.00 36.69           O
ATOM   3736  N   GLN C  27       1.178  13.311 -59.869  1.00 32.26           N
ATOM   3737  CA  GLN C  27       0.720  12.809 -61.152  1.00 33.86           C
ATOM   3738  C   GLN C  27       0.303  11.368 -60.940  1.00 34.86           C
ATOM   3739  O   GLN C  27       0.628  10.757 -59.922  1.00 38.41           O
ATOM   3740  CB  GLN C  27       1.791  12.886 -62.234  1.00 34.45           C
ATOM   3741  CG  GLN C  27       2.817  11.786 -62.141  1.00 38.06           C
ATOM   3742  CD  GLN C  27       3.834  11.819 -63.277  1.00 39.72           C
ATOM   3743  NE2 GLN C  27       4.781  12.758 -63.222  1.00 33.95           N
ATOM   3744  OE1 GLN C  27       3.764  10.998 -64.195  1.00 47.21           O
ATOM   3745  N   SER C  28      -0.421  10.821 -61.899  1.00 32.57           N
ATOM   3746  CA  SER C  28      -0.896   9.464 -61.728  1.00 31.38           C
ATOM   3747  C   SER C  28       0.283   8.491 -61.669  1.00 33.69           C
ATOM   3748  O   SER C  28       1.179   8.531 -62.515  1.00 32.43           O
ATOM   3749  CB  SER C  28      -1.837   9.113 -62.867  1.00 30.85           C
ATOM   3750  OG  SER C  28      -2.297   7.784 -62.722  1.00 35.21           O
ATOM   3751  N   ILE C  29       0.290   7.611 -60.661  1.00 32.69           N
ATOM   3752  CA  ILE C  29       1.350   6.620 -60.500  1.00 28.66           C
ATOM   3753  C   ILE C  29       0.803   5.198 -60.568  1.00 27.73           C
ATOM   3754  O   ILE C  29       1.457   4.258 -60.117  1.00 26.03           O
ATOM   3755  CB  ILE C  29       2.141   6.837 -59.193  1.00 30.68           C
ATOM   3756  CG1 ILE C  29       1.216   6.728 -57.964  1.00 29.58           C
ATOM   3757  CG2 ILE C  29       2.826   8.161 -59.228  1.00 29.82           C
ATOM   3758  CD1 ILE C  29       1.924   6.773 -56.634  1.00 27.87           C
ATOM   3759  N   SER C  30      -0.398   5.033 -61.111  1.00 28.30           N
ATOM   3760  CA  SER C  30      -1.024   3.723 -61.224  1.00 26.91           C
ATOM   3761  C   SER C  30      -1.099   3.038 -59.864  1.00 28.81           C
ATOM   3762  O   SER C  30      -1.656   3.611 -58.921  1.00 26.73           O
ATOM   3763  CB  SER C  30      -0.255   2.900 -62.259  1.00 29.03           C
ATOM   3764  OG  SER C  30      -0.768   1.591 -62.315  1.00 33.98           O
ATOM   3765  N   SER C  31      -0.545   1.830 -59.730  1.00 30.54           N
ATOM   3766  CA  SER C  31      -0.477   1.168 -58.426  1.00 31.48           C
ATOM   3767  C   SER C  31       0.939   1.061 -57.873  1.00 24.52           C
ATOM   3768  O   SER C  31       1.169   0.263 -56.967  1.00 27.94           O
ATOM   3769  CB  SER C  31      -1.109  -0.218 -58.463  1.00 25.99           C
ATOM   3770  OG  SER C  31      -2.510  -0.101 -58.587  1.00 35.87           O
ATOM   3771  N   TYR C  32       1.877   1.868 -58.362  1.00 22.61           N
ATOM   3772  CA  TYR C  32       3.256   1.820 -57.883  1.00 25.48           C
ATOM   3773  C   TYR C  32       3.369   2.664 -56.607  1.00 24.66           C
ATOM   3774  O   TYR C  32       3.965   3.746 -56.577  1.00 23.24           O
ATOM   3775  CB  TYR C  32       4.204   2.273 -58.990  1.00 23.61           C
ATOM   3776  CG  TYR C  32       4.273   1.225 -60.066  1.00 25.29           C
ATOM   3777  CD1 TYR C  32       3.362   1.213 -61.116  1.00 27.03           C
ATOM   3778  CD2 TYR C  32       5.184   0.183 -59.989  1.00 26.69           C
ATOM   3779  CE1 TYR C  32       3.386   0.218 -62.084  1.00 26.86           C
ATOM   3780  CE2 TYR C  32       5.215  -0.818 -60.955  1.00 26.13           C
ATOM   3781  CZ  TYR C  32       4.316  -0.804 -61.997  1.00 27.89           C
ATOM   3782  OH  TYR C  32       4.369  -1.801 -62.956  1.00 25.51           O
ATOM   3783  N   LEU C  33       2.725   2.165 -55.544  1.00 24.19           N
ATOM   3784  CA  LEU C  33       2.648   2.869 -54.264  1.00 25.99           C
ATOM   3785  C   LEU C  33       2.738   1.859 -53.129  1.00 22.23           C
```

[1902]

```
ATOM   3786  O   LEU C  33       1.891   0.968 -53.029  1.00 22.54           O
ATOM   3787  CB  LEU C  33       1.348   3.683 -54.166  1.00 21.13           C
ATOM   3788  CG  LEU C  33       1.128   4.726 -53.060  1.00 23.13           C
ATOM   3789  CD1 LEU C  33       0.614   4.135 -51.758  1.00 22.16           C
ATOM   3790  CD2 LEU C  33       2.404   5.503 -52.802  1.00 25.19           C
ATOM   3791  N   ASN C  34       3.729   2.019 -52.252  1.00 23.54           N
ATOM   3792  CA  ASN C  34       3.967   1.126 -51.126  1.00 20.87           C
ATOM   3793  C   ASN C  34       3.868   1.920 -49.826  1.00 21.84           C
ATOM   3794  O   ASN C  34       4.058   3.142 -49.820  1.00 22.74           O
ATOM   3795  CB  ASN C  34       5.341   0.463 -51.274  1.00 21.24           C
ATOM   3796  CG  ASN C  34       5.524  -0.176 -52.638  1.00 23.92           C
ATOM   3797  ND2 ASN C  34       6.574   0.222 -53.357  1.00 24.30           N
ATOM   3798  OD1 ASN C  34       4.727  -1.027 -53.047  1.00 25.39           O
ATOM   3799  N   TRP C  35       3.533   1.237 -48.730  1.00 18.58           N
ATOM   3800  CA  TRP C  35       3.387   1.849 -47.416  1.00 18.70           C
ATOM   3801  C   TRP C  35       4.359   1.201 -46.441  1.00 20.55           C
ATOM   3802  O   TRP C  35       4.527  -0.027 -46.452  1.00 21.66           O
ATOM   3803  CB  TRP C  35       1.978   1.687 -46.856  1.00 20.80           C
ATOM   3804  CG  TRP C  35       0.896   2.544 -47.482  1.00 23.23           C
ATOM   3805  CD1 TRP C  35      -0.002   2.177 -48.450  1.00 22.58           C
ATOM   3806  CD2 TRP C  35       0.592   3.906 -47.154  1.00 24.76           C
ATOM   3807  CE2 TRP C  35      -0.495   4.308 -47.966  1.00 23.20           C
ATOM   3808  CE3 TRP C  35       1.148   4.834 -46.263  1.00 23.51           C
ATOM   3809  NE1 TRP C  35      -0.832   3.248 -48.760  1.00 23.33           N
ATOM   3810  CZ2 TRP C  35      -1.045   5.589 -47.896  1.00 26.58           C
ATOM   3811  CZ3 TRP C  35       0.597   6.103 -46.198  1.00 26.07           C
ATOM   3812  CH2 TRP C  35      -0.484   6.469 -47.016  1.00 26.93           C
ATOM   3813  N   TYR C  36       4.996   2.024 -45.594  1.00 19.83           N
ATOM   3814  CA  TYR C  36       5.996   1.573 -44.635  1.00 19.18           C
ATOM   3815  C   TYR C  36       5.660   2.075 -43.244  1.00 20.19           C
ATOM   3816  O   TYR C  36       5.088   3.153 -43.088  1.00 21.64           O
ATOM   3817  CB  TYR C  36       7.411   2.049 -45.009  1.00 21.23           C
ATOM   3818  CG  TYR C  36       7.868   1.476 -46.328  1.00 23.04           C
ATOM   3819  CD1 TYR C  36       8.505   0.228 -46.393  1.00 21.22           C
ATOM   3820  CD2 TYR C  36       7.629   2.146 -47.504  1.00 18.53           C
ATOM   3821  CE1 TYR C  36       8.910  -0.303 -47.590  1.00 19.01           C
ATOM   3822  CE2 TYR C  36       8.019   1.608 -48.720  1.00 20.79           C
ATOM   3823  CZ  TYR C  36       8.654   0.376 -48.752  1.00 22.73           C
ATOM   3824  OH  TYR C  36       9.042  -0.165 -49.970  1.00 24.15           O
ATOM   3825  N   GLN C  37       6.016   1.281 -42.231  1.00 21.29           N
ATOM   3826  CA  GLN C  37       5.914   1.668 -40.831  1.00 20.88           C
ATOM   3827  C   GLN C  37       7.315   1.850 -40.282  1.00 21.67           C
ATOM   3828  O   GLN C  37       8.204   1.037 -40.559  1.00 23.33           O
ATOM   3829  CB  GLN C  37       5.187   0.602 -40.009  1.00 22.92           C
ATOM   3830  CG  GLN C  37       5.055   0.871 -38.509  1.00 23.63           C
ATOM   3831  CD  GLN C  37       4.489  -0.341 -37.795  1.00 24.84           C
ATOM   3832  NE2 GLN C  37       3.280  -0.198 -37.245  1.00 22.46           N
ATOM   3833  OE1 GLN C  37       5.125  -1.405 -37.748  1.00 25.20           O
ATOM   3834  N   GLN C  38       7.520   2.920 -39.515  1.00 23.86           N
ATOM   3835  CA  GLN C  38       8.803   3.096 -38.853  1.00 25.20           C
ATOM   3836  C   GLN C  38       8.593   3.538 -37.418  1.00 25.23           C
ATOM   3837  O   GLN C  38       7.796   4.444 -37.146  1.00 23.25           O
ATOM   3838  CB  GLN C  38       9.707   4.106 -39.571  1.00 24.02           C
ATOM   3839  CG  GLN C  38      11.127   3.957 -39.090  1.00 26.56           C
ATOM   3840  CD  GLN C  38      12.045   5.011 -39.620  1.00 26.73           C
ATOM   3841  NE2 GLN C  38      13.336   4.685 -39.692  1.00 26.68           N
ATOM   3842  OE1 GLN C  38      11.612   6.116 -39.952  1.00 25.27           O
ATOM   3843  N   LYS C  39       9.249   2.848 -36.506  1.00 24.00           N
ATOM   3844  CA  LYS C  39       9.289   3.343 -35.149  1.00 22.65           C
ATOM   3845  C   LYS C  39      10.648   3.980 -34.863  1.00 26.25           C
ATOM   3846  O   LYS C  39      11.662   3.667 -35.519  1.00 27.13           O
ATOM   3847  CB  LYS C  39       9.021   2.193 -34.195  1.00 24.96           C
ATOM   3848  CG  LYS C  39       7.711   1.542 -34.520  1.00 22.77           C
ATOM   3849  CD  LYS C  39       7.491   0.328 -33.718  1.00 25.68           C
ATOM   3850  CE  LYS C  39       6.034  -0.001 -33.757  1.00 30.34           C
ATOM   3851  NZ  LYS C  39       5.798  -1.452 -33.398  1.00 33.06           N
ATOM   3852  N   PRO C  40      10.709   4.864 -33.870  1.00 27.11           N
ATOM   3853  CA  PRO C  40      11.939   5.632 -33.649  1.00 24.88           C
```

[1903]

```
ATOM   3854  C   PRO C  40      13.126   4.710 -33.395  1.00 27.84           C
ATOM   3855  O   PRO C  40      13.066   3.794 -32.569  1.00 29.06           O
ATOM   3856  CB  PRO C  40      11.598   6.494 -32.435  1.00 27.33           C
ATOM   3857  CG  PRO C  40      10.297   5.971 -31.904  1.00 26.41           C
ATOM   3858  CD  PRO C  40       9.600   5.343 -33.038  1.00 23.61           C
ATOM   3859  N   GLY C  41      14.200   4.947 -34.138  1.00 28.66           N
ATOM   3860  CA  GLY C  41      15.424   4.169 -34.047  1.00 28.10           C
ATOM   3861  C   GLY C  41      15.386   2.809 -34.700  1.00 31.10           C
ATOM   3862  O   GLY C  41      16.390   2.079 -34.645  1.00 30.37           O
ATOM   3863  N   CYS C  42      14.302   2.470 -35.392  1.00 29.23           N
ATOM   3864  CA  CYS C  42      14.188   1.180 -36.050  1.00 27.07           C
ATOM   3865  C   CYS C  42      14.299   1.367 -37.550  1.00 27.57           C
ATOM   3866  O   CYS C  42      14.116   2.469 -38.073  1.00 27.33           O
ATOM   3867  CB  CYS C  42      12.853   0.503 -35.741  1.00 28.92           C
ATOM   3868  SG  CYS C  42      12.406   0.263 -34.005  1.00 31.19           S
ATOM   3869  N   ALA C  43      14.584   0.268 -38.239  1.00 24.33           N
ATOM   3870  CA  ALA C  43      14.475   0.268 -39.677  1.00 23.33           C
ATOM   3871  C   ALA C  43      13.003   0.278 -40.062  1.00 24.08           C
ATOM   3872  O   ALA C  43      12.157  -0.205 -39.305  1.00 25.70           O
ATOM   3873  CB  ALA C  43      15.140  -0.970 -40.269  1.00 23.39           C
ATOM   3874  N   PRO C  44      12.668   0.824 -41.231  1.00 24.44           N
ATOM   3875  CA  PRO C  44      11.283   0.766 -41.700  1.00 22.92           C
ATOM   3876  C   PRO C  44      10.881  -0.675 -41.967  1.00 21.27           C
ATOM   3877  O   PRO C  44      11.719  -1.568 -42.132  1.00 22.35           O
ATOM   3878  CB  PRO C  44      11.307   1.580 -42.996  1.00 20.42           C
ATOM   3879  CG  PRO C  44      12.523   2.421 -42.894  1.00 26.20           C
ATOM   3880  CD  PRO C  44      13.525   1.574 -42.157  1.00 25.05           C
ATOM   3881  N   LYS C  45       9.575  -0.897 -41.999  1.00 20.24           N
ATOM   3882  CA  LYS C  45       8.994  -2.199 -42.283  1.00 20.64           C
ATOM   3883  C   LYS C  45       7.921  -2.017 -43.331  1.00 20.58           C
ATOM   3884  O   LYS C  45       7.116  -1.089 -43.227  1.00 22.77           O
ATOM   3885  CB  LYS C  45       8.405  -2.799 -41.034  1.00 21.48           C
ATOM   3886  CG  LYS C  45       7.590  -4.004 -41.263  1.00 21.16           C
ATOM   3887  CD  LYS C  45       7.065  -4.401 -39.914  1.00 22.83           C
ATOM   3888  CE  LYS C  45       6.232  -5.647 -39.943  1.00 26.41           C
ATOM   3889  NZ  LYS C  45       5.808  -5.849 -38.536  1.00 30.28           N
ATOM   3890  N   LEU C  46       7.907  -2.895 -44.331  1.00 18.63           N
ATOM   3891  CA  LEU C  46       6.889  -2.863 -45.382  1.00 20.34           C
ATOM   3892  C   LEU C  46       5.561  -3.400 -44.866  1.00 19.76           C
ATOM   3893  O   LEU C  46       5.520  -4.474 -44.270  1.00 19.19           O
ATOM   3894  CB  LEU C  46       7.346  -3.698 -46.568  1.00 22.71           C
ATOM   3895  CG  LEU C  46       6.329  -3.892 -47.668  1.00 20.78           C
ATOM   3896  CD1 LEU C  46       6.058  -2.519 -48.304  1.00 18.35           C
ATOM   3897  CD2 LEU C  46       6.907  -4.849 -48.685  1.00 20.31           C
ATOM   3898  N   LEU C  47       4.481  -2.650 -45.093  1.00 21.57           N
ATOM   3899  CA  LEU C  47       3.106  -2.989 -44.703  1.00 22.85           C
ATOM   3900  C   LEU C  47       2.234  -3.399 -45.875  1.00 20.01           C
ATOM   3901  O   LEU C  47       1.629  -4.476 -45.857  1.00 20.83           O
ATOM   3902  CB  LEU C  47       2.441  -1.781 -44.031  1.00 21.65           C
ATOM   3903  CG  LEU C  47       2.991  -1.276 -42.729  1.00 21.53           C
ATOM   3904  CD1 LEU C  47       2.176  -0.064 -42.331  1.00 21.91           C
ATOM   3905  CD2 LEU C  47       2.886  -2.373 -41.698  1.00 19.24           C
ATOM   3906  N   ILE C  48       2.164  -2.545 -46.896  1.00 22.99           N
ATOM   3907  CA  ILE C  48       1.361  -2.750 -48.091  1.00 20.33           C
ATOM   3908  C   ILE C  48       2.264  -2.549 -49.306  1.00 22.28           C
ATOM   3909  O   ILE C  48       3.051  -1.594 -49.341  1.00 20.32           O
ATOM   3910  CB  ILE C  48       0.188  -1.753 -48.154  1.00 21.26           C
ATOM   3911  CG1 ILE C  48      -0.637  -1.791 -46.867  1.00 23.51           C
ATOM   3912  CG2 ILE C  48      -0.655  -2.017 -49.385  1.00 25.84           C
ATOM   3913  CD1 ILE C  48      -1.427  -3.055 -46.706  1.00 25.36           C
ATOM   3914  N   TYR C  49       2.114  -3.396 -50.327  1.00 24.07           N
ATOM   3915  CA  TYR C  49       2.778  -3.152 -51.603  1.00 21.48           C
ATOM   3916  C   TYR C  49       1.749  -3.132 -52.717  1.00 23.33           C
ATOM   3917  O   TYR C  49       0.670  -3.710 -52.596  1.00 25.18           O
ATOM   3918  CB  TYR C  49       3.860  -4.213 -51.928  1.00 22.16           C
ATOM   3919  CG  TYR C  49       3.384  -5.649 -52.077  1.00 22.22           C
ATOM   3920  CD1 TYR C  49       3.141  -6.438 -50.948  1.00 24.68           C
ATOM   3921  CD2 TYR C  49       3.244  -6.233 -53.316  1.00 24.23           C
```

[1904]

```
ATOM   3922  CE1 TYR C  49       2.722  -7.751 -51.058  1.00 24.42           C
ATOM   3923  CE2 TYR C  49       2.817  -7.554 -53.434  1.00 24.40           C
ATOM   3924  CZ  TYR C  49       2.558  -8.294 -52.304  1.00 26.64           C
ATOM   3925  OH  TYR C  49       2.146  -9.593 -52.417  1.00 33.61           O
ATOM   3926  N   ALA C  50       2.105  -2.471 -53.815  1.00 22.13           N
ATOM   3927  CA  ALA C  50       1.212  -2.330 -54.970  1.00 25.89           C
ATOM   3928  C   ALA C  50      -0.162  -1.778 -54.581  1.00 25.96           C
ATOM   3929  O   ALA C  50      -1.197  -2.282 -55.030  1.00 27.11           O
ATOM   3930  CB  ALA C  50       1.069  -3.663 -55.705  1.00 25.33           C
ATOM   3931  N   ALA C  51      -0.165  -0.766 -53.703  1.00 24.69           N
ATOM   3932  CA  ALA C  51      -1.348  -0.017 -53.266  1.00 25.79           C
ATOM   3933  C   ALA C  51      -2.277  -0.785 -52.329  1.00 28.00           C
ATOM   3934  O   ALA C  51      -2.949  -0.169 -51.502  1.00 27.61           O
ATOM   3935  CB  ALA C  51      -2.164   0.486 -54.462  1.00 28.27           C
ATOM   3936  N   SER C  52      -2.371  -2.087 -52.461  1.00 26.72           N
ATOM   3937  CA  SER C  52      -3.390  -2.790 -51.698  1.00 26.12           C
ATOM   3938  C   SER C  52      -2.995  -4.185 -51.239  1.00 26.86           C
ATOM   3939  O   SER C  52      -3.782  -4.819 -50.529  1.00 27.78           O
ATOM   3940  CB  SER C  52      -4.656  -2.856 -52.538  1.00 28.51           C
ATOM   3941  OG  SER C  52      -4.406  -3.656 -53.673  1.00 32.79           O
ATOM   3942  N   SER C  53      -1.835  -4.703 -51.602  1.00 26.72           N
ATOM   3943  CA  SER C  53      -1.446  -6.028 -51.154  1.00 22.28           C
ATOM   3944  C   SER C  53      -0.784  -5.950 -49.793  1.00 23.22           C
ATOM   3945  O   SER C  53       0.177  -5.192 -49.603  1.00 24.54           O
ATOM   3946  CB  SER C  53      -0.508  -6.691 -52.151  1.00 23.18           C
ATOM   3947  OG  SER C  53      -1.196  -6.932 -53.351  1.00 28.09           O
ATOM   3948  N   LEU C  54      -1.305  -6.738 -48.857  1.00 23.27           N
ATOM   3949  CA  LEU C  54      -0.785  -6.824 -47.497  1.00 21.90           C
ATOM   3950  C   LEU C  54       0.480  -7.681 -47.502  1.00 24.56           C
ATOM   3951  O   LEU C  54       0.482  -8.799 -48.017  1.00 24.01           O
ATOM   3952  CB  LEU C  54      -1.846  -7.453 -46.601  1.00 22.94           C
ATOM   3953  CG  LEU C  54      -1.724  -7.401 -45.086  1.00 24.28           C
ATOM   3954  CD1 LEU C  54      -1.837  -5.966 -44.623  1.00 27.63           C
ATOM   3955  CD2 LEU C  54      -2.758  -8.270 -44.388  1.00 30.50           C
ATOM   3956  N   GLN C  55       1.555  -7.174 -46.931  1.00 23.45           N
ATOM   3957  CA  GLN C  55       2.773  -7.965 -46.868  1.00 25.11           C
ATOM   3958  C   GLN C  55       2.592  -9.119 -45.886  1.00 23.85           C
ATOM   3959  O   GLN C  55       1.879  -9.006 -44.890  1.00 24.19           O
ATOM   3960  CB  GLN C  55       3.944  -7.057 -46.460  1.00 23.52           C
ATOM   3961  CG  GLN C  55       5.272  -7.749 -46.148  1.00 25.17           C
ATOM   3962  CD  GLN C  55       5.935  -8.308 -47.379  1.00 26.47           C
ATOM   3963  NE2 GLN C  55       7.164  -8.755 -47.236  1.00 31.29           N
ATOM   3964  OE1 GLN C  55       5.379  -8.260 -48.466  1.00 32.35           O
ATOM   3965  N   SER C  56       3.234 -10.249 -46.175  1.00 26.50           N
ATOM   3966  CA  SER C  56       3.097 -11.410 -45.310  1.00 23.47           C
ATOM   3967  C   SER C  56       3.508 -11.050 -43.888  1.00 27.91           C
ATOM   3968  O   SER C  56       4.525 -10.383 -43.671  1.00 30.02           O
ATOM   3969  CB  SER C  56       3.965 -12.539 -45.816  1.00 24.51           C
ATOM   3970  OG  SER C  56       5.309 -12.182 -45.610  1.00 30.82           O
ATOM   3971  N   GLY C  57       2.691 -11.433 -42.909  1.00 27.53           N
ATOM   3972  CA  GLY C  57       3.033 -11.152 -41.534  1.00 27.53           C
ATOM   3973  C   GLY C  57       2.517  -9.848 -40.978  1.00 28.51           C
ATOM   3974  O   GLY C  57       2.739  -9.577 -39.794  1.00 30.50           O
ATOM   3975  N   VAL C  58       1.921  -8.987 -41.800  1.00 27.73           N
ATOM   3976  CA  VAL C  58       1.354  -7.735 -41.307  1.00 25.97           C
ATOM   3977  C   VAL C  58      -0.080  -8.055 -40.898  1.00 24.02           C
ATOM   3978  O   VAL C  58      -0.799  -8.686 -41.683  1.00 26.24           O
ATOM   3979  CB  VAL C  58       1.425  -6.620 -42.362  1.00 25.34           C
ATOM   3980  CG1 VAL C  58       0.784  -5.363 -41.828  1.00 27.41           C
ATOM   3981  CG2 VAL C  58       2.878  -6.325 -42.741  1.00 23.00           C
ATOM   3982  N   PRO C  59      -0.525  -7.660 -39.703  1.00 24.72           N
ATOM   3983  CA  PRO C  59      -1.886  -7.983 -39.251  1.00 26.44           C
ATOM   3984  C   PRO C  59      -2.956  -7.478 -40.207  1.00 26.88           C
ATOM   3985  O   PRO C  59      -2.826  -6.418 -40.823  1.00 30.09           O
ATOM   3986  CB  PRO C  59      -1.998  -7.240 -37.915  1.00 26.43           C
ATOM   3987  CG  PRO C  59      -0.648  -6.984 -37.487  1.00 25.68           C
ATOM   3988  CD  PRO C  59       0.194  -6.845 -38.712  1.00 21.04           C
[1905] ATOM   3989  N   SER C  60      -4.072  -8.199 -40.254  1.00 27.50           N
```

```
ATOM   3990  CA  SER C  60      -5.129  -7.858 -41.196  1.00 28.63           C
ATOM   3991  C   SER C  60      -5.855  -6.570 -40.830  1.00 27.11           C
ATOM   3992  O   SER C  60      -6.684  -6.098 -41.614  1.00 31.90           O
ATOM   3993  CB  SER C  60      -6.145  -8.999 -41.244  1.00 28.71           C
ATOM   3994  OG  SER C  60      -6.539  -9.352 -39.919  1.00 33.86           O
ATOM   3995  N   ARG C  61      -5.558  -5.961 -39.690  1.00 28.22           N
ATOM   3996  CA  ARG C  61      -6.137  -4.652 -39.453  1.00 26.89           C
ATOM   3997  C   ARG C  61      -5.539  -3.585 -40.345  1.00 28.52           C
ATOM   3998  O   ARG C  61      -6.088  -2.482 -40.423  1.00 29.63           O
ATOM   3999  CB  ARG C  61      -5.989  -4.267 -37.986  1.00 28.21           C
ATOM   4000  CG  ARG C  61      -4.567  -4.165 -37.504  1.00 29.46           C
ATOM   4001  CD  ARG C  61      -4.569  -3.727 -36.056  1.00 27.00           C
ATOM   4002  NE  ARG C  61      -3.222  -3.627 -35.528  1.00 26.52           N
ATOM   4003  CZ  ARG C  61      -2.542  -4.662 -35.053  1.00 26.62           C
ATOM   4004  NH1 ARG C  61      -3.089  -5.867 -35.059  1.00 29.50           N
ATOM   4005  NH2 ARG C  61      -1.314  -4.490 -34.577  1.00 24.43           N
ATOM   4006  N   PHE C  62      -4.418  -3.860 -40.995  1.00 30.05           N
ATOM   4007  CA  PHE C  62      -3.848  -2.930 -41.957  1.00 28.95           C
ATOM   4008  C   PHE C  62      -4.466  -3.198 -43.315  1.00 31.14           C
ATOM   4009  O   PHE C  62      -4.679  -4.357 -43.692  1.00 32.18           O
ATOM   4010  CB  PHE C  62      -2.320  -3.058 -42.020  1.00 26.99           C
ATOM   4011  CG  PHE C  62      -1.625  -2.517 -40.802  1.00 25.74           C
ATOM   4012  CD1 PHE C  62      -1.436  -3.320 -39.685  1.00 24.51           C
ATOM   4013  CD2 PHE C  62      -1.181  -1.197 -40.758  1.00 24.45           C
ATOM   4014  CE1 PHE C  62      -0.813  -2.820 -38.541  1.00 24.84           C
ATOM   4015  CE2 PHE C  62      -0.556  -0.694 -39.607  1.00 20.96           C
ATOM   4016  CZ  PHE C  62      -0.371  -1.509 -38.509  1.00 22.96           C
ATOM   4017  N   SER C  63      -4.851  -2.134 -44.000  1.00 30.50           N
ATOM   4018  CA  SER C  63      -5.290  -2.278 -45.379  1.00 31.27           C
ATOM   4019  C   SER C  63      -4.938  -1.016 -46.148  1.00 31.83           C
ATOM   4020  O   SER C  63      -4.988   0.092 -45.608  1.00 32.53           O
ATOM   4021  CB  SER C  63      -6.789  -2.524 -45.439  1.00 30.89           C
ATOM   4022  OG  SER C  63      -7.434  -1.346 -44.985  1.00 33.68           O
ATOM   4023  N   GLY C  64      -4.672  -1.182 -47.434  1.00 29.68           N
ATOM   4024  CA  GLY C  64      -4.378  -0.058 -48.294  1.00 27.55           C
ATOM   4025  C   GLY C  64      -5.261  -0.125 -49.521  1.00 31.44           C
ATOM   4026  O   GLY C  64      -5.709  -1.193 -49.936  1.00 31.22           O
ATOM   4027  N   SER C  65      -5.550   1.045 -50.075  1.00 31.56           N
ATOM   4028  CA  SER C  65      -6.403   1.076 -51.251  1.00 30.67           C
ATOM   4029  C   SER C  65      -6.101   2.356 -52.008  1.00 29.93           C
ATOM   4030  O   SER C  65      -5.508   3.292 -51.470  1.00 29.71           O
ATOM   4031  CB  SER C  65      -7.886   0.940 -50.893  1.00 32.19           C
ATOM   4032  OG  SER C  65      -8.401   2.105 -50.294  1.00 36.15           O
ATOM   4033  N   GLY C  66      -6.490   2.369 -53.277  1.00 32.88           N
ATOM   4034  CA  GLY C  66      -6.313   3.545 -54.091  1.00 28.79           C
ATOM   4035  C   GLY C  66      -5.553   3.208 -55.346  1.00 30.85           C
ATOM   4036  O   GLY C  66      -4.962   2.134 -55.460  1.00 31.87           O
ATOM   4037  N   SER C  67      -5.615   4.107 -56.319  1.00 33.34           N
ATOM   4038  CA  SER C  67      -4.880   3.993 -57.572  1.00 35.93           C
ATOM   4039  C   SER C  67      -4.850   5.373 -58.213  1.00 33.87           C
ATOM   4040  O   SER C  67      -5.648   6.249 -57.869  1.00 43.65           O
ATOM   4041  CB  SER C  67      -5.514   2.950 -58.495  1.00 36.11           C
ATOM   4042  OG  SER C  67      -6.800   3.384 -58.901  1.00 41.79           O
ATOM   4043  N   GLY C  68      -3.906   5.576 -59.124  1.00 31.00           N
ATOM   4044  CA  GLY C  68      -3.779   6.875 -59.752  1.00 29.85           C
ATOM   4045  C   GLY C  68      -3.061   7.884 -58.884  1.00 35.08           C
ATOM   4046  O   GLY C  68      -1.825   7.852 -58.818  1.00 37.26           O
ATOM   4047  N   THR C  69      -3.800   8.788 -58.213  1.00 36.11           N
ATOM   4048  CA  THR C  69      -3.178   9.839 -57.408  1.00 35.64           C
ATOM   4049  C   THR C  69      -3.572   9.831 -55.930  1.00 33.50           C
ATOM   4050  O   THR C  69      -2.909  10.516 -55.142  1.00 31.10           O
ATOM   4051  CB  THR C  69      -3.477  11.238 -57.971  1.00 34.84           C
ATOM   4052  CG2 THR C  69      -2.871  11.401 -59.351  1.00 29.61           C
ATOM   4053  OG1 THR C  69      -4.896  11.434 -58.021  1.00 38.70           O
ATOM   4054  N   ASP C  70      -4.643   9.134 -55.536  1.00 33.98           N
ATOM   4055  CA  ASP C  70      -5.093   9.133 -54.147  1.00 34.76           C
ATOM   4056  C   ASP C  70      -5.050   7.723 -53.569  1.00 33.03           C
ATOM   4057  O   ASP C  70      -5.672   6.800 -54.121  1.00 30.41           O
```

[1906]

```
ATOM   4058  CB  ASP C  70      -6.516   9.689 -54.013  1.00 38.02           C
ATOM   4059  CG  ASP C  70      -6.698  11.023 -54.697  1.00 39.93           C
ATOM   4060  OD2 ASP C  70      -7.854  11.339 -55.022  1.00 48.35           O
ATOM   4061  OD1 ASP C  70      -5.715  11.763 -54.903  1.00 41.27           O
ATOM   4062  N   PHE C  71      -4.348   7.569 -52.439  1.00 28.88           N
ATOM   4063  CA  PHE C  71      -4.194   6.287 -51.766  1.00 29.39           C
ATOM   4064  C   PHE C  71      -4.425   6.500 -50.275  1.00 30.91           C
ATOM   4065  O   PHE C  71      -4.115   7.568 -49.736  1.00 31.82           O
ATOM   4066  CB  PHE C  71      -2.803   5.698 -51.988  1.00 27.83           C
ATOM   4067  CG  PHE C  71      -2.398   5.637 -53.424  1.00 25.92           C
ATOM   4068  CD1 PHE C  71      -1.866   6.749 -54.044  1.00 28.34           C
ATOM   4069  CD2 PHE C  71      -2.544   4.480 -54.160  1.00 28.48           C
ATOM   4070  CE1 PHE C  71      -1.491   6.699 -55.399  1.00 31.62           C
ATOM   4071  CE2 PHE C  71      -2.178   4.429 -55.495  1.00 29.95           C
ATOM   4072  CZ  PHE C  71      -1.648   5.543 -56.110  1.00 27.74           C
ATOM   4073  N   THR C  72      -4.969   5.485 -49.602  1.00 28.69           N
ATOM   4074  CA  THR C  72      -5.176   5.592 -48.166  1.00 30.24           C
ATOM   4075  C   THR C  72      -4.729   4.305 -47.491  1.00 29.63           C
ATOM   4076  O   THR C  72      -4.922   3.214 -48.025  1.00 31.57           O
ATOM   4077  CB  THR C  72      -6.639   5.845 -47.799  1.00 32.24           C
ATOM   4078  CG2 THR C  72      -7.241   6.913 -48.699  1.00 34.01           C
ATOM   4079  OG1 THR C  72      -7.377   4.637 -47.987  1.00 36.22           O
ATOM   4080  N   LEU C  73      -4.117   4.443 -46.319  1.00 30.36           N
ATOM   4081  CA  LEU C  73      -3.812   3.326 -45.435  1.00 28.60           C
ATOM   4082  C   LEU C  73      -4.697   3.447 -44.204  1.00 30.73           C
ATOM   4083  O   LEU C  73      -4.730   4.510 -43.564  1.00 28.94           O
ATOM   4084  CB  LEU C  73      -2.338   3.340 -45.039  1.00 27.67           C
ATOM   4085  CG  LEU C  73      -1.986   2.296 -43.989  1.00 25.50           C
ATOM   4086  CD1 LEU C  73      -2.027   0.934 -44.622  1.00 27.02           C
ATOM   4087  CD2 LEU C  73      -0.608   2.575 -43.375  1.00 25.79           C
ATOM   4088  N   THR C  74      -5.404   2.366 -43.868  1.00 33.16           N
ATOM   4089  CA  THR C  74      -6.376   2.355 -42.775  1.00 32.85           C
ATOM   4090  C   THR C  74      -6.013   1.276 -41.767  1.00 31.23           C
ATOM   4091  O   THR C  74      -5.781   0.117 -42.151  1.00 29.62           O
ATOM   4092  CB  THR C  74      -7.773   2.079 -43.325  1.00 33.45           C
ATOM   4093  CG2 THR C  74      -8.836   2.267 -42.277  1.00 33.91           C
ATOM   4094  OG1 THR C  74      -8.044   3.006 -44.399  1.00 41.29           O
ATOM   4095  N   ILE C  75      -6.014   1.623 -40.481  1.00 30.22           N
ATOM   4096  CA  ILE C  75      -5.867   0.659 -39.396  1.00 27.91           C
ATOM   4097  C   ILE C  75      -7.220   0.561 -38.714  1.00 27.73           C
ATOM   4098  O   ILE C  75      -7.670   1.528 -38.091  1.00 30.97           O
ATOM   4099  CB  ILE C  75      -4.778   1.091 -38.404  1.00 29.45           C
ATOM   4100  CG1 ILE C  75      -3.527   1.556 -39.152  1.00 25.20           C
ATOM   4101  CG2 ILE C  75      -4.449  -0.064 -37.407  1.00 25.27           C
ATOM   4102  CD1 ILE C  75      -2.509   2.191 -38.227  1.00 27.92           C
ATOM   4103  N   SER C  76      -7.856  -0.607 -38.811  1.00 30.10           N
ATOM   4104  CA  SER C  76      -9.247  -0.726 -38.388  1.00 32.29           C
ATOM   4105  C   SER C  76      -9.388  -0.674 -36.874  1.00 31.94           C
ATOM   4106  O   SER C  76     -10.454  -0.301 -36.374  1.00 34.46           O
ATOM   4107  CB  SER C  76      -9.875  -2.026 -38.895  1.00 32.26           C
ATOM   4108  OG  SER C  76      -9.272  -3.160 -38.274  1.00 33.20           O
ATOM   4109  N   SER C  77      -8.352  -1.059 -36.127  1.00 29.80           N
ATOM   4110  CA  SER C  77      -8.430  -1.027 -34.667  1.00 28.28           C
ATOM   4111  C   SER C  77      -7.014  -0.800 -34.147  1.00 25.77           C
ATOM   4112  O   SER C  77      -6.246  -1.757 -34.028  1.00 27.79           O
ATOM   4113  CB  SER C  77      -9.039  -2.324 -34.136  1.00 28.14           C
ATOM   4114  OG  SER C  77      -9.160  -2.338 -32.721  1.00 29.74           O
ATOM   4115  N   LEU C  78      -6.669   0.454 -33.854  1.00 23.23           N
ATOM   4116  CA  LEU C  78      -5.292   0.775 -33.480  1.00 25.43           C
ATOM   4117  C   LEU C  78      -4.853   0.037 -32.215  1.00 25.50           C
ATOM   4118  O   LEU C  78      -5.506   0.110 -31.169  1.00 26.34           O
ATOM   4119  CB  LEU C  78      -5.140   2.281 -33.290  1.00 26.38           C
ATOM   4120  CG  LEU C  78      -3.706   2.799 -33.233  1.00 25.63           C
ATOM   4121  CD1 LEU C  78      -3.063   2.751 -34.627  1.00 25.80           C
ATOM   4122  CD2 LEU C  78      -3.701   4.216 -32.713  1.00 24.51           C
ATOM   4123  N   GLN C  79      -3.708  -0.630 -32.287  1.00 27.12           N
ATOM   4124  CA  GLN C  79      -3.208  -1.392 -31.156  1.00 23.10           C
ATOM   4125  C   GLN C  79      -1.974  -0.720 -30.542  1.00 25.19           C
```

[1907]

```
ATOM   4126  O   GLN C  79      -1.319   0.101 -31.196  1.00 23.18           O
ATOM   4127  CB  GLN C  79      -2.868  -2.817 -31.592  1.00 24.29           C
ATOM   4128  CG  GLN C  79      -4.086  -3.615 -32.027  1.00 26.48           C
ATOM   4129  CD  GLN C  79      -5.176  -3.697 -30.959  1.00 26.28           C
ATOM   4130  NE2 GLN C  79      -6.368  -3.307 -31.349  1.00 27.49           N
ATOM   4131  OE1 GLN C  79      -4.957  -4.112 -29.809  1.00 26.89           O
ATOM   4132  N   PRO C  80      -1.644  -1.027 -29.274  1.00 24.18           N
ATOM   4133  CA  PRO C  80      -0.510  -0.356 -28.619  1.00 21.95           C
ATOM   4134  C   PRO C  80       0.760  -0.416 -29.438  1.00 26.16           C
ATOM   4135  O   PRO C  80       1.563   0.531 -29.400  1.00 27.00           O
ATOM   4136  CB  PRO C  80      -0.354  -1.130 -27.303  1.00 22.36           C
ATOM   4137  CG  PRO C  80      -1.711  -1.629 -27.012  1.00 22.90           C
ATOM   4138  CD  PRO C  80      -2.353  -1.925 -28.346  1.00 24.54           C
ATOM   4139  N   GLU C  81       0.962  -1.497 -30.186  1.00 23.56           N
ATOM   4140  CA  GLU C  81       2.154  -1.655 -31.010  1.00 23.96           C
ATOM   4141  C   GLU C  81       2.107  -0.875 -32.318  1.00 25.28           C
ATOM   4142  O   GLU C  81       3.097  -0.875 -33.056  1.00 25.91           O
ATOM   4143  CB  GLU C  81       2.372  -3.134 -31.300  1.00 27.03           C
ATOM   4144  CG  GLU C  81       1.263  -3.806 -32.065  1.00 25.97           C
ATOM   4145  CD  GLU C  81       0.354  -4.681 -31.191  1.00 30.65           C
ATOM   4146  OE1 GLU C  81       0.153  -5.884 -31.568  1.00 32.53           O
ATOM   4147  OE2 GLU C  81      -0.132  -4.174 -30.135  1.00 23.60           O
ATOM   4148  N   ASP C  82       1.023  -0.174 -32.622  1.00 23.55           N
ATOM   4149  CA  ASP C  82       0.897   0.483 -33.910  1.00 22.50           C
ATOM   4150  C   ASP C  82       1.309   1.940 -33.862  1.00 21.81           C
ATOM   4151  O   ASP C  82       1.336   2.604 -34.903  1.00 25.17           O
ATOM   4152  CB  ASP C  82      -0.544   0.347 -34.414  1.00 24.69           C
ATOM   4153  CG  ASP C  82      -0.959  -1.107 -34.643  1.00 24.83           C
ATOM   4154  OD1 ASP C  82      -0.100  -1.989 -34.862  1.00 25.24           O
ATOM   4155  OD2 ASP C  82      -2.170  -1.397 -34.598  1.00 26.46           O
ATOM   4156  N   PHE C  83       1.650   2.453 -32.691  1.00 22.76           N
ATOM   4157  CA  PHE C  83       2.104   3.825 -32.572  1.00 22.44           C
ATOM   4158  C   PHE C  83       3.498   3.933 -33.171  1.00 23.27           C
ATOM   4159  O   PHE C  83       4.416   3.226 -32.746  1.00 22.71           O
ATOM   4160  CB  PHE C  83       2.082   4.259 -31.107  1.00 25.90           C
ATOM   4161  CG  PHE C  83       0.691   4.420 -30.550  1.00 24.82           C
ATOM   4162  CD1 PHE C  83      -0.064   5.562 -30.843  1.00 25.48           C
ATOM   4163  CD2 PHE C  83       0.124   3.423 -29.767  1.00 23.01           C
ATOM   4164  CE1 PHE C  83      -1.351   5.709 -30.355  1.00 25.78           C
ATOM   4165  CE2 PHE C  83      -1.158   3.573 -29.266  1.00 24.96           C
ATOM   4166  CZ  PHE C  83      -1.893   4.723 -29.564  1.00 27.09           C
ATOM   4167  N   ALA C  84       3.637   4.795 -34.180  1.00 22.95           N
ATOM   4168  CA  ALA C  84       4.763   4.788 -35.102  1.00 22.83           C
ATOM   4169  C   ALA C  84       4.558   5.863 -36.163  1.00 24.70           C
ATOM   4170  O   ALA C  84       3.509   6.517 -36.186  1.00 25.21           O
ATOM   4171  CB  ALA C  84       4.888   3.414 -35.779  1.00 19.97           C
ATOM   4172  N   THR C  85       5.526   6.053 -37.058  1.00 23.01           N
ATOM   4173  CA  THR C  85       5.327   6.922 -38.213  1.00 23.90           C
ATOM   4174  C   THR C  85       5.123   6.069 -39.459  1.00 24.07           C
ATOM   4175  O   THR C  85       5.728   5.001 -39.603  1.00 21.83           O
ATOM   4176  CB  THR C  85       6.502   7.867 -38.416  1.00 25.63           C
ATOM   4177  CG2 THR C  85       6.197   8.835 -39.539  1.00 25.53           C
ATOM   4178  OG1 THR C  85       6.686   8.625 -37.218  1.00 26.21           O
ATOM   4179  N   TYR C  86       4.208   6.503 -40.319  1.00 23.92           N
ATOM   4180  CA  TYR C  86       3.821   5.758 -41.506  1.00 23.63           C
ATOM   4181  C   TYR C  86       4.144   6.576 -42.746  1.00 24.14           C
ATOM   4182  O   TYR C  86       3.815   7.761 -42.813  1.00 23.96           O
ATOM   4183  CB  TYR C  86       2.336   5.400 -41.440  1.00 20.84           C
ATOM   4184  CG  TYR C  86       2.048   4.404 -40.350  1.00 22.82           C
ATOM   4185  CD1 TYR C  86       1.832   4.808 -39.039  1.00 23.09           C
ATOM   4186  CD2 TYR C  86       2.006   3.049 -40.634  1.00 22.36           C
ATOM   4187  CE1 TYR C  86       1.589   3.872 -38.025  1.00 22.53           C
ATOM   4188  CE2 TYR C  86       1.757   2.117 -39.653  1.00 23.93           C
ATOM   4189  CZ  TYR C  86       1.549   2.529 -38.346  1.00 22.19           C
ATOM   4190  OH  TYR C  86       1.307   1.585 -37.368  1.00 21.95           O
ATOM   4191  N   TYR C  87       4.779   5.945 -43.724  1.00 22.50           N
ATOM   4192  CA  TYR C  87       5.207   6.594 -44.947  1.00 22.49           C
ATOM   4193  C   TYR C  87       4.608   5.910 -46.167  1.00 25.67           C
```

[1908]

```
ATOM   4194  O   TYR C  87       4.395   4.695 -46.170  1.00 23.86           O
ATOM   4195  CB  TYR C  87       6.710   6.556 -45.078  1.00 23.15           C
ATOM   4196  CG  TYR C  87       7.468   7.323 -44.029  1.00 26.11           C
ATOM   4197  CD2 TYR C  87       7.979   6.690 -42.909  1.00 25.26           C
ATOM   4198  CD1 TYR C  87       7.730   8.676 -44.198  1.00 27.54           C
ATOM   4199  CE2 TYR C  87       8.710   7.398 -41.967  1.00 26.41           C
ATOM   4200  CE1 TYR C  87       8.452   9.394 -43.266  1.00 28.68           C
ATOM   4201  CZ  TYR C  87       8.949   8.751 -42.150  1.00 29.51           C
ATOM   4202  OH  TYR C  87       9.673   9.478 -41.216  1.00 30.62           O
ATOM   4203  N   CYS C  88       4.270   6.691 -47.178  1.00 27.47           N
ATOM   4204  CA  CYS C  88       4.046   6.121 -48.496  1.00 27.01           C
ATOM   4205  C   CYS C  88       5.273   6.376 -49.362  1.00 25.15           C
ATOM   4206  O   CYS C  88       6.124   7.212 -49.046  1.00 23.70           O
ATOM   4207  CB  CYS C  88       2.769   6.672 -49.152  1.00 26.91           C
ATOM   4208  SG  CYS C  88       2.685   8.432 -49.396  1.00 31.18           S
ATOM   4209  N   GLN C  89       5.386   5.592 -50.431  1.00 25.33           N
ATOM   4210  CA  GLN C  89       6.480   5.768 -51.379  1.00 28.79           C
ATOM   4211  C   GLN C  89       5.992   5.399 -52.766  1.00 24.12           C
ATOM   4212  O   GLN C  89       5.411   4.326 -52.936  1.00 23.58           O
ATOM   4213  CB  GLN C  89       7.677   4.894 -50.989  1.00 27.56           C
ATOM   4214  CG  GLN C  89       8.828   4.904 -51.965  1.00 28.10           C
ATOM   4215  CD  GLN C  89       9.373   3.519 -52.222  1.00 35.64           C
ATOM   4216  NE2 GLN C  89      10.626   3.468 -52.591  1.00 40.57           N
ATOM   4217  OE1 GLN C  89       8.679   2.488 -52.115  1.00 35.79           O
ATOM   4218  N   GLN C  90       6.217   6.276 -53.746  1.00 25.93           N
ATOM   4219  CA  GLN C  90       5.866   5.972 -55.133  1.00 27.01           C
ATOM   4220  C   GLN C  90       7.033   5.275 -55.814  1.00 24.34           C
ATOM   4221  O   GLN C  90       8.192   5.640 -55.612  1.00 26.17           O
ATOM   4222  CB  GLN C  90       5.467   7.236 -55.912  1.00 26.91           C
ATOM   4223  CG  GLN C  90       6.545   8.290 -56.074  1.00 29.68           C
ATOM   4224  CD  GLN C  90       7.379   8.103 -57.331  1.00 30.21           C
ATOM   4225  NE2 GLN C  90       8.518   8.830 -57.424  1.00 28.82           N
ATOM   4226  OE1 GLN C  90       7.030   7.293 -58.194  1.00 26.60           O
ATOM   4227  N   SER C  91       6.732   4.260 -56.607  1.00 22.49           N
ATOM   4228  CA  SER C  91       7.779   3.557 -57.336  1.00 28.94           C
ATOM   4229  C   SER C  91       7.535   3.616 -58.836  1.00 26.23           C
ATOM   4230  O   SER C  91       7.965   2.742 -59.578  1.00 27.95           O
ATOM   4231  CB  SER C  91       7.899   2.104 -56.870  1.00 27.95           C
ATOM   4232  OG  SER C  91       6.678   1.418 -57.066  1.00 27.68           O
ATOM   4233  N   TYR C  92       6.860   4.658 -59.286  1.00 26.13           N
ATOM   4234  CA  TYR C  92       6.453   4.801 -60.675  1.00 27.45           C
ATOM   4235  C   TYR C  92       7.541   5.434 -61.539  1.00 29.21           C
ATOM   4236  O   TYR C  92       7.718   5.032 -62.691  1.00 30.55           O
ATOM   4237  CB  TYR C  92       5.171   5.628 -60.735  1.00 25.66           C
ATOM   4238  CG  TYR C  92       4.597   5.821 -62.114  1.00 28.80           C
ATOM   4239  CD1 TYR C  92       3.770   4.863 -62.683  1.00 28.83           C
ATOM   4240  CD2 TYR C  92       4.862   6.980 -62.835  1.00 31.47           C
ATOM   4241  CE1 TYR C  92       3.232   5.046 -63.937  1.00 29.65           C
ATOM   4242  CE2 TYR C  92       4.344   7.169 -64.101  1.00 31.23           C
ATOM   4243  CZ  TYR C  92       3.536   6.201 -64.643  1.00 32.23           C
ATOM   4244  OH  TYR C  92       3.019   6.397 -65.897  1.00 39.76           O
ATOM   4245  N   SER C  93       8.265   6.423 -61.007  1.00 28.86           N
ATOM   4246  CA  SER C  93       9.257   7.172 -61.765  1.00 29.52           C
ATOM   4247  C   SER C  93      10.401   7.571 -60.851  1.00 31.59           C
ATOM   4248  O   SER C  93      10.174   7.959 -59.705  1.00 34.87           O
ATOM   4249  CB  SER C  93       8.658   8.431 -62.392  1.00 33.82           C
ATOM   4250  OG  SER C  93       7.671   8.070 -63.346  1.00 36.81           O
ATOM   4251  N   THR C  94      11.621   7.446 -61.352  1.00 30.63           N
ATOM   4252  CA  THR C  94      12.794   7.906 -60.627  1.00 32.95           C
ATOM   4253  C   THR C  94      12.783   9.440 -60.640  1.00 34.79           C
ATOM   4254  O   THR C  94      12.345  10.022 -61.618  1.00 38.51           O
ATOM   4255  CB  THR C  94      14.070   7.367 -61.285  1.00 35.94           C
ATOM   4256  CG2 THR C  94      15.300   8.245 -60.964  1.00 36.99           C
ATOM   4257  OG1 THR C  94      14.290   6.013 -60.863  1.00 36.64           O
ATOM   4258  N   PRO C  95      13.197  10.104 -59.539  1.00 33.74           N
ATOM   4259  CA  PRO C  95      13.641   9.550 -58.252  1.00 33.45           C
ATOM   4260  C   PRO C  95      12.452   8.955 -57.512  1.00 35.62           C
ATOM   4261  O   PRO C  95      11.333   9.511 -57.593  1.00 35.11           O
```

[1909]

```
ATOM   4262  CB  PRO C  95      14.218  10.758 -57.508  1.00 33.42           C
ATOM   4263  CG  PRO C  95      13.571  11.942 -58.128  1.00 38.31           C
ATOM   4264  CD  PRO C  95      13.168  11.574 -59.531  1.00 34.80           C
ATOM   4265  N   LEU C  96      12.654   7.792 -56.893  1.00 33.37           N
ATOM   4266  CA  LEU C  96      11.585   7.179 -56.124  1.00 31.68           C
ATOM   4267  C   LEU C  96      11.430   8.023 -54.870  1.00 32.54           C
ATOM   4268  O   LEU C  96      12.374   8.125 -54.089  1.00 42.44           O
ATOM   4269  CB  LEU C  96      11.966   5.733 -55.818  1.00 29.53           C
ATOM   4270  CG  LEU C  96      12.286   4.891 -57.086  1.00 32.18           C
ATOM   4271  CD1 LEU C  96      12.484   3.383 -56.816  1.00 32.20           C
ATOM   4272  CD2 LEU C  96      11.242   5.063 -58.187  1.00 29.49           C
ATOM   4273  N   THR C  97      10.245   8.565 -54.611  1.00 28.20           N
ATOM   4274  CA  THR C  97      10.124   9.578 -53.577  1.00 24.43           C
ATOM   4275  C   THR C  97       9.191   9.127 -52.463  1.00 28.17           C
ATOM   4276  O   THR C  97       8.199   8.425 -52.705  1.00 27.41           O
ATOM   4277  CB  THR C  97       9.636  10.892 -54.198  1.00 29.96           C
ATOM   4278  CG2 THR C  97      10.745  11.555 -55.002  1.00 28.12           C
ATOM   4279  OG1 THR C  97       8.559  10.616 -55.100  1.00 32.94           O
ATOM   4280  N   PHE C  98       9.519   9.529 -51.236  1.00 26.51           N
ATOM   4281  CA  PHE C  98       8.679   9.248 -50.078  1.00 27.94           C
ATOM   4282  C   PHE C  98       7.742  10.413 -49.766  1.00 28.10           C
ATOM   4283  O   PHE C  98       8.064  11.581 -49.998  1.00 32.96           O
ATOM   4284  CB  PHE C  98       9.536   8.973 -48.838  1.00 24.83           C
ATOM   4285  CG  PHE C  98      10.210   7.635 -48.850  1.00 26.91           C
ATOM   4286  CD2 PHE C  98      11.492   7.495 -49.330  1.00 24.70           C
ATOM   4287  CD1 PHE C  98       9.556   6.520 -48.377  1.00 24.62           C
ATOM   4288  CE2 PHE C  98      12.100   6.280 -49.331  1.00 24.86           C
ATOM   4289  CE1 PHE C  98      10.169   5.296 -48.383  1.00 23.95           C
ATOM   4290  CZ  PHE C  98      11.443   5.178 -48.853  1.00 24.80           C
ATOM   4291  N   GLY C  99       6.596  10.090 -49.182  1.00 28.28           N
ATOM   4292  CA  GLY C  99       5.827  11.103 -48.503  1.00 27.56           C
ATOM   4293  C   GLY C  99       6.574  11.587 -47.278  1.00 28.59           C
ATOM   4294  O   GLY C  99       7.591  11.024 -46.852  1.00 27.62           O
ATOM   4295  N   GLN C 100       6.071  12.672 -46.696  1.00 28.88           N
ATOM   4296  CA  GLN C 100       6.776  13.252 -45.562  1.00 28.80           C
ATOM   4297  C   GLN C 100       6.564  12.472 -44.268  1.00 28.22           C
ATOM   4298  O   GLN C 100       7.239  12.769 -43.276  1.00 29.06           O
ATOM   4299  CB  GLN C 100       6.326  14.698 -45.328  1.00 29.86           C
ATOM   4300  CG  GLN C 100       5.067  14.803 -44.488  1.00 29.50           C
ATOM   4301  CD  GLN C 100       3.772  14.613 -45.284  1.00 32.09           C
ATOM   4302  NE2 GLN C 100       2.649  14.921 -44.643  1.00 34.20           N
ATOM   4303  OE1 GLN C 100       3.777  14.159 -46.435  1.00 36.63           O
ATOM   4304  N   GLY C 101       5.650  11.510 -44.241  1.00 27.81           N
ATOM   4305  CA  GLY C 101       5.413  10.731 -43.043  1.00 28.17           C
ATOM   4306  C   GLY C 101       4.261  11.267 -42.212  1.00 30.59           C
ATOM   4307  O   GLY C 101       4.009  12.480 -42.140  1.00 31.81           O
ATOM   4308  N   THR C 102       3.564  10.352 -41.553  1.00 27.15           N
ATOM   4309  CA  THR C 102       2.481  10.672 -40.634  1.00 29.22           C
ATOM   4310  C   THR C 102       2.783   9.999 -39.308  1.00 29.40           C
ATOM   4311  O   THR C 102       2.812   8.764 -39.247  1.00 28.05           O
ATOM   4312  CB  THR C 102       1.131  10.166 -41.154  1.00 28.45           C
ATOM   4313  CG2 THR C 102       0.049  10.407 -40.103  1.00 26.90           C
ATOM   4314  OG1 THR C 102       0.805  10.829 -42.384  1.00 29.00           O
ATOM   4315  N   LYS C 103       2.994  10.795 -38.253  1.00 29.92           N
ATOM   4316  CA  LYS C 103       3.225  10.247 -36.919  1.00 28.78           C
ATOM   4317  C   LYS C 103       1.876   9.970 -36.260  1.00 30.70           C
ATOM   4318  O   LYS C 103       1.060  10.885 -36.104  1.00 29.49           O
ATOM   4319  CB  LYS C 103       4.024  11.218 -36.050  1.00 28.77           C
ATOM   4320  CG  LYS C 103       4.275  10.705 -34.616  1.00 31.80           C
ATOM   4321  CD  LYS C 103       5.035  11.706 -33.724  1.00 35.12           C
ATOM   4322  CE  LYS C 103       6.372  11.166 -33.182  1.00 39.83           C
ATOM   4323  NZ  LYS C 103       7.541  11.509 -34.058  1.00 45.67           N
ATOM   4324  N   VAL C 104       1.638   8.717 -35.874  1.00 27.92           N
ATOM   4325  CA  VAL C 104       0.473   8.357 -35.076  1.00 28.38           C
ATOM   4326  C   VAL C 104       0.969   8.259 -33.637  1.00 27.23           C
ATOM   4327  O   VAL C 104       1.756   7.372 -33.296  1.00 26.48           O
ATOM   4328  CB  VAL C 104      -0.166   7.045 -35.541  1.00 25.13           C
ATOM   4329  CG1 VAL C 104      -1.318   6.674 -34.608  1.00 25.78           C
```

[1910]

```
ATOM   4330  CG2 VAL C 104      -0.608   7.137 -36.977  1.00 23.80           C
ATOM   4331  N   GLU C 105       0.557   9.185 -32.784  1.00 31.21           N
ATOM   4332  CA  GLU C 105       1.106   9.242 -31.442  1.00 29.62           C
ATOM   4333  C   GLU C 105      -0.002   9.146 -30.400  1.00 28.76           C
ATOM   4334  O   GLU C 105      -1.195   9.215 -30.711  1.00 29.95           O
ATOM   4335  CB  GLU C 105       1.917  10.519 -31.272  1.00 34.34           C
ATOM   4336  CG  GLU C 105       1.064  11.744 -31.173  1.00 41.06           C
ATOM   4337  CD  GLU C 105       1.908  12.980 -31.250  1.00 43.47           C
ATOM   4338  OE1 GLU C 105       1.472  13.965 -31.883  1.00 47.57           O
ATOM   4339  OE2 GLU C 105       3.031  12.936 -30.701  1.00 47.40           O
ATOM   4340  N   ILE C 106       0.405   8.959 -29.153  1.00 29.57           N
ATOM   4341  CA  ILE C 106      -0.526   8.666 -28.065  1.00 35.07           C
ATOM   4342  C   ILE C 106      -1.080   9.979 -27.520  1.00 35.89           C
ATOM   4343  O   ILE C 106      -0.360  10.979 -27.432  1.00 39.48           O
ATOM   4344  CB  ILE C 106       0.164   7.825 -26.966  1.00 36.27           C
ATOM   4345  CG1 ILE C 106       0.916   6.631 -27.608  1.00 34.13           C
ATOM   4346  CG2 ILE C 106      -0.877   7.311 -25.955  1.00 33.26           C
ATOM   4347  CD1 ILE C 106       1.773   5.765 -26.664  1.00 27.60           C
ATOM   4348  N   LYS C 107      -2.372   9.989 -27.191  1.00 38.84           N
ATOM   4349  CA  LYS C 107      -3.034  11.228 -26.786  1.00 40.39           C
ATOM   4350  C   LYS C 107      -2.419  11.768 -25.509  1.00 41.97           C
ATOM   4351  O   LYS C 107      -1.862  11.018 -24.703  1.00 44.68           O
ATOM   4352  CB  LYS C 107      -4.530  11.007 -26.561  1.00 37.03           C
ATOM   4353  CG  LYS C 107      -5.374  11.046 -27.821  1.00 31.48           C
ATOM   4354  CD  LYS C 107      -6.634  10.241 -27.592  1.00 36.85           C
ATOM   4355  CE  LYS C 107      -7.865  10.824 -28.289  1.00 39.31           C
ATOM   4356  NZ  LYS C 107      -8.981   9.796 -28.333  1.00 36.01           N
ATOM   4357  O   ALA C 108      -4.360  13.002 -23.203  1.00 48.59           O
ATOM   4358  N   ALA C 108      -2.498  13.094 -25.343  1.00 48.22           N
ATOM   4359  CA  ALA C 108      -2.222  13.705 -24.042  1.00 46.55           C
ATOM   4360  C   ALA C 108      -3.139  13.071 -23.007  1.00 47.97           C
ATOM   4361  CB  ALA C 108      -2.436  15.224 -24.083  1.00 44.12           C
ATOM   4362  O   GLY C 109      -4.904  10.060 -20.843  1.00 52.86           O
ATOM   4363  N   GLY C 109      -2.548  12.565 -21.926  1.00 47.96           N
ATOM   4364  CA  GLY C 109      -3.350  11.863 -20.941  1.00 47.25           C
ATOM   4365  C   GLY C 109      -3.963  10.580 -21.450  1.00 47.02           C
ATOM   4366  O   GLY C 110      -1.804   7.882 -22.147  1.00 36.43           O
ATOM   4367  N   GLY C 110      -3.461  10.059 -22.561  1.00 47.68           N
ATOM   4368  CA  GLY C 110      -3.864   8.765 -23.054  1.00 44.15           C
ATOM   4369  C   GLY C 110      -2.944   7.662 -22.569  1.00 38.09           C
ATOM   4370  O   GLY C 111      -3.653   3.653 -23.417  1.00 29.52           O
ATOM   4371  N   GLY C 111      -3.451   6.448 -22.647  1.00 36.27           N
ATOM   4372  CA  GLY C 111      -2.753   5.358 -22.022  1.00 30.70           C
ATOM   4373  C   GLY C 111      -2.648   4.135 -22.888  1.00 27.10           C
ATOM   4374  O   SER C 112       1.155   3.019 -23.321  1.00 24.12           O
ATOM   4375  N   SER C 112      -1.415   3.701 -23.121  1.00 26.94           N
ATOM   4376  CA  SER C 112      -1.121   2.508 -23.896  1.00 23.25           C
ATOM   4377  C   SER C 112       0.338   2.161 -23.665  1.00 24.03           C
ATOM   4378  CB  SER C 112      -1.420   2.685 -25.383  1.00 24.78           C
ATOM   4379  OG  SER C 112      -0.476   3.519 -26.022  1.00 29.70           O
ATOM   4380  O   GLY C 113       1.520  -1.775 -24.478  1.00 19.96           O
ATOM   4381  N   GLY C 113       0.649   0.890 -23.854  1.00 23.97           N
ATOM   4382  CA  GLY C 113       2.014   0.433 -23.725  1.00 22.63           C
ATOM   4383  C   GLY C 113       2.244  -0.782 -24.598  1.00 21.62           C
ATOM   4384  O   GLY C 114       5.434  -1.992 -24.717  1.00 23.29           O
ATOM   4385  N   GLY C 114       3.199  -0.694 -25.543  1.00 23.59           N
ATOM   4386  CA  GLY C 114       3.617  -1.859 -26.308  1.00 22.63           C
ATOM   4387  C   GLY C 114       4.847  -2.504 -25.670  1.00 21.55           C
ATOM   4388  O   SER C 115       8.757  -4.453 -25.805  1.00 32.27           O
ATOM   4389  N   SER C 115       5.211  -3.682 -26.166  1.00 26.36           N
ATOM   4390  CA  SER C 115       6.364  -4.374 -25.589  1.00 26.55           C
ATOM   4391  C   SER C 115       7.702  -3.919 -26.182  1.00 30.65           C
ATOM   4392  CB  SER C 115       6.190  -5.898 -25.735  1.00 24.98           C
ATOM   4393  OG  SER C 115       5.953  -6.310 -27.078  1.00 24.51           O
ATOM   4394  O   GLY C 116       8.487  -4.046 -29.426  1.00 31.96           O
ATOM   4395  N   GLY C 116       7.701  -2.934 -27.070  1.00 28.32           N
ATOM   4396  CA  GLY C 116       8.928  -2.468 -27.648  1.00 26.03           C
ATOM   4397  C   GLY C 116       9.295  -3.307 -28.853  1.00 29.12           C
```

[1911]

```
ATOM   4398  O   GLY C 117      10.001  -2.561 -31.946  1.00 32.05           O
ATOM   4399  N   GLY C 117      10.563  -3.215 -29.218  1.00 28.13           N
ATOM   4400  CA  GLY C 117      11.021  -4.007 -30.331  1.00 25.68           C
ATOM   4401  C   GLY C 117      10.969  -3.267 -31.643  1.00 28.44           C
ATOM   4402  O   CYS C 118      12.242  -5.383 -34.241  1.00 28.51           O
ATOM   4403  N   CYS C 118      11.968  -3.452 -32.403  1.00 26.57           N
ATOM   4404  CA  CYS C 118      12.172  -3.051 -33.774  1.00 25.65           C
ATOM   4405  C   CYS C 118      11.986  -4.257 -34.666  1.00 26.90           C
ATOM   4406  CB  CYS C 118      13.592  -2.518 -33.981  1.00 25.27           C
ATOM   4407  SG  CYS C 118      13.911  -0.907 -33.284  1.00 30.05           S
ATOM   4408  O   PRO C 119      13.881  -5.143 -36.848  1.00 30.00           O
ATOM   4409  N   PRO C 119      11.568  -4.037 -35.910  1.00 23.93           N
ATOM   4410  CA  PRO C 119      11.491  -5.165 -36.848  1.00 28.23           C
ATOM   4411  C   PRO C 119      12.802  -5.768 -37.063  1.00 28.29           C
ATOM   4412  CB  PRO C 119      10.929  -4.495 -38.124  1.00 27.49           C
ATOM   4413  CG  PRO C 119      11.189  -3.026 -37.955  1.00 24.20           C
ATOM   4414  CD  PRO C 119      11.114  -2.765 -36.486  1.00 25.79           C
ATOM   4415  O   PRO C 120      14.304  -6.745 -39.873  1.00 30.52           O
ATOM   4416  N   PRO C 120      12.888  -7.062 -37.410  1.00 28.19           N
ATOM   4417  CA  PRO C 120      14.175  -7.691 -37.667  1.00 32.67           C
ATOM   4418  C   PRO C 120      14.893  -7.010 -38.824  1.00 32.20           C
ATOM   4419  CB  PRO C 120      13.802  -9.138 -38.004  1.00 36.04           C
ATOM   4420  CG  PRO C 120      12.400  -9.044 -38.537  1.00 33.22           C
ATOM   4421  CD  PRO C 120      11.759  -7.976 -37.696  1.00 29.42           C
ATOM   4422  O   CYS C 121      18.834  -7.197 -38.558  1.00 39.08           O
ATOM   4423  N   CYS C 121      16.183  -6.750 -38.637  1.00 33.68           N
ATOM   4424  CA  CYS C 121      16.991  -6.131 -39.679  1.00 36.49           C
ATOM   4425  C   CYS C 121      18.431  -6.616 -39.567  1.00 37.23           C
ATOM   4426  CB  CYS C 121      16.933  -4.608 -39.568  1.00 29.59           C
ATOM   4427  SG  CYS C 121      17.447  -4.053 -37.946  1.00 31.44           S
ATOM   4428  O   GLY C 122      20.371  -8.947 -41.070  1.00 44.92           O
ATOM   4429  N   GLY C 122      19.217  -6.338 -40.606  1.00 37.10           N
ATOM   4430  CA  GLY C 122      20.642  -6.625 -40.519  1.00 37.70           C
ATOM   4431  C   GLY C 122      20.863  -8.105 -40.308  1.00 44.46           C
ATOM   4432  O   GLY C 123      20.827 -11.410 -37.460  1.00 55.81           O
ATOM   4433  N   GLY C 123      21.690  -8.425 -39.312  1.00 44.83           N
ATOM   4434  CA  GLY C 123      21.848  -9.804 -38.902  1.00 47.64           C
ATOM   4435  C   GLY C 123      20.910 -10.218 -37.785  1.00 52.04           C
ATOM   4436  O   SER C 124      16.893  -9.141 -36.712  1.00 49.42           O
ATOM   4437  N   SER C 124      20.155  -9.266 -37.226  1.00 51.39           N
ATOM   4438  CA  SER C 124      19.208  -9.558 -36.144  1.00 47.56           C
ATOM   4439  C   SER C 124      17.868  -9.891 -36.789  1.00 48.87           C
ATOM   4440  CB  SER C 124      19.079  -8.378 -35.183  1.00 48.50           C
ATOM   4441  OG  SER C 124      18.110  -7.401 -35.610  1.00 43.23           O
ATOM   4442  O   GLY C 125      16.184 -12.273 -40.352  1.00 52.70           O
ATOM   4443  N   GLY C 125      17.863 -11.032 -37.472  1.00 46.43           N
ATOM   4444  CA  GLY C 125      16.681 -11.514 -38.151  1.00 45.21           C
ATOM   4445  C   GLY C 125      17.030 -12.176 -39.466  1.00 49.26           C
ATOM   4446  N   GLU C 127      16.828 -14.990 -41.103  1.00 41.11           N
ATOM   4447  CA  GLU C 127      16.471 -15.605 -42.392  1.00 46.50           C
ATOM   4448  C   GLU C 127      17.309 -14.978 -43.517  1.00 47.71           C
ATOM   4449  O   GLU C 127      18.262 -15.586 -44.026  1.00 47.89           O
ATOM   4450  CB  GLU C 127      14.979 -15.451 -42.680  1.00 43.98           C
ATOM   4451  N   VAL C 128      16.906 -13.783 -43.936  1.00 46.82           N
ATOM   4452  CA  VAL C 128      17.654 -12.952 -44.874  1.00 40.01           C
ATOM   4453  C   VAL C 128      18.493 -11.981 -44.046  1.00 39.25           C
ATOM   4454  O   VAL C 128      18.048 -11.546 -42.980  1.00 43.74           O
ATOM   4455  CB  VAL C 128      16.675 -12.220 -45.803  1.00 35.60           C
ATOM   4456  CG1 VAL C 128      17.232 -10.968 -46.300  1.00 35.75           C
ATOM   4457  CG2 VAL C 128      16.256 -13.101 -46.914  1.00 33.49           C
ATOM   4458  N   GLN C 129      19.707 -11.638 -44.489  1.00 36.58           N
ATOM   4459  CA  GLN C 129      20.515 -10.720 -43.682  1.00 39.34           C
ATOM   4460  C   GLN C 129      21.190  -9.660 -44.541  1.00 33.28           C
ATOM   4461  O   GLN C 129      21.683  -9.952 -45.631  1.00 34.38           O
ATOM   4462  CB  GLN C 129      21.627 -11.420 -42.854  1.00 43.84           C
ATOM   4463  CG  GLN C 129      21.222 -12.644 -42.003  1.00 45.79           C
ATOM   4464  CD  GLN C 129      21.149 -13.904 -42.804  1.00 46.20           C
ATOM   4465  NE2 GLN C 129      20.012 -14.530 -42.810  1.00 44.87           N
```

[1912]

```
ATOM   4466  OE1 GLN C 129      22.119 -14.334 -43.400  1.00 50.26           O
ATOM   4467  N   LEU C 130      21.234  -8.437 -44.014  1.00 35.77           N
ATOM   4468  CA  LEU C 130      21.949  -7.332 -44.645  1.00 35.17           C
ATOM   4469  C   LEU C 130      22.736  -6.602 -43.564  1.00 38.23           C
ATOM   4470  O   LEU C 130      22.179  -5.757 -42.858  1.00 37.51           O
ATOM   4471  CB  LEU C 130      20.988  -6.364 -45.320  1.00 34.69           C
ATOM   4472  CG  LEU C 130      20.181  -6.807 -46.525  1.00 35.09           C
ATOM   4473  CD1 LEU C 130      19.278  -5.649 -46.927  1.00 30.04           C
ATOM   4474  CD2 LEU C 130      21.112  -7.237 -47.656  1.00 36.05           C
ATOM   4475  N   LEU C 131      24.046  -6.818 -43.520  1.00 41.42           N
ATOM   4476  CA  LEU C 131      24.884  -6.215 -42.494  1.00 40.11           C
ATOM   4477  C   LEU C 131      25.583  -5.001 -43.076  1.00 38.96           C
ATOM   4478  O   LEU C 131      26.258  -5.103 -44.109  1.00 41.84           O
ATOM   4479  CB  LEU C 131      25.900  -7.206 -41.937  1.00 41.44           C
ATOM   4480  CG  LEU C 131      25.366  -7.984 -40.744  1.00 43.83           C
ATOM   4481  CD1 LEU C 131      24.761  -6.992 -39.742  1.00 47.38           C
ATOM   4482  CD2 LEU C 131      24.378  -9.075 -41.156  1.00 45.24           C
ATOM   4483  N   GLU C 132      25.386  -3.856 -42.425  1.00 40.64           N
ATOM   4484  CA  GLU C 132      25.941  -2.570 -42.813  1.00 39.75           C
ATOM   4485  C   GLU C 132      27.240  -2.289 -42.061  1.00 48.74           C
ATOM   4486  O   GLU C 132      27.568  -2.924 -41.050  1.00 48.97           O
ATOM   4487  CB  GLU C 132      24.960  -1.430 -42.540  1.00 36.19           C
ATOM   4488  CG  GLU C 132      23.676  -1.492 -43.304  1.00 37.87           C
ATOM   4489  CD  GLU C 132      22.827  -0.226 -43.127  1.00 36.91           C
ATOM   4490  OE1 GLU C 132      23.309   0.880 -43.444  1.00 35.46           O
ATOM   4491  OE2 GLU C 132      21.673  -0.333 -42.660  1.00 34.72           O
ATOM   4492  N   SER C 133      27.987  -1.325 -42.589  1.00 48.75           N
ATOM   4493  CA  SER C 133      29.232  -0.846 -42.014  1.00 47.37           C
ATOM   4494  C   SER C 133      29.624   0.405 -42.770  1.00 46.99           C
ATOM   4495  O   SER C 133      29.366   0.509 -43.971  1.00 47.11           O
ATOM   4496  CB  SER C 133      30.336  -1.881 -42.155  1.00 43.17           C
ATOM   4497  OG  SER C 133      30.615  -2.002 -43.530  1.00 48.02           O
ATOM   4498  N   GLY C 134      30.349   1.293 -42.095  1.00 47.56           N
ATOM   4499  CA  GLY C 134      30.783   2.502 -42.759  1.00 45.24           C
ATOM   4500  C   GLY C 134      30.397   3.790 -42.074  1.00 48.99           C
ATOM   4501  O   GLY C 134      30.877   4.854 -42.473  1.00 49.26           O
ATOM   4502  N   GLY C 135      29.529   3.707 -41.079  1.00 49.37           N
ATOM   4503  CA  GLY C 135      29.147   4.911 -40.329  1.00 44.96           C
ATOM   4504  C   GLY C 135      30.317   5.577 -39.641  1.00 44.28           C
ATOM   4505  O   GLY C 135      31.399   4.990 -39.600  1.00 46.03           O
ATOM   4506  N   GLY C 136      30.083   6.770 -39.102  1.00 46.55           N
ATOM   4507  CA  GLY C 136      31.131   7.503 -38.377  1.00 46.50           C
ATOM   4508  C   GLY C 136      30.941   9.002 -38.479  1.00 47.83           C
ATOM   4509  O   GLY C 136      29.953   9.431 -39.078  1.00 43.38           O
ATOM   4510  N   LEU C 137      31.863   9.765 -37.900  1.00 51.73           N
ATOM   4511  CA  LEU C 137      31.820  11.239 -38.023  1.00 53.45           C
ATOM   4512  C   LEU C 137      32.729  11.636 -39.180  1.00 54.19           C
ATOM   4513  O   LEU C 137      33.834  11.078 -39.279  1.00 52.33           O
ATOM   4514  CB  LEU C 137      32.333  11.872 -36.730  1.00 54.42           C
ATOM   4515  CG  LEU C 137      32.484  13.391 -36.737  1.00 51.99           C
ATOM   4516  CD1 LEU C 137      31.372  14.045 -37.538  1.00 54.49           C
ATOM   4517  CD2 LEU C 137      32.505  13.931 -35.317  1.00 50.66           C
ATOM   4518  N   VAL C 138      32.249  12.524 -40.045  1.00 56.71           N
ATOM   4519  CA  VAL C 138      33.098  13.054 -41.148  1.00 57.52           C
ATOM   4520  C   VAL C 138      33.137  14.569 -40.962  1.00 60.24           C
ATOM   4521  O   VAL C 138      32.068  15.161 -40.746  1.00 57.48           O
ATOM   4522  CB  VAL C 138      32.551  12.670 -42.539  1.00 58.52           C
ATOM   4523  CG1 VAL C 138      33.586  12.857 -43.634  1.00 58.70           C
ATOM   4524  CG2 VAL C 138      31.990  11.260 -42.568  1.00 50.69           C
ATOM   4525  N   GLN C 139      34.328  15.162 -40.991  1.00 63.52           N
ATOM   4526  CA  GLN C 139      34.413  16.645 -40.939  1.00 61.12           C
ATOM   4527  C   GLN C 139      33.941  17.189 -42.288  1.00 56.76           C
ATOM   4528  O   GLN C 139      34.122  16.498 -43.296  1.00 54.07           O
ATOM   4529  CB  GLN C 139      35.814  17.103 -40.538  1.00 61.09           C
ATOM   4530  CG  GLN C 139      36.275  16.565 -39.191  1.00 63.07           C
ATOM   4531  CD  GLN C 139      35.302  16.851 -38.073  1.00 66.09           C
ATOM   4532  NE2 GLN C 139      35.537  16.235 -36.927  1.00 60.69           N
ATOM   4533  OE1 GLN C 139      34.350  17.612 -38.229  1.00 64.16           O
```

[1913]

```
ATOM   4534  N   PRO C 140      33.374  18.408 -42.358  1.00 60.46           N
ATOM   4535  CA  PRO C 140      32.825  18.873 -43.619  1.00 58.39           C
ATOM   4536  C   PRO C 140      34.034  18.903 -44.557  1.00 63.13           C
ATOM   4537  O   PRO C 140      34.960  19.636 -44.304  1.00 60.42           O
ATOM   4538  CB  PRO C 140      32.345  20.294 -43.290  1.00 56.95           C
ATOM   4539  CG  PRO C 140      32.220  20.333 -41.781  1.00 56.61           C
ATOM   4540  CD  PRO C 140      33.270  19.373 -41.268  1.00 59.28           C
ATOM   4541  N   GLY C 141      33.989  18.100 -45.619  1.00 65.25           N
ATOM   4542  CA  GLY C 141      35.192  18.044 -46.463  1.00 61.51           C
ATOM   4543  C   GLY C 141      35.388  16.781 -47.271  1.00 62.03           C
ATOM   4544  O   GLY C 141      35.393  16.884 -48.504  1.00 59.11           O
ATOM   4545  N   GLY C 142      35.528  15.628 -46.616  1.00 63.33           N
ATOM   4546  CA  GLY C 142      35.955  14.415 -47.340  1.00 60.91           C
ATOM   4547  C   GLY C 142      34.915  13.450 -47.866  1.00 64.00           C
ATOM   4548  O   GLY C 142      33.880  13.903 -48.390  1.00 60.79           O
ATOM   4549  N   SER C 143      35.199  12.151 -47.749  1.00 60.82           N
ATOM   4550  CA  SER C 143      34.328  11.120 -48.366  1.00 60.76           C
ATOM   4551  C   SER C 143      33.890  10.023 -47.384  1.00 57.11           C
ATOM   4552  O   SER C 143      34.405  10.023 -46.258  1.00 57.23           O
ATOM   4553  CB  SER C 143      35.104  10.504 -49.500  1.00 55.72           C
ATOM   4554  OG  SER C 143      36.340   9.978 -49.049  1.00 53.97           O
ATOM   4555  N   LEU C 144      32.938   9.165 -47.780  1.00 55.03           N
ATOM   4556  CA  LEU C 144      32.558   7.970 -46.965  1.00 55.40           C
ATOM   4557  C   LEU C 144      32.048   6.840 -47.868  1.00 52.19           C
ATOM   4558  O   LEU C 144      31.247   7.129 -48.742  1.00 54.72           O
ATOM   4559  CB  LEU C 144      31.503   8.328 -45.915  1.00 56.92           C
ATOM   4560  CG  LEU C 144      31.419   7.372 -44.729  1.00 55.10           C
ATOM   4561  CD1 LEU C 144      32.800   6.865 -44.344  1.00 51.00           C
ATOM   4562  CD2 LEU C 144      30.764   8.055 -43.545  1.00 52.72           C
ATOM   4563  N   ARG C 145      32.504   5.605 -47.662  1.00 45.72           N
ATOM   4564  CA  ARG C 145      32.039   4.448 -48.395  1.00 47.76           C
ATOM   4565  C   ARG C 145      31.373   3.504 -47.399  1.00 48.35           C
ATOM   4566  O   ARG C 145      32.025   2.982 -46.486  1.00 47.92           O
ATOM   4567  CB  ARG C 145      33.196   3.768 -49.131  1.00 45.38           C
ATOM   4568  CG  ARG C 145      32.804   2.618 -49.959  1.00 43.38           C
ATOM   4569  CD  ARG C 145      33.067   1.396 -49.323  1.00 45.73           C
ATOM   4570  NE  ARG C 145      34.137   0.775 -49.882  1.00 49.35           N
ATOM   4571  CZ  ARG C 145      34.456  -0.354 -49.580  1.00 47.81           C
ATOM   4572  NH1 ARG C 145      33.774  -0.940 -48.745  1.00 49.50           N
ATOM   4573  NH2 ARG C 145      35.429  -0.902 -50.109  1.00 43.90           N
ATOM   4574  N   LEU C 146      30.066   3.320 -47.571  1.00 48.82           N
ATOM   4575  CA  LEU C 146      29.246   2.399 -46.809  1.00 42.69           C
ATOM   4576  C   LEU C 146      29.208   1.079 -47.545  1.00 40.01           C
ATOM   4577  O   LEU C 146      29.292   1.030 -48.771  1.00 41.62           O
ATOM   4578  CB  LEU C 146      27.818   2.940 -46.633  1.00 40.73           C
ATOM   4579  CG  LEU C 146      27.530   4.317 -46.002  1.00 41.02           C
ATOM   4580  CD1 LEU C 146      26.054   4.714 -46.089  1.00 37.35           C
ATOM   4581  CD2 LEU C 146      27.934   4.271 -44.549  1.00 42.32           C
ATOM   4582  N   SER C 147      29.133  -0.001 -46.788  1.00 39.87           N
ATOM   4583  CA  SER C 147      29.012  -1.323 -47.362  1.00 38.15           C
ATOM   4584  C   SER C 147      27.815  -2.049 -46.757  1.00 41.05           C
ATOM   4585  O   SER C 147      27.357  -1.734 -45.655  1.00 41.73           O
ATOM   4586  CB  SER C 147      30.282  -2.118 -47.157  1.00 41.70           C
ATOM   4587  OG  SER C 147      30.397  -3.059 -48.196  1.00 44.60           O
ATOM   4588  N   CYS C 148      27.318  -3.045 -47.483  1.00 41.47           N
ATOM   4589  CA  CYS C 148      26.135  -3.787 -47.043  1.00 39.10           C
ATOM   4590  C   CYS C 148      26.311  -5.226 -47.517  1.00 38.25           C
ATOM   4591  O   CYS C 148      26.260  -5.490 -48.719  1.00 41.07           O
ATOM   4592  CB  CYS C 148      24.871  -3.123 -47.603  1.00 38.53           C
ATOM   4593  SG  CYS C 148      23.244  -3.857 -47.276  1.00 48.63           S
ATOM   4594  N   ALA C 149      26.604  -6.146 -46.598  1.00 36.41           N
ATOM   4595  CA  ALA C 149      26.910  -7.528 -46.964  1.00 35.47           C
ATOM   4596  C   ALA C 149      25.652  -8.384 -46.902  1.00 38.32           C
ATOM   4597  O   ALA C 149      25.038  -8.508 -45.837  1.00 40.83           O
ATOM   4598  CB  ALA C 149      27.974  -8.103 -46.036  1.00 35.07           C
ATOM   4599  N   ALA C 150      25.300  -9.018 -48.018  1.00 38.80           N
ATOM   4600  CA  ALA C 150      24.048  -9.760 -48.131  1.00 37.05           C
ATOM   4601  C   ALA C 150      24.248 -11.258 -48.006  1.00 33.45           C
```

[1914]

```
ATOM   4602  O   ALA C 150      25.200 -11.816 -48.550  1.00 39.44           O
ATOM   4603  CB  ALA C 150      23.381  -9.496 -49.484  1.00 32.55           C
ATOM   4604  N   SER C 151      23.288 -11.923 -47.380  1.00 33.47           N
ATOM   4605  CA  SER C 151      23.288 -13.375 -47.362  1.00 32.63           C
ATOM   4606  C   SER C 151      21.863 -13.856 -47.140  1.00 33.10           C
ATOM   4607  O   SER C 151      20.997 -13.105 -46.687  1.00 35.94           O
ATOM   4608  CB  SER C 151      24.239 -13.928 -46.291  1.00 36.50           C
ATOM   4609  OG  SER C 151      23.855 -13.532 -44.995  1.00 37.37           O
ATOM   4610  N   GLY C 152      21.631 -15.116 -47.486  1.00 34.29           N
ATOM   4611  CA  GLY C 152      20.336 -15.734 -47.323  1.00 32.48           C
ATOM   4612  C   GLY C 152      19.442 -15.643 -48.534  1.00 33.64           C
ATOM   4613  O   GLY C 152      18.304 -16.119 -48.483  1.00 36.74           O
ATOM   4614  N   PHE C 153      19.915 -15.056 -49.626  1.00 31.98           N
ATOM   4615  CA  PHE C 153      19.125 -14.958 -50.843  1.00 28.91           C
ATOM   4616  C   PHE C 153      20.087 -14.771 -51.999  1.00 30.23           C
ATOM   4617  O   PHE C 153      21.252 -14.421 -51.798  1.00 32.09           O
ATOM   4618  CB  PHE C 153      18.109 -13.815 -50.770  1.00 28.47           C
ATOM   4619  CG  PHE C 153      18.718 -12.438 -50.619  1.00 29.90           C
ATOM   4620  CD1 PHE C 153      19.195 -11.998 -49.399  1.00 29.47           C
ATOM   4621  CD2 PHE C 153      18.747 -11.560 -51.694  1.00 28.37           C
ATOM   4622  CE1 PHE C 153      19.722 -10.737 -49.257  1.00 27.56           C
ATOM   4623  CE2 PHE C 153      19.274 -10.302 -51.552  1.00 26.10           C
ATOM   4624  CZ  PHE C 153      19.760  -9.886 -50.330  1.00 27.46           C
ATOM   4625  N   THR C 154      19.589 -15.003 -53.213  1.00 30.04           N
ATOM   4626  CA  THR C 154      20.415 -14.870 -54.413  1.00 27.85           C
ATOM   4627  C   THR C 154      20.537 -13.391 -54.760  1.00 28.40           C
ATOM   4628  O   THR C 154      19.709 -12.813 -55.457  1.00 30.84           O
ATOM   4629  CB  THR C 154      19.845 -15.693 -55.554  1.00 27.63           C
ATOM   4630  CG2 THR C 154      20.816 -15.721 -56.717  1.00 32.85           C
ATOM   4631  OG1 THR C 154      19.643 -17.033 -55.107  1.00 26.19           O
ATOM   4632  N   PHE C 155      21.611 -12.792 -54.251  1.00 26.61           N
ATOM   4633  CA  PHE C 155      21.849 -11.359 -54.324  1.00 27.23           C
ATOM   4634  C   PHE C 155      21.645 -10.805 -55.732  1.00 30.49           C
ATOM   4635  O   PHE C 155      21.071  -9.724 -55.902  1.00 29.17           O
ATOM   4636  CB  PHE C 155      23.268 -11.095 -53.817  1.00 27.67           C
ATOM   4637  CG  PHE C 155      23.609  -9.659 -53.641  1.00 27.99           C
ATOM   4638  CD1 PHE C 155      22.900  -8.862 -52.761  1.00 29.49           C
ATOM   4639  CD2 PHE C 155      24.662  -9.099 -54.339  1.00 29.07           C
ATOM   4640  CE1 PHE C 155      23.225  -7.531 -52.570  1.00 29.63           C
ATOM   4641  CE2 PHE C 155      24.996  -7.770 -54.151  1.00 30.85           C
ATOM   4642  CZ  PHE C 155      24.272  -6.981 -53.271  1.00 30.01           C
ATOM   4643  N   SER C 156      22.138 -11.511 -56.754  1.00 31.55           N
ATOM   4644  CA  SER C 156      22.114 -10.971 -58.108  1.00 31.67           C
ATOM   4645  C   SER C 156      20.715 -10.940 -58.701  1.00 29.34           C
ATOM   4646  O   SER C 156      20.522 -10.343 -59.764  1.00 27.18           O
ATOM   4647  CB  SER C 156      23.032 -11.770 -59.024  1.00 30.76           C
ATOM   4648  OG  SER C 156      22.581 -13.105 -59.112  1.00 34.65           O
ATOM   4649  N   SER C 157      19.741 -11.564 -58.055  1.00 26.80           N
ATOM   4650  CA  SER C 157      18.366 -11.515 -58.524  1.00 27.05           C
ATOM   4651  C   SER C 157      17.585 -10.315 -57.987  1.00 25.24           C
ATOM   4652  O   SER C 157      16.374 -10.242 -58.223  1.00 24.30           O
ATOM   4653  CB  SER C 157      17.656 -12.805 -58.139  1.00 27.78           C
ATOM   4654  OG  SER C 157      18.311 -13.897 -58.724  1.00 27.86           O
ATOM   4655  N   TYR C 158      18.233  -9.381 -57.283  1.00 21.96           N
ATOM   4656  CA  TYR C 158      17.523  -8.292 -56.632  1.00 23.32           C
ATOM   4657  C   TYR C 158      18.239  -6.960 -56.796  1.00 24.79           C
ATOM   4658  O   TYR C 158      19.430  -6.837 -56.498  1.00 24.24           O
ATOM   4659  CB  TYR C 158      17.353  -8.564 -55.139  1.00 22.58           C
ATOM   4660  CG  TYR C 158      16.595  -9.826 -54.843  1.00 25.19           C
ATOM   4661  CD2 TYR C 158      15.219  -9.821 -54.674  1.00 27.55           C
ATOM   4662  CD1 TYR C 158      17.254 -11.034 -54.730  1.00 28.05           C
ATOM   4663  CE2 TYR C 158      14.531 -10.996 -54.403  1.00 26.52           C
ATOM   4664  CE1 TYR C 158      16.564 -12.210 -54.485  1.00 26.55           C
ATOM   4665  CZ  TYR C 158      15.212 -12.169 -54.303  1.00 23.10           C
ATOM   4666  OH  TYR C 158      14.550 -13.325 -54.040  1.00 25.21           O
ATOM   4667  N   ALA C 159      17.505  -5.952 -57.242  1.00 25.19           N
ATOM   4668  CA  ALA C 159      17.989  -4.595 -57.120  1.00 23.05           C
ATOM   4669  C   ALA C 159      18.063  -4.205 -55.649  1.00 23.05           C
```

[1915]

```
ATOM   4670  O   ALA C 159      17.409  -4.793 -54.790  1.00 25.43           O
ATOM   4671  CB  ALA C 159      17.064  -3.640 -57.862  1.00 25.27           C
ATOM   4672  N   MET C 160      18.858  -3.189 -55.356  1.00 23.86           N
ATOM   4673  CA  MET C 160      19.056  -2.740 -53.989  1.00 24.45           C
ATOM   4674  C   MET C 160      18.899  -1.228 -53.943  1.00 28.16           C
ATOM   4675  O   MET C 160      18.888  -0.543 -54.973  1.00 27.51           O
ATOM   4676  CB  MET C 160      20.434  -3.153 -53.458  1.00 23.92           C
ATOM   4677  CG  MET C 160      20.679  -4.637 -53.530  1.00 25.96           C
ATOM   4678  SD  MET C 160      19.772  -5.594 -52.305  1.00 29.20           S
ATOM   4679  CE  MET C 160      20.414  -4.926 -50.787  1.00 25.92           C
ATOM   4680  N   SER C 161      18.760  -0.700 -52.738  1.00 27.28           N
ATOM   4681  CA  SER C 161      18.536   0.721 -52.571  1.00 24.59           C
ATOM   4682  C   SER C 161      19.256   1.213 -51.328  1.00 26.97           C
ATOM   4683  O   SER C 161      19.544   0.435 -50.413  1.00 24.40           O
ATOM   4684  CB  SER C 161      17.046   1.018 -52.473  1.00 26.27           C
ATOM   4685  OG  SER C 161      16.835   2.399 -52.362  1.00 30.72           O
ATOM   4686  N   TRP C 162      19.568   2.519 -51.322  1.00 26.31           N
ATOM   4687  CA  TRP C 162      19.983   3.252 -50.135  1.00 25.90           C
ATOM   4688  C   TRP C 162      18.925   4.314 -49.845  1.00 28.89           C
ATOM   4689  O   TRP C 162      18.399   4.945 -50.766  1.00 26.75           O
ATOM   4690  CB  TRP C 162      21.384   3.896 -50.305  1.00 30.12           C
ATOM   4691  CG  TRP C 162      22.549   2.894 -50.403  1.00 28.36           C
ATOM   4692  CD1 TRP C 162      23.118   2.433 -51.546  1.00 29.14           C
ATOM   4693  CD2 TRP C 162      23.250   2.248 -49.323  1.00 29.30           C
ATOM   4694  CE2 TRP C 162      24.221   1.398 -49.902  1.00 32.05           C
ATOM   4695  CE3 TRP C 162      23.139   2.287 -47.926  1.00 32.53           C
ATOM   4696  NE1 TRP C 162      24.121   1.528 -51.260  1.00 32.09           N
ATOM   4697  CZ2 TRP C 162      25.079   0.604 -49.135  1.00 31.72           C
ATOM   4698  CZ3 TRP C 162      24.001   1.493 -47.166  1.00 30.16           C
ATOM   4699  CH2 TRP C 162      24.956   0.671 -47.776  1.00 29.91           C
ATOM   4700  N   VAL C 163      18.544   4.430 -48.568  1.00 29.18           N
ATOM   4701  CA  VAL C 163      17.586   5.417 -48.065  1.00 28.75           C
ATOM   4702  C   VAL C 163      18.148   6.010 -46.778  1.00 29.53           C
ATOM   4703  O   VAL C 163      18.700   5.283 -45.948  1.00 33.41           O
ATOM   4704  CB  VAL C 163      16.207   4.782 -47.786  1.00 30.30           C
ATOM   4705  CG1 VAL C 163      15.294   5.769 -47.056  1.00 29.28           C
ATOM   4706  CG2 VAL C 163      15.592   4.282 -49.063  1.00 25.59           C
ATOM   4707  N   ARG C 164      18.044   7.324 -46.613  1.00 31.89           N
ATOM   4708  CA  ARG C 164      18.548   7.963 -45.405  1.00 32.04           C
ATOM   4709  C   ARG C 164      17.407   8.606 -44.634  1.00 31.83           C
ATOM   4710  O   ARG C 164      16.323   8.850 -45.173  1.00 31.82           O
ATOM   4711  CB  ARG C 164      19.618   9.024 -45.713  1.00 35.58           C
ATOM   4712  CG  ARG C 164      19.123  10.173 -46.573  1.00 33.66           C
ATOM   4713  CD  ARG C 164      20.248  11.142 -46.861  1.00 41.94           C
ATOM   4714  NE  ARG C 164      19.788  12.311 -47.611  1.00 46.54           N
ATOM   4715  CZ  ARG C 164      20.604  13.213 -48.158  1.00 47.20           C
ATOM   4716  NH1 ARG C 164      21.923  13.081 -48.057  1.00 40.67           N
ATOM   4717  NH2 ARG C 164      20.097  14.234 -48.828  1.00 45.92           N
ATOM   4718  N   GLN C 165      17.682   8.919 -43.369  1.00 31.51           N
ATOM   4719  CA  GLN C 165      16.723   9.622 -42.520  1.00 34.00           C
ATOM   4720  C   GLN C 165      17.514  10.644 -41.717  1.00 36.57           C
ATOM   4721  O   GLN C 165      18.219  10.280 -40.774  1.00 36.51           O
ATOM   4722  CB  GLN C 165      15.994   8.667 -41.591  1.00 32.65           C
ATOM   4723  CG  GLN C 165      15.007   9.347 -40.656  1.00 34.52           C
ATOM   4724  CD  GLN C 165      14.098   8.347 -39.979  1.00 35.56           C
ATOM   4725  NE2 GLN C 165      12.791   8.603 -40.018  1.00 33.58           N
ATOM   4726  OE1 GLN C 165      14.569   7.345 -39.425  1.00 38.28           O
ATOM   4727  N   ALA C 166      17.394  11.916 -42.087  1.00 40.96           N
ATOM   4728  CA  ALA C 166      18.052  12.965 -41.329  1.00 43.84           C
ATOM   4729  C   ALA C 166      17.423  13.073 -39.942  1.00 42.85           C
ATOM   4730  O   ALA C 166      16.219  12.845 -39.781  1.00 42.20           O
ATOM   4731  CB  ALA C 166      17.953  14.307 -42.057  1.00 41.15           C
ATOM   4732  N   PRO C 167      18.204  13.480 -38.938  1.00 45.60           N
ATOM   4733  CA  PRO C 167      17.694  13.524 -37.564  1.00 43.16           C
ATOM   4734  C   PRO C 167      16.335  14.190 -37.439  1.00 44.13           C
ATOM   4735  O   PRO C 167      16.157  15.348 -37.823  1.00 45.47           O
ATOM   4736  CB  PRO C 167      18.761  14.341 -36.830  1.00 42.75           C
ATOM   4737  CG  PRO C 167      19.996  14.189 -37.640  1.00 40.48           C
```

[1916]

```
ATOM   4738  CD  PRO C 167      19.646  13.761 -39.018  1.00 44.04           C
ATOM   4739  N   GLY C 168      15.353  13.439 -36.947  1.00 45.42           N
ATOM   4740  CA  GLY C 168      14.036  14.008 -36.745  1.00 46.11           C
ATOM   4741  C   GLY C 168      13.301  14.415 -37.999  1.00 48.09           C
ATOM   4742  O   GLY C 168      12.244  15.044 -37.897  1.00 52.25           O
ATOM   4743  N   LYS C 169      13.815  14.087 -39.176  1.00 46.20           N
ATOM   4744  CA  LYS C 169      13.112  14.353 -40.426  1.00 44.96           C
ATOM   4745  C   LYS C 169      12.796  13.015 -41.102  1.00 42.85           C
ATOM   4746  O   LYS C 169      13.133  11.941 -40.591  1.00 41.09           O
ATOM   4747  CB  LYS C 169      13.918  15.319 -41.304  1.00 45.73           C
ATOM   4748  CG  LYS C 169      14.082  16.719 -40.661  1.00 47.21           C
ATOM   4749  CD  LYS C 169      12.692  17.399 -40.478  1.00 52.16           C
ATOM   4750  CE  LYS C 169      12.736  18.695 -39.655  1.00 56.83           C
ATOM   4751  NZ  LYS C 169      11.433  19.451 -39.690  1.00 57.43           N
ATOM   4752  N   GLY C 170      12.183  13.071 -42.277  1.00 36.10           N
ATOM   4753  CA  GLY C 170      11.592  11.879 -42.850  1.00 32.56           C
ATOM   4754  C   GLY C 170      12.566  10.986 -43.589  1.00 31.36           C
ATOM   4755  O   GLY C 170      13.770  11.240 -43.693  1.00 36.41           O
ATOM   4756  N   LEU C 171      12.026   9.874 -44.077  1.00 31.65           N
ATOM   4757  CA  LEU C 171      12.798   9.013 -44.961  1.00 29.61           C
ATOM   4758  C   LEU C 171      13.005   9.706 -46.294  1.00 28.77           C
ATOM   4759  O   LEU C 171      12.128  10.434 -46.779  1.00 27.40           O
ATOM   4760  CB  LEU C 171      12.083   7.684 -45.213  1.00 31.33           C
ATOM   4761  CG  LEU C 171      11.762   6.742 -44.066  1.00 25.62           C
ATOM   4762  CD1 LEU C 171      10.964   5.579 -44.604  1.00 24.01           C
ATOM   4763  CD2 LEU C 171      13.031   6.256 -43.402  1.00 29.51           C
ATOM   4764  N   GLU C 172      14.188   9.521 -46.863  1.00 28.58           N
ATOM   4765  CA  GLU C 172      14.492  10.110 -48.154  1.00 30.44           C
ATOM   4766  C   GLU C 172      15.320   9.137 -48.987  1.00 31.29           C
ATOM   4767  O   GLU C 172      16.370   8.661 -48.526  1.00 32.85           O
ATOM   4768  CB  GLU C 172      15.218  11.443 -47.990  1.00 29.71           C
ATOM   4769  CG  GLU C 172      15.585  12.038 -49.313  1.00 32.47           C
ATOM   4770  CD  GLU C 172      16.317  13.337 -49.182  1.00 42.04           C
ATOM   4771  OE1 GLU C 172      15.848  14.187 -48.405  1.00 51.94           O
ATOM   4772  OE2 GLU C 172      17.353  13.514 -49.857  1.00 46.48           O
ATOM   4773  N   TRP C 173      14.832   8.820 -50.195  1.00 29.95           N
ATOM   4774  CA  TRP C 173      15.540   7.900 -51.077  1.00 30.51           C
ATOM   4775  C   TRP C 173      16.828   8.520 -51.602  1.00 33.69           C
ATOM   4776  O   TRP C 173      16.845   9.665 -52.058  1.00 32.62           O
ATOM   4777  CB  TRP C 173      14.647   7.477 -52.246  1.00 30.44           C
ATOM   4778  CG  TRP C 173      15.314   6.515 -53.253  1.00 30.44           C
ATOM   4779  CD1 TRP C 173      15.545   5.181 -53.080  1.00 32.25           C
ATOM   4780  CD2 TRP C 173      15.744   6.817 -54.589  1.00 29.68           C
ATOM   4781  CE2 TRP C 173      16.262   5.620 -55.145  1.00 31.55           C
ATOM   4782  CE3 TRP C 173      15.766   7.987 -55.364  1.00 32.28           C
ATOM   4783  NE1 TRP C 173      16.126   4.637 -54.202  1.00 26.97           N
ATOM   4784  CZ2 TRP C 173      16.793   5.558 -56.449  1.00 32.19           C
ATOM   4785  CZ3 TRP C 173      16.289   7.923 -56.672  1.00 31.36           C
ATOM   4786  CH2 TRP C 173      16.798   6.715 -57.194  1.00 30.08           C
ATOM   4787  N   VAL C 174      17.896   7.733 -51.585  1.00 31.67           N
ATOM   4788  CA  VAL C 174      19.207   8.179 -52.021  1.00 29.46           C
ATOM   4789  C   VAL C 174      19.545   7.659 -53.410  1.00 31.83           C
ATOM   4790  O   VAL C 174      19.909   8.431 -54.295  1.00 35.73           O
ATOM   4791  CB  VAL C 174      20.268   7.738 -50.990  1.00 31.34           C
ATOM   4792  CG1 VAL C 174      21.649   8.091 -51.466  1.00 37.51           C
ATOM   4793  CG2 VAL C 174      20.000   8.388 -49.652  1.00 33.14           C
ATOM   4794  N   SER C 175      19.423   6.351 -53.629  1.00 34.47           N
ATOM   4795  CA  SER C 175      19.968   5.714 -54.823  1.00 29.49           C
ATOM   4796  C   SER C 175      19.423   4.299 -54.978  1.00 28.74           C
ATOM   4797  O   SER C 175      19.019   3.663 -54.002  1.00 29.38           O
ATOM   4798  CB  SER C 175      21.487   5.667 -54.751  1.00 32.02           C
ATOM   4799  OG  SER C 175      21.984   4.993 -55.892  1.00 35.61           O
ATOM   4800  N   ALA C 176      19.440   3.799 -56.215  1.00 30.48           N
ATOM   4801  CA  ALA C 176      19.130   2.392 -56.456  1.00 27.48           C
ATOM   4802  C   ALA C 176      20.025   1.841 -57.554  1.00 28.20           C
ATOM   4803  O   ALA C 176      20.594   2.586 -58.350  1.00 27.71           O
ATOM   4804  CB  ALA C 176      17.656   2.182 -56.820  1.00 25.55           C
[1917] ATOM   4805  N   ILE C 177      20.155   0.516 -57.579  1.00 28.11           N
```

```
ATOM   4806  CA  ILE C 177      20.987  -0.189 -58.547  1.00 26.93           C
ATOM   4807  C   ILE C 177      20.297  -1.492 -58.919  1.00 27.98           C
ATOM   4808  O   ILE C 177      19.778  -2.190 -58.045  1.00 26.03           O
ATOM   4809  CB  ILE C 177      22.391  -0.458 -57.972  1.00 31.40           C
ATOM   4810  CG1 ILE C 177      23.309  -1.060 -59.036  1.00 30.44           C
ATOM   4811  CG2 ILE C 177      22.311  -1.360 -56.716  1.00 28.27           C
ATOM   4812  CD1 ILE C 177      24.756  -1.083 -58.618  1.00 32.07           C
ATOM   4813  N   SER C 178      20.292  -1.833 -60.212  1.00 28.89           N
ATOM   4814  CA  SER C 178      19.621  -3.048 -60.648  1.00 26.35           C
ATOM   4815  C   SER C 178      20.393  -4.269 -60.173  1.00 27.02           C
ATOM   4816  O   SER C 178      21.525  -4.174 -59.697  1.00 28.52           O
ATOM   4817  CB  SER C 178      19.500  -3.108 -62.166  1.00 31.62           C
ATOM   4818  OG  SER C 178      20.787  -3.252 -62.753  1.00 32.63           O
ATOM   4819  N   GLY C 179      19.755  -5.434 -60.302  1.00 27.22           N
ATOM   4820  CA  GLY C 179      20.365  -6.671 -59.829  1.00 27.89           C
ATOM   4821  C   GLY C 179      21.737  -6.932 -60.427  1.00 33.32           C
ATOM   4822  O   GLY C 179      22.662  -7.365 -59.729  1.00 34.46           O
ATOM   4823  N   SER C 180      21.884  -6.690 -61.727  1.00 32.03           N
ATOM   4824  CA  SER C 180      23.160  -6.868 -62.398  1.00 28.87           C
ATOM   4825  C   SER C 180      24.122  -5.725 -62.126  1.00 30.66           C
ATOM   4826  O   SER C 180      25.326  -5.892 -62.321  1.00 32.65           O
ATOM   4827  CB  SER C 180      22.936  -6.967 -63.900  1.00 27.76           C
ATOM   4828  OG  SER C 180      22.567  -5.702 -64.412  1.00 30.83           O
ATOM   4829  N   GLY C 181      23.620  -4.576 -61.674  1.00 31.26           N
ATOM   4830  CA  GLY C 181      24.404  -3.366 -61.600  1.00 30.00           C
ATOM   4831  C   GLY C 181      24.339  -2.499 -62.841  1.00 31.89           C
ATOM   4832  O   GLY C 181      24.947  -1.424 -62.852  1.00 32.28           O
ATOM   4833  N   GLY C 182      23.615  -2.932 -63.879  1.00 33.00           N
ATOM   4834  CA  GLY C 182      23.585  -2.274 -65.181  1.00 32.62           C
ATOM   4835  C   GLY C 182      22.812  -0.974 -65.237  1.00 35.55           C
ATOM   4836  O   GLY C 182      22.932  -0.249 -66.226  1.00 34.76           O
ATOM   4837  N   SER C 183      21.969  -0.693 -64.240  1.00 34.44           N
ATOM   4838  CA  SER C 183      21.237   0.569 -64.157  1.00 33.58           C
ATOM   4839  C   SER C 183      21.422   1.163 -62.763  1.00 32.55           C
ATOM   4840  O   SER C 183      21.358   0.446 -61.760  1.00 28.48           O
ATOM   4841  CB  SER C 183      19.746   0.378 -64.457  1.00 31.27           C
ATOM   4842  OG  SER C 183      19.553  -0.396 -65.627  1.00 35.84           O
ATOM   4843  N   THR C 184      21.659   2.470 -62.700  1.00 32.68           N
ATOM   4844  CA  THR C 184      21.835   3.168 -61.434  1.00 31.18           C
ATOM   4845  C   THR C 184      21.009   4.442 -61.445  1.00 35.36           C
ATOM   4846  O   THR C 184      20.867   5.083 -62.494  1.00 31.28           O
ATOM   4847  CB  THR C 184      23.275   3.573 -61.206  1.00 30.84           C
ATOM   4848  CG2 THR C 184      24.179   2.348 -61.246  1.00 30.93           C
ATOM   4849  OG1 THR C 184      23.654   4.464 -62.264  1.00 33.06           O
ATOM   4850  N   TYR C 185      20.467   4.809 -60.280  1.00 32.83           N
ATOM   4851  CA  TYR C 185      19.612   5.984 -60.148  1.00 30.43           C
ATOM   4852  C   TYR C 185      19.948   6.710 -58.854  1.00 31.95           C
ATOM   4853  O   TYR C 185      20.357   6.078 -57.873  1.00 34.70           O
ATOM   4854  CB  TYR C 185      18.139   5.610 -60.161  1.00 28.04           C
ATOM   4855  CG  TYR C 185      17.773   4.666 -61.255  1.00 31.63           C
ATOM   4856  CD2 TYR C 185      17.787   3.309 -61.031  1.00 31.16           C
ATOM   4857  CD1 TYR C 185      17.435   5.123 -62.522  1.00 29.81           C
ATOM   4858  CE2 TYR C 185      17.449   2.419 -62.027  1.00 35.30           C
ATOM   4859  CE1 TYR C 185      17.100   4.232 -63.532  1.00 31.60           C
ATOM   4860  CZ  TYR C 185      17.108   2.889 -63.268  1.00 31.97           C
ATOM   4861  OH  TYR C 185      16.770   1.990 -64.239  1.00 40.95           O
ATOM   4862  N   TYR C 186      19.759   8.041 -58.854  1.00 32.44           N
ATOM   4863  CA  TYR C 186      20.135   8.904 -57.732  1.00 33.30           C
ATOM   4864  C   TYR C 186      19.055   9.960 -57.479  1.00 32.80           C
ATOM   4865  O   TYR C 186      18.371  10.397 -58.402  1.00 33.19           O
ATOM   4866  CB  TYR C 186      21.484   9.570 -58.004  1.00 31.57           C
ATOM   4867  CG  TYR C 186      22.612   8.566 -58.209  1.00 28.59           C
ATOM   4868  CD1 TYR C 186      22.853   7.995 -59.459  1.00 32.40           C
ATOM   4869  CD2 TYR C 186      23.431   8.182 -57.160  1.00 32.99           C
ATOM   4870  CE1 TYR C 186      23.879   7.068 -59.648  1.00 30.34           C
ATOM   4871  CE2 TYR C 186      24.462   7.262 -57.347  1.00 34.02           C
ATOM   4872  CZ  TYR C 186      24.679   6.718 -58.595  1.00 30.63           C
ATOM   4873  OH  TYR C 186      25.693   5.802 -58.774  1.00 35.59           O
```

[1918]

```
ATOM   4874  N   ALA C 187      18.910  10.353 -56.211  1.00 34.58           N
ATOM   4875  CA  ALA C 187      18.078  11.491 -55.816  1.00 37.37           C
ATOM   4876  C   ALA C 187      18.706  12.813 -56.302  1.00 44.28           C
ATOM   4877  O   ALA C 187      19.940  12.936 -56.362  1.00 43.16           O
ATOM   4878  CB  ALA C 187      17.874  11.483 -54.281  1.00 37.14           C
ATOM   4879  N   ASP C 188      17.861  13.807 -56.611  1.00 40.00           N
ATOM   4880  CA  ASP C 188      18.406  15.053 -57.122  1.00 44.45           C
ATOM   4881  C   ASP C 188      19.581  15.574 -56.269  1.00 51.87           C
ATOM   4882  O   ASP C 188      20.715  15.672 -56.733  1.00 50.80           O
ATOM   4883  CB  ASP C 188      17.280  16.142 -57.159  1.00 45.95           C
ATOM   4884  CG  ASP C 188      16.310  15.972 -58.306  1.00 54.11           C
ATOM   4885  OD1 ASP C 188      16.833  15.673 -59.398  1.00 56.18           O
ATOM   4886  OD2 ASP C 188      15.067  16.235 -58.123  1.00 55.82           O
ATOM   4887  N   SER C 189      19.374  15.716 -54.918  1.00 45.77           N
ATOM   4888  CA  SER C 189      20.303  16.374 -54.015  1.00 45.54           C
ATOM   4889  C   SER C 189      21.640  15.653 -53.780  1.00 44.72           C
ATOM   4890  O   SER C 189      22.495  16.143 -53.019  1.00 50.49           O
ATOM   4891  CB  SER C 189      19.576  16.567 -52.679  1.00 46.17           C
ATOM   4892  OG  SER C 189      19.081  15.290 -52.346  1.00 49.48           O
ATOM   4893  N   VAL C 190      21.831  14.494 -54.397  1.00 43.04           N
ATOM   4894  CA  VAL C 190      23.027  13.694 -54.189  1.00 47.76           C
ATOM   4895  C   VAL C 190      23.747  13.339 -55.488  1.00 46.14           C
ATOM   4896  O   VAL C 190      24.855  12.781 -55.441  1.00 48.07           O
ATOM   4897  CB  VAL C 190      22.681  12.423 -53.382  1.00 45.34           C
ATOM   4898  CG1 VAL C 190      21.879  12.808 -52.142  1.00 44.11           C
ATOM   4899  CG2 VAL C 190      21.954  11.392 -54.229  1.00 39.04           C
ATOM   4900  N   LYS C 191      23.193  13.730 -56.641  1.00 45.81           N
ATOM   4901  CA  LYS C 191      23.651  13.351 -57.980  1.00 48.43           C
ATOM   4902  C   LYS C 191      25.072  13.839 -58.267  1.00 44.97           C
ATOM   4903  O   LYS C 191      25.467  14.944 -57.873  1.00 49.67           O
ATOM   4904  CB  LYS C 191      22.690  14.009 -58.996  1.00 45.80           C
ATOM   4905  CG  LYS C 191      21.845  13.146 -59.942  1.00 47.38           C
ATOM   4906  CD  LYS C 191      20.424  13.850 -60.039  1.00 52.74           C
ATOM   4907  CE  LYS C 191      19.420  13.063 -60.748  1.00 51.76           C
ATOM   4908  NZ  LYS C 191      18.043  13.553 -60.686  1.00 53.36           N
ATOM   4909  N   GLY C 192      25.848  12.992 -58.921  1.00 44.28           N
ATOM   4910  CA  GLY C 192      27.199  13.331 -59.284  1.00 48.05           C
ATOM   4911  C   GLY C 192      28.172  13.338 -58.141  1.00 47.65           C
ATOM   4912  O   GLY C 192      29.388  13.308 -58.375  1.00 45.91           O
ATOM   4913  N   ARG C 193      27.670  13.319 -56.916  1.00 47.63           N
ATOM   4914  CA  ARG C 193      28.499  13.298 -55.733  1.00 46.67           C
ATOM   4915  C   ARG C 193      28.472  11.944 -55.047  1.00 50.31           C
ATOM   4916  O   ARG C 193      29.465  11.556 -54.420  1.00 49.68           O
ATOM   4917  CB  ARG C 193      28.034  14.385 -54.760  1.00 46.21           C
ATOM   4918  CG  ARG C 193      28.696  14.317 -53.446  1.00 49.55           C
ATOM   4919  CD  ARG C 193      28.212  15.435 -52.555  1.00 51.68           C
ATOM   4920  NE  ARG C 193      27.149  15.032 -51.655  1.00 54.40           N
ATOM   4921  CZ  ARG C 193      26.036  15.747 -51.503  1.00 54.92           C
ATOM   4922  NH1 ARG C 193      25.835  16.883 -52.168  1.00 53.91           N
ATOM   4923  NH2 ARG C 193      25.095  15.327 -50.684  1.00 50.54           N
ATOM   4924  N   PHE C 194      27.384  11.194 -55.205  1.00 50.64           N
ATOM   4925  CA  PHE C 194      27.303   9.833 -54.708  1.00 47.97           C
ATOM   4926  C   PHE C 194      27.208   8.883 -55.885  1.00 44.30           C
ATOM   4927  O   PHE C 194      26.672   9.212 -56.944  1.00 43.31           O
ATOM   4928  CB  PHE C 194      26.100   9.617 -53.786  1.00 47.31           C
ATOM   4929  CG  PHE C 194      26.136  10.457 -52.566  1.00 50.92           C
ATOM   4930  CD2 PHE C 194      24.957  10.895 -51.997  1.00 50.39           C
ATOM   4931  CD1 PHE C 194      27.333  10.838 -51.993  1.00 53.98           C
ATOM   4932  CE2 PHE C 194      24.954  11.705 -50.857  1.00 53.19           C
ATOM   4933  CE1 PHE C 194      27.351  11.640 -50.846  1.00 56.60           C
ATOM   4934  CZ  PHE C 194      26.154  12.073 -50.275  1.00 55.37           C
ATOM   4935  N   THR C 195      27.767   7.709 -55.679  1.00 41.20           N
ATOM   4936  CA  THR C 195      27.735   6.591 -56.597  1.00 43.82           C
ATOM   4937  C   THR C 195      27.485   5.280 -55.880  1.00 42.64           C
ATOM   4938  O   THR C 195      28.253   4.881 -55.002  1.00 45.20           O
ATOM   4939  CB  THR C 195      28.992   6.555 -57.478  1.00 44.75           C
ATOM   4940  CG2 THR C 195      29.044   5.296 -58.481  1.00 43.37           C
ATOM   4941  OG1 THR C 195      29.325   7.899 -57.931  1.00 44.39           O
```

[1919]

```
ATOM   4942  N   ILE C 196      26.396   4.610 -56.312  1.00 36.99           N
ATOM   4943  CA  ILE C 196      26.034   3.281 -55.852  1.00 35.73           C
ATOM   4944  C   ILE C 196      26.771   2.271 -56.708  1.00 34.94           C
ATOM   4945  O   ILE C 196      26.967   2.461 -57.912  1.00 36.93           O
ATOM   4946  CB  ILE C 196      24.504   3.078 -55.930  1.00 34.09           C
ATOM   4947  CG1 ILE C 196      24.079   1.838 -55.128  1.00 33.44           C
ATOM   4948  CG2 ILE C 196      24.018   2.928 -57.404  1.00 27.77           C
ATOM   4949  CD1 ILE C 196      22.567   1.707 -54.942  1.00 29.70           C
ATOM   4950  N   SER C 197      27.192   1.192 -56.081  1.00 35.78           N
ATOM   4951  CA  SER C 197      27.914   0.166 -56.796  1.00 32.71           C
ATOM   4952  C   SER C 197      27.708  -1.155 -56.092  1.00 35.61           C
ATOM   4953  O   SER C 197      27.277  -1.233 -54.934  1.00 37.32           O
ATOM   4954  CB  SER C 197      29.384   0.534 -56.890  1.00 37.64           C
ATOM   4955  OG  SER C 197      29.915   0.693 -55.587  1.00 34.55           O
ATOM   4956  N   ARG C 198      28.122  -2.190 -56.783  1.00 35.51           N
ATOM   4957  CA  ARG C 198      27.748  -3.513 -56.360  1.00 33.81           C
ATOM   4958  C   ARG C 198      28.767  -4.534 -56.824  1.00 35.62           C
ATOM   4959  O   ARG C 198      29.311  -4.405 -57.921  1.00 36.73           O
ATOM   4960  CB  ARG C 198      26.363  -3.768 -56.945  1.00 36.67           C
ATOM   4961  CG  ARG C 198      25.988  -5.174 -57.234  1.00 33.96           C
ATOM   4962  CD  ARG C 198      24.581  -5.200 -57.891  1.00 32.15           C
ATOM   4963  NE  ARG C 198      23.906  -6.360 -57.366  1.00 33.00           N
ATOM   4964  CZ  ARG C 198      22.670  -6.342 -56.888  1.00 30.38           C
ATOM   4965  NH1 ARG C 198      21.886  -5.264 -56.880  1.00 28.14           N
ATOM   4966  NH2 ARG C 198      22.188  -7.461 -56.368  1.00 28.11           N
ATOM   4967  N   ASP C 199      29.005  -5.553 -55.998  1.00 39.58           N
ATOM   4968  CA  ASP C 199      29.917  -6.656 -56.314  1.00 34.71           C
ATOM   4969  C   ASP C 199      29.195  -7.986 -56.096  1.00 36.43           C
ATOM   4970  O   ASP C 199      29.155  -8.482 -54.968  1.00 41.83           O
ATOM   4971  CB  ASP C 199      31.165  -6.546 -55.446  1.00 40.08           C
ATOM   4972  CG  ASP C 199      32.237  -7.591 -55.789  1.00 46.35           C
ATOM   4973  OD2 ASP C 199      33.438  -7.226 -55.686  1.00 49.00           O
ATOM   4974  OD1 ASP C 199      31.908  -8.745 -56.159  1.00 42.87           O
ATOM   4975  N   ASN C 200      28.642  -8.588 -57.152  1.00 33.90           N
ATOM   4976  CA  ASN C 200      27.810  -9.776 -56.952  1.00 38.03           C
ATOM   4977  C   ASN C 200      28.596 -11.018 -56.581  1.00 39.94           C
ATOM   4978  O   ASN C 200      27.980 -12.036 -56.236  1.00 41.75           O
ATOM   4979  CB  ASN C 200      26.966 -10.082 -58.180  1.00 34.60           C
ATOM   4980  CG  ASN C 200      25.878  -9.076 -58.372  1.00 33.87           C
ATOM   4981  ND2 ASN C 200      25.154  -9.192 -59.481  1.00 36.82           N
ATOM   4982  OD1 ASN C 200      25.655  -8.219 -57.512  1.00 31.01           O
ATOM   4983  N   SER C 201      29.918 -10.994 -56.755  1.00 42.62           N
ATOM   4984  CA  SER C 201      30.759 -12.105 -56.316  1.00 41.58           C
ATOM   4985  C   SER C 201      30.918 -12.109 -54.802  1.00 38.81           C
ATOM   4986  O   SER C 201      30.897 -13.169 -54.165  1.00 40.78           O
ATOM   4987  CB  SER C 201      32.115 -11.987 -56.993  1.00 41.85           C
ATOM   4988  OG  SER C 201      32.695 -10.742 -56.621  1.00 43.42           O
ATOM   4989  N   LYS C 202      31.050 -10.930 -54.208  1.00 40.72           N
ATOM   4990  CA  LYS C 202      31.160 -10.797 -52.767  1.00 41.54           C
ATOM   4991  C   LYS C 202      29.803 -10.567 -52.106  1.00 43.60           C
ATOM   4992  O   LYS C 202      29.758 -10.332 -50.884  1.00 39.80           O
ATOM   4993  CB  LYS C 202      32.123  -9.650 -52.418  1.00 39.28           C
ATOM   4994  N   ASN C 203      28.705 -10.614 -52.889  1.00 40.41           N
ATOM   4995  CA  ASN C 203      27.349 -10.382 -52.381  1.00 36.82           C
ATOM   4996  C   ASN C 203      27.304  -9.130 -51.517  1.00 37.13           C
ATOM   4997  O   ASN C 203      26.832  -9.144 -50.376  1.00 38.38           O
ATOM   4998  CB  ASN C 203      26.802 -11.593 -51.617  1.00 34.85           C
ATOM   4999  CG  ASN C 203      26.388 -12.728 -52.525  1.00 33.85           C
ATOM   5000  ND2 ASN C 203      25.928 -13.812 -51.917  1.00 41.49           N
ATOM   5001  OD1 ASN C 203      26.446 -12.634 -53.752  1.00 36.49           O
ATOM   5002  N   THR C 204      27.852  -8.043 -52.052  1.00 37.13           N
ATOM   5003  CA  THR C 204      27.984  -6.826 -51.274  1.00 34.55           C
ATOM   5004  C   THR C 204      27.531  -5.621 -52.078  1.00 37.49           C
ATOM   5005  O   THR C 204      27.780  -5.524 -53.282  1.00 40.05           O
ATOM   5006  CB  THR C 204      29.415  -6.648 -50.801  1.00 36.61           C
ATOM   5007  CG2 THR C 204      29.518  -5.472 -49.867  1.00 35.35           C
ATOM   5008  OG1 THR C 204      29.796  -7.825 -50.081  1.00 40.26           O
ATOM   5009  N   LEU C 205      26.828  -4.730 -51.409  1.00 35.86           N
```

[1920]

```
ATOM   5010  CA  LEU C 205      26.417  -3.461 -51.968  1.00 36.01           C
ATOM   5011  C   LEU C 205      27.295  -2.372 -51.372  1.00 38.26           C
ATOM   5012  O   LEU C 205      27.667  -2.441 -50.192  1.00 36.86           O
ATOM   5013  CB  LEU C 205      24.943  -3.188 -51.660  1.00 35.43           C
ATOM   5014  CG  LEU C 205      24.406  -1.818 -52.070  1.00 34.98           C
ATOM   5015  CD1 LEU C 205      24.258  -1.771 -53.583  1.00 30.37           C
ATOM   5016  CD2 LEU C 205      23.098  -1.537 -51.343  1.00 32.21           C
ATOM   5017  N   TYR C 206      27.627  -1.371 -52.190  1.00 35.16           N
ATOM   5018  CA  TYR C 206      28.450  -0.261 -51.748  1.00 34.89           C
ATOM   5019  C   TYR C 206      27.763   1.057 -52.044  1.00 37.44           C
ATOM   5020  O   TYR C 206      27.045   1.193 -53.036  1.00 41.04           O
ATOM   5021  CB  TYR C 206      29.791  -0.271 -52.431  1.00 34.23           C
ATOM   5022  CG  TYR C 206      30.561  -1.541 -52.226  1.00 34.87           C
ATOM   5023  CD1 TYR C 206      31.228  -1.780 -51.035  1.00 37.16           C
ATOM   5024  CD2 TYR C 206      30.645  -2.492 -53.231  1.00 36.22           C
ATOM   5025  CE1 TYR C 206      31.947  -2.940 -50.848  1.00 38.75           C
ATOM   5026  CE2 TYR C 206      31.362  -3.650 -53.055  1.00 37.32           C
ATOM   5027  CZ  TYR C 206      32.012  -3.865 -51.861  1.00 39.19           C
ATOM   5028  OH  TYR C 206      32.730  -5.020 -51.679  1.00 44.84           O
ATOM   5029  N   LEU C 207      28.010   2.038 -51.184  1.00 36.93           N
ATOM   5030  CA  LEU C 207      27.654   3.424 -51.453  1.00 39.86           C
ATOM   5031  C   LEU C 207      28.880   4.285 -51.196  1.00 47.05           C
ATOM   5032  O   LEU C 207      29.297   4.450 -50.042  1.00 45.42           O
ATOM   5033  CB  LEU C 207      26.481   3.899 -50.596  1.00 37.21           C
ATOM   5034  CG  LEU C 207      26.065   5.325 -50.958  1.00 36.54           C
ATOM   5035  CD1 LEU C 207      25.530   5.358 -52.368  1.00 37.18           C
ATOM   5036  CD2 LEU C 207      25.033   5.894 -49.997  1.00 33.68           C
ATOM   5037  N   GLN C 208      29.465   4.819 -52.266  1.00 49.05           N
ATOM   5038  CA  GLN C 208      30.569   5.755 -52.132  1.00 47.28           C
ATOM   5039  C   GLN C 208      30.029   7.175 -52.083  1.00 47.82           C
ATOM   5040  O   GLN C 208      29.352   7.622 -53.017  1.00 48.19           O
ATOM   5041  CB  GLN C 208      31.584   5.607 -53.259  1.00 48.77           C
ATOM   5042  CG  GLN C 208      32.554   6.771 -53.257  1.00 51.73           C
ATOM   5043  CD  GLN C 208      33.374   6.833 -51.976  1.00 52.86           C
ATOM   5044  NE2 GLN C 208      33.478   8.039 -51.391  1.00 51.52           N
ATOM   5045  OE1 GLN C 208      33.903   5.818 -51.514  1.00 50.93           O
ATOM   5046  N   MET C 209      30.319   7.868 -50.980  1.00 50.99           N
ATOM   5047  CA  MET C 209      29.867   9.234 -50.723  1.00 54.74           C
ATOM   5048  C   MET C 209      31.054  10.194 -50.709  1.00 58.23           C
ATOM   5049  O   MET C 209      32.097   9.876 -50.124  1.00 58.62           O
ATOM   5050  CB  MET C 209      29.084   9.348 -49.405  1.00 54.88           C
ATOM   5051  CG  MET C 209      27.859   8.440 -49.318  1.00 54.42           C
ATOM   5052  SD  MET C 209      26.765   8.770 -47.900  1.00 51.27           S
ATOM   5053  CE  MET C 209      27.777   8.297 -46.540  1.00 49.50           C
ATOM   5054  N   ASN C 210      30.853  11.404 -51.255  1.00 55.42           N
ATOM   5055  CA  ASN C 210      31.923  12.442 -51.320  1.00 56.07           C
ATOM   5056  C   ASN C 210      31.329  13.819 -51.003  1.00 59.58           C
ATOM   5057  O   ASN C 210      30.112  13.877 -50.854  1.00 58.96           O
ATOM   5058  CB  ASN C 210      32.580  12.518 -52.701  1.00 50.95           C
ATOM   5059  CG  ASN C 210      33.018  11.183 -53.262  1.00 49.62           C
ATOM   5060  ND2 ASN C 210      32.422  10.777 -54.371  1.00 49.92           N
ATOM   5061  OD1 ASN C 210      33.899  10.530 -52.711  1.00 49.53           O
ATOM   5062  N   SER C 211      32.159  14.853 -50.782  1.00 57.27           N
ATOM   5063  CA  SER C 211      31.671  16.250 -50.603  1.00 54.19           C
ATOM   5064  C   SER C 211      30.519  16.319 -49.608  1.00 57.37           C
ATOM   5065  O   SER C 211      29.477  16.893 -49.954  1.00 58.95           O
ATOM   5066  CB  SER C 211      31.320  16.901 -51.916  1.00 52.41           C
ATOM   5067  OG  SER C 211      30.811  18.209 -51.726  1.00 52.22           O
ATOM   5068  N   LEU C 212      30.698  15.779 -48.411  1.00 54.32           N
ATOM   5069  CA  LEU C 212      29.544  15.706 -47.491  1.00 50.98           C
ATOM   5070  C   LEU C 212      29.344  16.935 -46.605  1.00 55.68           C
ATOM   5071  O   LEU C 212      30.341  17.568 -46.255  1.00 62.61           O
ATOM   5072  CB  LEU C 212      29.666  14.432 -46.654  1.00 57.09           C
ATOM   5073  CG  LEU C 212      29.612  13.121 -47.428  1.00 55.17           C
ATOM   5074  CD1 LEU C 212      30.542  12.095 -46.804  1.00 52.66           C
ATOM   5075  CD2 LEU C 212      28.191  12.594 -47.467  1.00 53.50           C
ATOM   5076  N   ARG C 213      28.094  17.261 -46.297  1.00 58.00           N
ATOM   5077  CA  ARG C 213      27.685  18.301 -45.360  1.00 56.46           C
```

[1921]

```
ATOM   5078  C   ARG C 213      26.402  17.962 -44.619  1.00 56.06           C
ATOM   5079  O   ARG C 213      25.534  17.280 -45.156  1.00 57.89           O
ATOM   5080  CB  ARG C 213      27.404  19.555 -46.118  1.00 55.03           C
ATOM   5081  CG  ARG C 213      28.534  20.220 -46.854  1.00 61.33           C
ATOM   5082  CD  ARG C 213      28.399  21.669 -46.437  1.00 53.28           C
ATOM   5083  NE  ARG C 213      29.410  22.537 -46.936  1.00 53.54           N
ATOM   5084  CZ  ARG C 213      29.244  23.839 -46.798  1.00 56.42           C
ATOM   5085  NH1 ARG C 213      28.150  24.362 -46.262  1.00 58.52           N
ATOM   5086  NH2 ARG C 213      30.144  24.661 -47.351  1.00 44.57           N
ATOM   5087  N   ALA C 214      26.179  18.694 -43.526  1.00 53.08           N
ATOM   5088  CA  ALA C 214      25.077  18.510 -42.581  1.00 56.65           C
ATOM   5089  C   ALA C 214      23.788  17.945 -43.199  1.00 58.04           C
ATOM   5090  O   ALA C 214      23.203  16.977 -42.675  1.00 57.98           O
ATOM   5091  CB  ALA C 214      24.785  19.855 -41.904  1.00 55.52           C
ATOM   5092  N   GLU C 215      23.349  18.487 -44.337  1.00 55.68           N
ATOM   5093  CA  GLU C 215      22.158  17.944 -44.988  1.00 54.42           C
ATOM   5094  C   GLU C 215      22.369  16.500 -45.444  1.00 52.86           C
ATOM   5095  O   GLU C 215      21.442  15.864 -45.955  1.00 53.67           O
ATOM   5096  CB  GLU C 215      21.735  18.828 -46.160  1.00 52.18           C
ATOM   5097  CG  GLU C 215      21.269  20.212 -45.742  1.00 52.64           C
ATOM   5098  CD  GLU C 215      22.307  21.286 -46.015  1.00 58.29           C
ATOM   5099  OE1 GLU C 215      21.993  22.225 -46.782  1.00 61.51           O
ATOM   5100  OE2 GLU C 215      23.430  21.195 -45.471  1.00 58.60           O
ATOM   5101  N   ASP C 216      23.578  15.971 -45.250  1.00 51.57           N
ATOM   5102  CA  ASP C 216      23.871  14.564 -45.472  1.00 49.12           C
ATOM   5103  C   ASP C 216      23.973  13.767 -44.174  1.00 50.65           C
ATOM   5104  O   ASP C 216      24.097  12.537 -44.227  1.00 47.62           O
ATOM   5105  CB  ASP C 216      25.172  14.421 -46.274  1.00 49.98           C
ATOM   5106  CG  ASP C 216      25.095  15.108 -47.633  1.00 53.09           C
ATOM   5107  OD1 ASP C 216      24.660  14.451 -48.600  1.00 53.22           O
ATOM   5108  OD2 ASP C 216      25.465  16.299 -47.745  1.00 54.86           O
ATOM   5109  N   THR C 217      23.958  14.435 -43.023  1.00 49.81           N
ATOM   5110  CA  THR C 217      23.898  13.741 -41.746  1.00 47.46           C
ATOM   5111  C   THR C 217      22.579  13.000 -41.650  1.00 44.79           C
ATOM   5112  O   THR C 217      21.508  13.613 -41.745  1.00 46.93           O
ATOM   5113  CB  THR C 217      24.005  14.740 -40.603  1.00 51.45           C
ATOM   5114  CG2 THR C 217      25.381  15.290 -40.520  1.00 51.11           C
ATOM   5115  OG1 THR C 217      23.086  15.815 -40.847  1.00 54.07           O
ATOM   5116  N   ALA C 218      22.650  11.684 -41.479  1.00 40.76           N
ATOM   5117  CA  ALA C 218      21.436  10.884 -41.441  1.00 37.50           C
ATOM   5118  C   ALA C 218      21.809   9.474 -41.048  1.00 38.39           C
ATOM   5119  O   ALA C 218      22.986   9.088 -41.086  1.00 39.85           O
ATOM   5120  CB  ALA C 218      20.707  10.866 -42.790  1.00 38.92           C
ATOM   5121  N   VAL C 219      20.793   8.710 -40.664  1.00 35.97           N
ATOM   5122  CA  VAL C 219      20.928   7.264 -40.613  1.00 33.43           C
ATOM   5123  C   VAL C 219      20.741   6.740 -42.031  1.00 35.21           C
ATOM   5124  O   VAL C 219      19.777   7.106 -42.714  1.00 31.35           O
ATOM   5125  CB  VAL C 219      19.908   6.655 -39.646  1.00 30.21           C
ATOM   5126  CG1 VAL C 219      20.025   5.159 -39.651  1.00 30.00           C
ATOM   5127  CG2 VAL C 219      20.123   7.197 -38.280  1.00 29.28           C
ATOM   5128  N   TYR C 220      21.670   5.901 -42.484  1.00 35.92           N
ATOM   5129  CA  TYR C 220      21.663   5.366 -43.840  1.00 33.87           C
ATOM   5130  C   TYR C 220      21.280   3.897 -43.813  1.00 31.39           C
ATOM   5131  O   TYR C 220      21.862   3.109 -43.054  1.00 31.80           O
ATOM   5132  CB  TYR C 220      23.023   5.562 -44.513  1.00 36.10           C
ATOM   5133  CG  TYR C 220      23.185   6.980 -44.998  1.00 38.43           C
ATOM   5134  CD1 TYR C 220      23.486   8.008 -44.110  1.00 37.57           C
ATOM   5135  CD2 TYR C 220      22.984   7.302 -46.331  1.00 39.35           C
ATOM   5136  CE1 TYR C 220      23.609   9.309 -44.547  1.00 40.63           C
ATOM   5137  CE2 TYR C 220      23.103   8.605 -46.779  1.00 40.92           C
ATOM   5138  CZ  TYR C 220      23.418   9.606 -45.890  1.00 43.87           C
ATOM   5139  OH  TYR C 220      23.540  10.907 -46.348  1.00 43.34           O
ATOM   5140  N   TYR C 221      20.262   3.547 -44.590  1.00 28.53           N
ATOM   5141  CA  TYR C 221      19.788   2.177 -44.670  1.00 30.05           C
ATOM   5142  C   TYR C 221      20.086   1.611 -46.044  1.00 26.86           C
ATOM   5143  O   TYR C 221      19.884   2.286 -47.051  1.00 31.32           O
ATOM   5144  CB  TYR C 221      18.280   2.114 -44.416  1.00 26.83           C
ATOM   5145  CG  TYR C 221      17.857   2.652 -43.080  1.00 26.41           C
```

[1922]

```
ATOM   5146  CD1 TYR C 221      17.875   1.847 -41.943  1.00 26.06           C
ATOM   5147  CD2 TYR C 221      17.419   3.966 -42.949  1.00 29.73           C
ATOM   5148  CE1 TYR C 221      17.474   2.328 -40.723  1.00 26.01           C
ATOM   5149  CE2 TYR C 221      17.012   4.466 -41.708  1.00 32.54           C
ATOM   5150  CZ  TYR C 221      17.045   3.635 -40.595  1.00 29.68           C
ATOM   5151  OH  TYR C 221      16.650   4.122 -39.359  1.00 28.69           O
ATOM   5152  N   CYS C 222      20.523   0.366 -46.094  1.00 28.57           N
ATOM   5153  CA  CYS C 222      20.446  -0.385 -47.333  1.00 30.04           C
ATOM   5154  C   CYS C 222      19.182  -1.227 -47.285  1.00 28.34           C
ATOM   5155  O   CYS C 222      18.703  -1.574 -46.205  1.00 25.02           O
ATOM   5156  CB  CYS C 222      21.687  -1.257 -47.551  1.00 30.51           C
ATOM   5157  SG  CYS C 222      22.122  -2.435 -46.263  1.00 39.59           S
ATOM   5158  N   ALA C 223      18.607  -1.496 -48.458  1.00 28.52           N
ATOM   5159  CA  ALA C 223      17.348  -2.225 -48.542  1.00 23.75           C
ATOM   5160  C   ALA C 223      17.270  -2.996 -49.846  1.00 24.19           C
ATOM   5161  O   ALA C 223      17.753  -2.535 -50.886  1.00 26.08           O
ATOM   5162  CB  ALA C 223      16.152  -1.273 -48.417  1.00 22.35           C
ATOM   5163  N   LYS C 224      16.646  -4.170 -49.773  1.00 22.63           N
ATOM   5164  CA  LYS C 224      16.467  -5.094 -50.878  1.00 25.19           C
ATOM   5165  C   LYS C 224      15.061  -4.948 -51.469  1.00 24.58           C
ATOM   5166  O   LYS C 224      14.067  -4.945 -50.731  1.00 24.29           O
ATOM   5167  CB  LYS C 224      16.711  -6.515 -50.363  1.00 24.52           C
ATOM   5168  CG  LYS C 224      16.029  -7.642 -51.094  1.00 25.71           C
ATOM   5169  CD  LYS C 224      16.068  -8.895 -50.225  1.00 24.80           C
ATOM   5170  CE  LYS C 224      15.432 -10.059 -50.944  1.00 26.28           C
ATOM   5171  NZ  LYS C 224      14.036  -9.703 -51.321  1.00 30.50           N
ATOM   5172  N   TYR C 225      14.978  -4.809 -52.788  1.00 23.08           N
ATOM   5173  CA  TYR C 225      13.685  -4.808 -53.472  1.00 22.57           C
ATOM   5174  C   TYR C 225      13.098  -6.213 -53.509  1.00 23.81           C
ATOM   5175  O   TYR C 225      13.779  -7.211 -53.267  1.00 23.73           O
ATOM   5176  CB  TYR C 225      13.807  -4.252 -54.906  1.00 21.98           C
ATOM   5177  CG  TYR C 225      13.950  -2.741 -54.940  1.00 24.29           C
ATOM   5178  CD2 TYR C 225      15.200  -2.127 -55.054  1.00 24.88           C
ATOM   5179  CD1 TYR C 225      12.833  -1.931 -54.823  1.00 23.10           C
ATOM   5180  CE2 TYR C 225      15.317  -0.753 -55.068  1.00 24.28           C
ATOM   5181  CE1 TYR C 225      12.938  -0.571 -54.820  1.00 23.74           C
ATOM   5182  CZ  TYR C 225      14.174   0.024 -54.950  1.00 25.56           C
ATOM   5183  OH  TYR C 225      14.238   1.400 -54.959  1.00 29.56           O
ATOM   5184  N   ASP C 226      11.801  -6.281 -53.800  1.00 24.30           N
ATOM   5185  CA  ASP C 226      11.141  -7.565 -53.956  1.00 24.22           C
ATOM   5186  C   ASP C 226      10.000  -7.404 -54.950  1.00 21.30           C
ATOM   5187  O   ASP C 226       9.372  -6.351 -55.003  1.00 22.71           O
ATOM   5188  CB  ASP C 226      10.624  -8.083 -52.604  1.00 24.55           C
ATOM   5189  CG  ASP C 226      10.128  -9.530 -52.672  1.00 30.02           C
ATOM   5190  OD1 ASP C 226      10.894 -10.409 -53.148  1.00 27.29           O
ATOM   5191  OD2 ASP C 226       8.970  -9.789 -52.252  1.00 30.58           O
ATOM   5192  N   GLY C 227       9.749  -8.449 -55.743  1.00 20.86           N
ATOM   5193  CA  GLY C 227       8.621  -8.455 -56.671  1.00 20.60           C
ATOM   5194  C   GLY C 227       8.798  -7.541 -57.869  1.00 23.79           C
ATOM   5195  O   GLY C 227       9.887  -7.443 -58.464  1.00 24.60           O
ATOM   5196  N   ILE C 228       7.711  -6.862 -58.259  1.00 22.89           N
ATOM   5197  CA  ILE C 228       7.718  -6.013 -59.441  1.00 21.86           C
ATOM   5198  C   ILE C 228       7.229  -4.603 -59.182  1.00 25.83           C
ATOM   5199  O   ILE C 228       7.225  -3.803 -60.112  1.00 24.33           O
ATOM   5200  CB  ILE C 228       6.905  -6.619 -60.605  1.00 24.07           C
ATOM   5201  CG1 ILE C 228       5.448  -6.735 -60.199  1.00 23.55           C
ATOM   5202  CG2 ILE C 228       7.478  -7.953 -61.054  1.00 22.86           C
ATOM   5203  CD1 ILE C 228       4.590  -7.470 -61.188  1.00 28.17           C
ATOM   5204  N   TYR C 229       6.760  -4.274 -57.977  1.00 25.14           N
ATOM   5205  CA  TYR C 229       6.193  -2.953 -57.721  1.00 22.85           C
ATOM   5206  C   TYR C 229       7.135  -2.020 -56.975  1.00 23.25           C
ATOM   5207  O   TYR C 229       6.697  -0.977 -56.493  1.00 19.92           O
ATOM   5208  CB  TYR C 229       4.863  -3.075 -56.974  1.00 26.20           C
ATOM   5209  CG  TYR C 229       3.769  -3.529 -57.909  1.00 26.23           C
ATOM   5210  CD1 TYR C 229       3.135  -2.626 -58.744  1.00 23.78           C
ATOM   5211  CD2 TYR C 229       3.397  -4.861 -57.977  1.00 49.87           C
ATOM   5212  CE1 TYR C 229       2.151  -3.044 -59.634  1.00 28.85           C
ATOM   5213  CE2 TYR C 229       2.415  -5.284 -58.843  1.00 34.14           C
```

[1923]

```
ATOM   5214  CZ  TYR C 229       1.794  -4.372 -59.673  1.00 28.45           C
ATOM   5215  OH  TYR C 229       0.813  -4.766 -60.552  1.00 29.41           O
ATOM   5216  N   GLY C 230       8.421  -2.350 -56.893  1.00 24.33           N
ATOM   5217  CA  GLY C 230       9.380  -1.451 -56.292  1.00 21.29           C
ATOM   5218  C   GLY C 230       9.326  -1.439 -54.788  1.00 23.49           C
ATOM   5219  O   GLY C 230       9.780  -0.467 -54.183  1.00 26.10           O
ATOM   5220  N   GLU C 231       8.750  -2.472 -54.159  1.00 22.30           N
ATOM   5221  CA  GLU C 231       8.685  -2.538 -52.704  1.00 21.71           C
ATOM   5222  C   GLU C 231      10.004  -3.042 -52.120  1.00 21.28           C
ATOM   5223  O   GLU C 231      10.652  -3.927 -52.681  1.00 20.79           O
ATOM   5224  CB  GLU C 231       7.519  -3.410 -52.240  1.00 18.12           C
ATOM   5225  CG  GLU C 231       7.628  -4.910 -52.534  1.00 21.28           C
ATOM   5226  CD  GLU C 231       7.032  -5.339 -53.885  1.00 23.01           C
ATOM   5227  OE1 GLU C 231       7.108  -4.590 -54.883  1.00 22.60           O
ATOM   5228  OE2 GLU C 231       6.478  -6.451 -53.963  1.00 23.74           O
ATOM   5229  N   LEU C 232      10.391  -2.475 -50.986  1.00 24.25           N
ATOM   5230  CA  LEU C 232      11.615  -2.837 -50.275  1.00 23.41           C
ATOM   5231  C   LEU C 232      11.259  -3.659 -49.045  1.00 22.22           C
ATOM   5232  O   LEU C 232      10.951  -3.102 -47.992  1.00 22.22           O
ATOM   5233  CB  LEU C 232      12.376  -1.579 -49.879  1.00 22.65           C
ATOM   5234  CG  LEU C 232      12.906  -0.705 -51.000  1.00 23.04           C
ATOM   5235  CD1 LEU C 232      13.314   0.664 -50.489  1.00 22.69           C
ATOM   5236  CD2 LEU C 232      14.094  -1.431 -51.549  1.00 24.51           C
ATOM   5237  N   ASP C 233      11.398  -4.978 -49.150  1.00 25.17           N
ATOM   5238  CA  ASP C 233      10.876  -5.856 -48.122  1.00 24.47           C
ATOM   5239  C   ASP C 233      11.876  -6.200 -47.032  1.00 24.02           C
ATOM   5240  O   ASP C 233      11.464  -6.710 -45.992  1.00 28.18           O
ATOM   5241  CB  ASP C 233      10.325  -7.148 -48.756  1.00 28.13           C
ATOM   5242  CG  ASP C 233      11.402  -8.040 -49.318  1.00 25.47           C
ATOM   5243  OD1 ASP C 233      12.512  -7.559 -49.579  1.00 28.60           O
ATOM   5244  OD2 ASP C 233      11.135  -9.231 -49.524  1.00 28.42           O
ATOM   5245  N   PHE C 234      13.159  -5.925 -47.199  1.00 24.66           N
ATOM   5246  CA  PHE C 234      14.081  -6.187 -46.102  1.00 25.09           C
ATOM   5247  C   PHE C 234      15.128  -5.086 -46.061  1.00 24.92           C
ATOM   5248  O   PHE C 234      15.637  -4.655 -47.099  1.00 22.30           O
ATOM   5249  CB  PHE C 234      14.754  -7.576 -46.201  1.00 27.94           C
ATOM   5250  CG  PHE C 234      15.448  -7.996 -44.923  1.00 30.48           C
ATOM   5251  CD1 PHE C 234      16.745  -7.584 -44.649  1.00 32.55           C
ATOM   5252  CD2 PHE C 234      14.793  -8.776 -43.977  1.00 34.16           C
ATOM   5253  CE1 PHE C 234      17.390  -7.950 -43.448  1.00 35.73           C
ATOM   5254  CE2 PHE C 234      15.434  -9.156 -42.760  1.00 36.96           C
ATOM   5255  CZ  PHE C 234      16.729  -8.733 -42.494  1.00 33.80           C
ATOM   5256  N   TRP C 235      15.438  -4.645 -44.848  1.00 25.23           N
ATOM   5257  CA  TRP C 235      16.266  -3.480 -44.591  1.00 25.42           C
ATOM   5258  C   TRP C 235      17.420  -3.830 -43.663  1.00 28.58           C
ATOM   5259  O   TRP C 235      17.287  -4.688 -42.780  1.00 27.32           O
ATOM   5260  CB  TRP C 235      15.452  -2.369 -43.937  1.00 23.28           C
ATOM   5261  CG  TRP C 235      14.345  -1.827 -44.783  1.00 22.90           C
ATOM   5262  CD1 TRP C 235      13.257  -2.495 -45.223  1.00 22.12           C
ATOM   5263  CD2 TRP C 235      14.242  -0.488 -45.300  1.00 24.23           C
ATOM   5264  CE2 TRP C 235      13.059  -0.417 -46.035  1.00 20.04           C
ATOM   5265  CE3 TRP C 235      15.036   0.665 -45.186  1.00 24.47           C
ATOM   5266  NE1 TRP C 235      12.474  -1.657 -45.988  1.00 22.87           N
ATOM   5267  CZ2 TRP C 235      12.651   0.745 -46.670  1.00 23.24           C
ATOM   5268  CZ3 TRP C 235      14.621   1.831 -45.810  1.00 24.45           C
ATOM   5269  CH2 TRP C 235      13.443   1.863 -46.542  1.00 25.70           C
ATOM   5270  N   GLY C 236      18.560  -3.161 -43.877  1.00 27.69           N
ATOM   5271  CA  GLY C 236      19.598  -3.117 -42.868  1.00 26.44           C
ATOM   5272  C   GLY C 236      19.155  -2.306 -41.667  1.00 25.23           C
ATOM   5273  O   GLY C 236      18.195  -1.539 -41.716  1.00 24.21           O
ATOM   5274  N   CYS C 237      19.906  -2.431 -40.568  1.00 27.05           N
ATOM   5275  CA  CYS C 237      19.508  -1.769 -39.324  1.00 29.07           C
ATOM   5276  C   CYS C 237      19.848  -0.283 -39.276  1.00 26.85           C
ATOM   5277  O   CYS C 237      19.357   0.421 -38.379  1.00 27.94           O
ATOM   5278  CB  CYS C 237      20.132  -2.485 -38.126  1.00 29.50           C
ATOM   5279  SG  CYS C 237      19.514  -4.181 -37.899  1.00 30.40           S
ATOM   5280  N   GLY C 238      20.625   0.214 -40.223  1.00 31.17           N
ATOM   5281  CA  GLY C 238      20.997   1.609 -40.342  1.00 28.38           C
```

[1924]

```
ATOM   5282  C   GLY C 238      22.382   1.876 -39.784  1.00 36.38           C
ATOM   5283  O   GLY C 238      22.826   1.258 -38.809  1.00 37.03           O
ATOM   5284  N   THR C 239      23.074   2.833 -40.384  1.00 37.27           N
ATOM   5285  CA  THR C 239      24.360   3.250 -39.842  1.00 39.79           C
ATOM   5286  C   THR C 239      24.448   4.768 -39.917  1.00 36.54           C
ATOM   5287  O   THR C 239      24.067   5.385 -40.921  1.00 37.13           O
ATOM   5288  CB  THR C 239      25.523   2.561 -40.588  1.00 38.65           C
ATOM   5289  CG2 THR C 239      25.578   2.994 -42.020  1.00 36.61           C
ATOM   5290  OG1 THR C 239      26.761   2.893 -39.960  1.00 41.73           O
ATOM   5291  N   LEU C 240      24.895   5.374 -38.829  1.00 38.70           N
ATOM   5292  CA  LEU C 240      24.831   6.819 -38.704  1.00 37.95           C
ATOM   5293  C   LEU C 240      26.129   7.437 -39.203  1.00 42.39           C
ATOM   5294  O   LEU C 240      27.217   7.024 -38.788  1.00 45.51           O
ATOM   5295  CB  LEU C 240      24.568   7.197 -37.252  1.00 38.42           C
ATOM   5296  CG  LEU C 240      24.508   8.692 -36.971  1.00 40.28           C
ATOM   5297  CD1 LEU C 240      23.389   9.344 -37.773  1.00 37.15           C
ATOM   5298  CD2 LEU C 240      24.328   8.904 -35.488  1.00 35.78           C
ATOM   5299  N   VAL C 241      26.019   8.386 -40.130  1.00 41.40           N
ATOM   5300  CA  VAL C 241      27.163   9.165 -40.600  1.00 43.20           C
ATOM   5301  C   VAL C 241      26.878  10.623 -40.266  1.00 44.61           C
ATOM   5302  O   VAL C 241      25.823  11.159 -40.642  1.00 43.63           O
ATOM   5303  CB  VAL C 241      27.468   8.938 -42.097  1.00 43.50           C
ATOM   5304  CG1 VAL C 241      27.431   7.434 -42.436  1.00 39.89           C
ATOM   5305  CG2 VAL C 241      26.578   9.747 -43.029  1.00 42.41           C
ATOM   5306  N   THR C 242      27.797  11.235 -39.517  1.00 53.79           N
ATOM   5307  CA  THR C 242      27.627  12.646 -39.090  1.00 55.33           C
ATOM   5308  C   THR C 242      28.668  13.531 -39.771  1.00 54.96           C
ATOM   5309  O   THR C 242      29.825  13.119 -39.839  1.00 54.32           O
ATOM   5310  CB  THR C 242      27.715  12.776 -37.564  1.00 50.64           C
ATOM   5311  CG2 THR C 242      26.993  13.995 -37.033  1.00 49.77           C
ATOM   5312  OG1 THR C 242      27.170  11.597 -36.973  1.00 50.88           O
ATOM   5313  N   VAL C 243      28.240  14.660 -40.325  1.00 56.43           N
ATOM   5314  CA  VAL C 243      29.197  15.646 -40.897  1.00 61.49           C
ATOM   5315  C   VAL C 243      29.065  16.916 -40.057  1.00 62.83           C
ATOM   5316  O   VAL C 243      28.079  17.641 -40.246  1.00 63.53           O
ATOM   5317  CB  VAL C 243      28.920  15.935 -42.381  1.00 59.43           C
ATOM   5318  CG1 VAL C 243      30.198  16.294 -43.116  1.00 60.91           C
ATOM   5319  CG2 VAL C 243      28.210  14.777 -43.064  1.00 59.33           C
ATOM   5320  N   SER C 244      30.026  17.162 -39.167  1.00 65.06           N
ATOM   5321  CA  SER C 244      30.017  18.411 -38.366  1.00 65.26           C
ATOM   5322  C   SER C 244      31.437  18.957 -38.265  1.00 65.07           C
ATOM   5323  O   SER C 244      32.370  18.165 -38.438  1.00 60.79           O
ATOM   5324  CB  SER C 244      29.376  18.223 -37.025  1.00 60.42           C
ATOM   5325  OG  SER C 244      28.133  18.903 -36.973  1.00 62.57           O
ATOM   5326  N   SER C 245      31.579  20.256 -37.994  1.00 62.47           N
ATOM   5327  CA  SER C 245      32.921  20.892 -38.011  1.00 57.80           C
ATOM   5328  C   SER C 245      33.772  20.439 -36.825  1.00 58.00           C
ATOM   5329  O   SER C 245      34.987  20.304 -37.032  1.00 58.20           O
ATOM   5330  CB  SER C 245      32.815  22.401 -38.111  1.00 55.81           C
ATOM   5331  OG  SER C 245      32.542  22.803 -39.440  1.00 48.94           O
TER    5334       SER C 245
ATOM   5332  N   ASP D   1       7.419  29.656 -35.905  1.00 38.88           N
ATOM   5333  CA  ASP D   1       6.143  30.270 -36.259  1.00 38.30           C
ATOM   5334  C   ASP D   1       5.068  29.232 -36.609  1.00 37.14           C
ATOM   5335  O   ASP D   1       5.265  28.038 -36.400  1.00 39.98           O
ATOM   5336  CB  ASP D   1       6.345  31.268 -37.398  1.00 38.72           C
ATOM   5337  CG  ASP D   1       7.048  30.672 -38.582  1.00 38.94           C
ATOM   5338  OD1 ASP D   1       6.780  29.498 -38.925  1.00 45.77           O
ATOM   5339  OD2 ASP D   1       7.885  31.391 -39.174  1.00 37.62           O
ATOM   5340  N   ILE D   2       3.931  29.688 -37.125  1.00 31.36           N
ATOM   5341  CA  ILE D   2       2.837  28.799 -37.494  1.00 31.91           C
ATOM   5342  C   ILE D   2       3.010  28.411 -38.956  1.00 32.29           C
ATOM   5343  O   ILE D   2       3.198  29.273 -39.818  1.00 33.64           O
ATOM   5344  CB  ILE D   2       1.479  29.480 -37.240  1.00 29.99           C
ATOM   5345  CG1 ILE D   2       1.342  29.842 -35.754  1.00 32.65           C
ATOM   5346  CG2 ILE D   2       0.337  28.562 -37.614  1.00 26.37           C
ATOM   5347  CD1 ILE D   2       0.069  30.573 -35.402  1.00 26.83           C
ATOM   5348  N   GLN D   3       2.982  27.116 -39.245  1.00 31.48           N
```

[1925]

```
ATOM   5349  CA  GLN D   3       3.059  26.660 -40.621  1.00 31.75           C
ATOM   5350  C   GLN D   3       1.642  26.443 -41.138  1.00 31.06           C
ATOM   5351  O   GLN D   3       0.803  25.864 -40.437  1.00 29.24           O
ATOM   5352  CB  GLN D   3       3.903  25.384 -40.732  1.00 35.85           C
ATOM   5353  CG  GLN D   3       3.790  24.697 -42.113  1.00 42.21           C
ATOM   5354  CD  GLN D   3       4.662  23.447 -42.302  1.00 48.96           C
ATOM   5355  NE2 GLN D   3       5.013  22.790 -41.218  1.00 47.01           N
ATOM   5356  OE1 GLN D   3       5.002  23.076 -43.431  1.00 51.31           O
ATOM   5357  N   MET D   4       1.370  26.935 -42.350  1.00 30.19           N
ATOM   5358  CA  MET D   4       0.080  26.788 -43.019  1.00 26.44           C
ATOM   5359  C   MET D   4       0.294  25.920 -44.244  1.00 29.61           C
ATOM   5360  O   MET D   4       1.082  26.282 -45.121  1.00 29.63           O
ATOM   5361  CB  MET D   4      -0.474  28.138 -43.469  1.00 28.13           C
ATOM   5362  CG  MET D   4      -0.608  29.203 -42.422  1.00 26.75           C
ATOM   5363  SD  MET D   4      -1.664  28.689 -41.093  1.00 27.06           S
ATOM   5364  CE  MET D   4      -3.240  28.580 -41.936  1.00 27.35           C
ATOM   5365  N   THR D   5      -0.438  24.816 -44.344  1.00 29.02           N
ATOM   5366  CA  THR D   5      -0.269  23.902 -45.464  1.00 29.46           C
ATOM   5367  C   THR D   5      -1.614  23.701 -46.151  1.00 28.20           C
ATOM   5368  O   THR D   5      -2.576  23.260 -45.510  1.00 30.65           O
ATOM   5369  CB  THR D   5       0.348  22.582 -44.990  1.00 29.32           C
ATOM   5370  CG2 THR D   5       1.823  22.789 -44.599  1.00 30.47           C
ATOM   5371  OG1 THR D   5      -0.343  22.154 -43.827  1.00 34.24           O
ATOM   5372  N   GLN D   6      -1.669  24.019 -47.450  1.00 29.10           N
ATOM   5373  CA  GLN D   6      -2.858  23.910 -48.287  1.00 26.40           C
ATOM   5374  C   GLN D   6      -2.823  22.638 -49.103  1.00 28.38           C
ATOM   5375  O   GLN D   6      -1.760  22.164 -49.502  1.00 30.74           O
ATOM   5376  CB  GLN D   6      -2.978  25.065 -49.287  1.00 27.93           C
ATOM   5377  CG  GLN D   6      -2.984  26.396 -48.707  1.00 24.81           C
ATOM   5378  CD  GLN D   6      -3.036  27.484 -49.754  1.00 24.41           C
ATOM   5379  NE2 GLN D   6      -3.887  27.340 -50.774  1.00 22.72           N
ATOM   5380  OE1 GLN D   6      -2.350  28.479 -49.609  1.00 26.55           O
ATOM   5381  N   SER D   7      -4.003  22.123 -49.401  1.00 29.78           N
ATOM   5382  CA  SER D   7      -4.118  20.985 -50.291  1.00 30.57           C
ATOM   5383  C   SER D   7      -5.354  21.092 -51.182  1.00 32.40           C
ATOM   5384  O   SER D   7      -6.396  21.604 -50.764  1.00 31.93           O
ATOM   5385  CB  SER D   7      -4.168  19.696 -49.479  1.00 32.53           C
ATOM   5386  OG  SER D   7      -5.399  19.620 -48.775  1.00 39.31           O
ATOM   5387  N   PRO D   8      -5.221  20.672 -52.441  1.00 30.77           N
ATOM   5388  CA  PRO D   8      -3.971  20.219 -53.054  1.00 30.25           C
ATOM   5389  C   PRO D   8      -3.126  21.422 -53.485  1.00 32.44           C
ATOM   5390  O   PRO D   8      -3.558  22.560 -53.289  1.00 35.00           O
ATOM   5391  CB  PRO D   8      -4.458  19.428 -54.248  1.00 29.11           C
ATOM   5392  CG  PRO D   8      -5.721  20.159 -54.655  1.00 28.21           C
ATOM   5393  CD  PRO D   8      -6.345  20.646 -53.392  1.00 28.43           C
ATOM   5394  N   SER D   9      -1.929  21.192 -54.026  1.00 34.29           N
ATOM   5395  CA  SER D   9      -1.153  22.294 -54.582  1.00 28.28           C
ATOM   5396  C   SER D   9      -1.693  22.721 -55.932  1.00 28.88           C
ATOM   5397  O   SER D   9      -1.541  23.884 -56.324  1.00 28.30           O
ATOM   5398  CB  SER D   9       0.310  21.895 -54.729  1.00 28.53           C
ATOM   5399  OG  SER D   9       0.883  21.733 -53.453  1.00 36.80           O
ATOM   5400  N   SER D  10      -2.346  21.812 -56.647  1.00 29.11           N
ATOM   5401  CA  SER D  10      -2.916  22.156 -57.937  1.00 28.97           C
ATOM   5402  C   SER D  10      -4.143  21.292 -58.129  1.00 28.69           C
ATOM   5403  O   SER D  10      -4.227  20.182 -57.597  1.00 28.84           O
ATOM   5404  CB  SER D  10      -1.932  21.951 -59.099  1.00 32.29           C
ATOM   5405  OG  SER D  10      -1.808  20.577 -59.421  1.00 38.84           O
ATOM   5406  N   LEU D  11      -5.076  21.798 -58.917  1.00 26.99           N
ATOM   5407  CA  LEU D  11      -6.409  21.220 -58.982  1.00 29.18           C
ATOM   5408  C   LEU D  11      -6.943  21.447 -60.387  1.00 30.87           C
ATOM   5409  O   LEU D  11      -6.981  22.594 -60.845  1.00 31.56           O
ATOM   5410  CB  LEU D  11      -7.311  21.921 -57.960  1.00 29.05           C
ATOM   5411  CG  LEU D  11      -8.793  21.608 -57.788  1.00 26.13           C
ATOM   5412  CD1 LEU D  11      -9.121  21.885 -56.372  1.00 28.42           C
ATOM   5413  CD2 LEU D  11      -9.656  22.430 -58.699  1.00 28.14           C
ATOM   5414  N   SER D  12      -7.395  20.381 -61.051  1.00 28.47           N
ATOM   5415  CA  SER D  12      -8.010  20.503 -62.368  1.00 29.79           C
ATOM   5416  C   SER D  12      -9.521  20.398 -62.241  1.00 31.07           C
```

[1926]

```
ATOM   5417  O   SER D  12     -10.027  19.476 -61.598  1.00 33.84           O
ATOM   5418  CB  SER D  12      -7.505  19.415 -63.307  1.00 35.86           C
ATOM   5419  OG  SER D  12      -6.105  19.522 -63.469  1.00 40.03           O
ATOM   5420  N   ALA D  13     -10.245  21.305 -62.880  1.00 29.25           N
ATOM   5421  CA  ALA D  13     -11.688  21.252 -62.738  1.00 28.37           C
ATOM   5422  C   ALA D  13     -12.346  21.785 -63.993  1.00 32.64           C
ATOM   5423  O   ALA D  13     -11.723  22.454 -64.823  1.00 31.13           O
ATOM   5424  CB  ALA D  13     -12.158  22.048 -61.520  1.00 30.94           C
ATOM   5425  N   SER D  14     -13.638  21.510 -64.106  1.00 34.40           N
ATOM   5426  CA  SER D  14     -14.423  21.986 -65.232  1.00 34.86           C
ATOM   5427  C   SER D  14     -15.404  23.024 -64.719  1.00 32.16           C
ATOM   5428  O   SER D  14     -15.785  23.005 -63.547  1.00 32.43           O
ATOM   5429  CB  SER D  14     -15.163  20.833 -65.910  1.00 37.58           C
ATOM   5430  OG  SER D  14     -14.263  19.774 -66.198  1.00 39.90           O
ATOM   5431  N   VAL D  15     -15.791  23.945 -65.601  1.00 32.65           N
ATOM   5432  CA  VAL D  15     -16.789  24.940 -65.233  1.00 33.84           C
ATOM   5433  C   VAL D  15     -18.037  24.237 -64.708  1.00 37.86           C
ATOM   5434  O   VAL D  15     -18.479  23.220 -65.258  1.00 36.24           O
ATOM   5435  CB  VAL D  15     -17.109  25.850 -66.432  1.00 30.33           C
ATOM   5436  CG1 VAL D  15     -18.247  26.774 -66.104  1.00 29.46           C
ATOM   5437  CG2 VAL D  15     -15.885  26.648 -66.836  1.00 30.88           C
ATOM   5438  N   GLY D  16     -18.578  24.750 -63.595  1.00 33.82           N
ATOM   5439  CA  GLY D  16     -19.738  24.170 -62.964  1.00 31.29           C
ATOM   5440  C   GLY D  16     -19.429  23.221 -61.826  1.00 32.11           C
ATOM   5441  O   GLY D  16     -20.330  22.927 -61.032  1.00 33.79           O
ATOM   5442  N   ASP D  17     -18.188  22.734 -61.727  1.00 34.10           N
ATOM   5443  CA  ASP D  17     -17.783  21.865 -60.626  1.00 30.72           C
ATOM   5444  C   ASP D  17     -17.878  22.598 -59.293  1.00 33.64           C
ATOM   5445  O   ASP D  17     -17.720  23.824 -59.214  1.00 33.81           O
ATOM   5446  CB  ASP D  17     -16.339  21.401 -60.806  1.00 31.74           C
ATOM   5447  CG  ASP D  17     -16.177  20.352 -61.873  1.00 34.39           C
ATOM   5448  OD1 ASP D  17     -17.198  19.757 -62.289  1.00 35.17           O
ATOM   5449  OD2 ASP D  17     -15.016  20.140 -62.308  1.00 31.69           O
ATOM   5450  N   ARG D  18     -18.135  21.838 -58.231  1.00 31.82           N
ATOM   5451  CA  ARG D  18     -17.955  22.349 -56.879  1.00 33.29           C
ATOM   5452  C   ARG D  18     -16.519  22.053 -56.464  1.00 33.49           C
ATOM   5453  O   ARG D  18     -16.105  20.891 -56.465  1.00 35.92           O
ATOM   5454  CB  ARG D  18     -18.960  21.728 -55.911  1.00 34.28           C
ATOM   5455  CG  ARG D  18     -18.583  21.929 -54.466  1.00 34.65           C
ATOM   5456  CD  ARG D  18     -19.587  21.297 -53.520  1.00 41.75           C
ATOM   5457  NE  ARG D  18     -20.353  22.333 -52.831  1.00 45.51           N
ATOM   5458  CZ  ARG D  18     -21.524  22.798 -53.254  1.00 44.51           C
ATOM   5459  NH1 ARG D  18     -22.065  22.318 -54.366  1.00 43.30           N
ATOM   5460  NH2 ARG D  18     -22.144  23.753 -52.570  1.00 43.77           N
ATOM   5461  N   VAL D  19     -15.769  23.095 -56.123  1.00 31.52           N
ATOM   5462  CA  VAL D  19     -14.340  23.000 -55.864  1.00 28.55           C
ATOM   5463  C   VAL D  19     -14.111  23.358 -54.407  1.00 28.70           C
ATOM   5464  O   VAL D  19     -14.680  24.334 -53.892  1.00 28.89           O
ATOM   5465  CB  VAL D  19     -13.526  23.935 -56.776  1.00 29.47           C
ATOM   5466  CG1 VAL D  19     -12.085  23.997 -56.310  1.00 30.53           C
ATOM   5467  CG2 VAL D  19     -13.602  23.446 -58.201  1.00 31.14           C
ATOM   5468  N   THR D  20     -13.266  22.580 -53.748  1.00 31.69           N
ATOM   5469  CA  THR D  20     -12.997  22.776 -52.351  1.00 29.34           C
ATOM   5470  C   THR D  20     -11.486  22.733 -52.088  1.00 30.45           C
ATOM   5471  O   THR D  20     -10.784  21.816 -52.526  1.00 28.18           O
ATOM   5472  CB  THR D  20     -13.727  21.671 -51.572  1.00 30.86           C
ATOM   5473  CG2 THR D  20     -13.183  20.344 -51.904  1.00 33.12           C
ATOM   5474  OG1 THR D  20     -13.628  21.927 -50.166  1.00 32.30           O
ATOM   5475  N   ILE D  21     -10.996  23.738 -51.368  1.00 29.76           N
ATOM   5476  CA  ILE D  21      -9.578  23.847 -51.038  1.00 28.53           C
ATOM   5477  C   ILE D  21      -9.411  23.787 -49.526  1.00 29.69           C
ATOM   5478  O   ILE D  21     -10.178  24.405 -48.777  1.00 29.30           O
ATOM   5479  CB  ILE D  21      -8.961  25.156 -51.573  1.00 27.53           C
ATOM   5480  CG1 ILE D  21      -9.103  25.224 -53.087  1.00 29.61           C
ATOM   5481  CG2 ILE D  21      -7.478  25.235 -51.212  1.00 27.84           C
ATOM   5482  CD1 ILE D  21      -8.495  26.490 -53.684  1.00 29.18           C
ATOM   5483  N   THR D  22      -8.369  23.095 -49.080  1.00 27.00           N
ATOM   5484  CA  THR D  22      -8.066  22.883 -47.672  1.00 29.14           C
```

[1927]

```
ATOM   5485  C   THR D  22      -6.827  23.669 -47.262  1.00 30.67           C
ATOM   5486  O   THR D  22      -5.904  23.864 -48.061  1.00 28.99           O
ATOM   5487  CB  THR D  22      -7.875  21.385 -47.418  1.00 30.60           C
ATOM   5488  CG2 THR D  22      -6.976  21.060 -46.219  1.00 34.98           C
ATOM   5489  OG1 THR D  22      -9.163  20.761 -47.318  1.00 36.18           O
ATOM   5490  N   CYS D  23      -6.848  24.154 -46.019  1.00 28.41           N
ATOM   5491  CA  CYS D  23      -5.778  24.915 -45.406  1.00 28.78           C
ATOM   5492  C   CYS D  23      -5.706  24.502 -43.951  1.00 28.08           C
ATOM   5493  O   CYS D  23      -6.727  24.538 -43.256  1.00 30.58           O
ATOM   5494  CB  CYS D  23      -6.054  26.416 -45.539  1.00 30.31           C
ATOM   5495  SG  CYS D  23      -4.873  27.459 -44.693  1.00 35.12           S
ATOM   5496  N   ARG D  24      -4.526  24.105 -43.483  1.00 28.99           N
ATOM   5497  CA  ARG D  24      -4.393  23.640 -42.109  1.00 29.76           C
ATOM   5498  C   ARG D  24      -3.267  24.351 -41.393  1.00 28.15           C
ATOM   5499  O   ARG D  24      -2.172  24.508 -41.940  1.00 30.62           O
ATOM   5500  CB  ARG D  24      -4.144  22.158 -42.035  1.00 33.51           C
ATOM   5501  CG  ARG D  24      -5.172  21.422 -42.778  1.00 37.95           C
ATOM   5502  CD  ARG D  24      -5.445  20.125 -42.125  1.00 42.01           C
ATOM   5503  NE  ARG D  24      -6.463  19.440 -42.890  1.00 51.73           N
ATOM   5504  CZ  ARG D  24      -6.581  18.127 -42.929  1.00 56.32           C
ATOM   5505  NH1 ARG D  24      -5.743  17.379 -42.224  1.00 54.09           N
ATOM   5506  NH2 ARG D  24      -7.522  17.576 -43.674  1.00 55.54           N
ATOM   5507  N   ALA D  25      -3.555  24.775 -40.171  1.00 28.22           N
ATOM   5508  CA  ALA D  25      -2.598  25.474 -39.339  1.00 28.25           C
ATOM   5509  C   ALA D  25      -1.934  24.498 -38.377  1.00 31.76           C
ATOM   5510  O   ALA D  25      -2.588  23.607 -37.827  1.00 33.47           O
ATOM   5511  CB  ALA D  25      -3.288  26.588 -38.559  1.00 25.51           C
ATOM   5512  N   SER D  26      -0.630  24.679 -38.163  1.00 30.44           N
ATOM   5513  CA  SER D  26       0.075  23.818 -37.224  1.00 29.16           C
ATOM   5514  C   SER D  26      -0.317  24.100 -35.778  1.00 30.26           C
ATOM   5515  O   SER D  26       0.121  23.372 -34.891  1.00 32.82           O
ATOM   5516  CB  SER D  26       1.590  23.954 -37.408  1.00 32.44           C
ATOM   5517  OG  SER D  26       2.050  25.276 -37.192  1.00 31.41           O
ATOM   5518  N   GLN D  27      -1.121  25.138 -35.521  1.00 35.39           N
ATOM   5519  CA  GLN D  27      -1.695  25.400 -34.206  1.00 31.09           C
ATOM   5520  C   GLN D  27      -3.051  26.033 -34.410  1.00 29.43           C
ATOM   5521  O   GLN D  27      -3.366  26.510 -35.500  1.00 29.33           O
ATOM   5522  CB  GLN D  27      -0.876  26.383 -33.365  1.00 34.06           C
ATOM   5523  CG  GLN D  27       0.654  26.170 -33.305  1.00 41.81           C
ATOM   5524  CD  GLN D  27       1.375  27.426 -32.805  1.00 43.60           C
ATOM   5525  NE2 GLN D  27       2.694  27.363 -32.718  1.00 43.88           N
ATOM   5526  OE1 GLN D  27       0.744  28.445 -32.501  1.00 38.52           O
ATOM   5527  N   SER D  28      -3.859  26.033 -33.354  1.00 28.20           N
ATOM   5528  CA  SER D  28      -5.162  26.670 -33.445  1.00 27.27           C
ATOM   5529  C   SER D  28      -4.954  28.170 -33.606  1.00 30.41           C
ATOM   5530  O   SER D  28      -4.217  28.800 -32.837  1.00 30.05           O
ATOM   5531  CB  SER D  28      -6.018  26.366 -32.218  1.00 29.69           C
ATOM   5532  OG  SER D  28      -7.273  27.054 -32.320  1.00 34.03           O
ATOM   5533  N   ILE D  29      -5.614  28.731 -34.605  1.00 25.78           N
ATOM   5534  CA  ILE D  29      -5.581  30.145 -34.934  1.00 27.07           C
ATOM   5535  C   ILE D  29      -6.971  30.761 -34.827  1.00 24.18           C
ATOM   5536  O   ILE D  29      -7.245  31.779 -35.444  1.00 21.82           O
ATOM   5537  CB  ILE D  29      -4.963  30.373 -36.324  1.00 25.66           C
ATOM   5538  CG1 ILE D  29      -5.746  29.591 -37.381  1.00 23.95           C
ATOM   5539  CG2 ILE D  29      -3.493  30.009 -36.304  1.00 22.26           C
ATOM   5540  CD1 ILE D  29      -5.302  29.864 -38.830  1.00 23.77           C
ATOM   5541  N   SER D  30      -7.854  30.109 -34.062  1.00 25.54           N
ATOM   5542  CA  SER D  30      -9.233  30.553 -33.903  1.00 26.57           C
ATOM   5543  C   SER D  30      -9.849  30.694 -35.290  1.00 27.45           C
ATOM   5544  O   SER D  30      -9.860  29.739 -36.080  1.00 28.63           O
ATOM   5545  CB  SER D  30      -9.287  31.868 -33.094  1.00 25.02           C
ATOM   5546  OG  SER D  30     -10.621  32.392 -32.956  1.00 22.00           O
ATOM   5547  N   SER D  31     -10.350  31.879 -35.613  1.00 27.55           N
ATOM   5548  CA  SER D  31     -10.868  32.146 -36.948  1.00 24.89           C
ATOM   5549  C   SER D  31     -10.058  33.212 -37.683  1.00 24.92           C
ATOM   5550  O   SER D  31     -10.581  33.837 -38.613  1.00 27.20           O
ATOM   5551  CB  SER D  31     -12.323  32.560 -36.841  1.00 24.70           C
ATOM   5552  OG  SER D  31     -12.415  33.544 -35.834  1.00 30.47           O
```

[1928]

```
ATOM   5553  N   TYR D  32      -8.805  33.467 -37.265  1.00 26.52           N
ATOM   5554  CA  TYR D  32      -7.938  34.480 -37.889  1.00 23.27           C
ATOM   5555  C   TYR D  32      -7.249  33.878 -39.115  1.00 24.01           C
ATOM   5556  O   TYR D  32      -6.035  33.669 -39.176  1.00 23.24           O
ATOM   5557  CB  TYR D  32      -6.945  35.039 -36.874  1.00 25.39           C
ATOM   5558  CG  TYR D  32      -7.611  36.051 -35.952  1.00 27.81           C
ATOM   5559  CD2 TYR D  32      -7.363  37.409 -36.108  1.00 26.22           C
ATOM   5560  CD1 TYR D  32      -8.549  35.656 -34.987  1.00 25.50           C
ATOM   5561  CE2 TYR D  32      -7.993  38.347 -35.294  1.00 27.04           C
ATOM   5562  CE1 TYR D  32      -9.198  36.605 -34.172  1.00 24.31           C
ATOM   5563  CZ  TYR D  32      -8.909  37.935 -34.339  1.00 25.81           C
ATOM   5564  OH  TYR D  32      -9.519  38.873 -33.546  1.00 24.18           O
ATOM   5565  N   LEU D  33      -8.069  33.618 -40.122  1.00 24.12           N
ATOM   5566  CA  LEU D  33      -7.660  32.943 -41.345  1.00 23.02           C
ATOM   5567  C   LEU D  33      -8.337  33.655 -42.504  1.00 24.58           C
ATOM   5568  O   LEU D  33      -9.566  33.818 -42.510  1.00 25.13           O
ATOM   5569  CB  LEU D  33      -8.038  31.456 -41.295  1.00 24.20           C
ATOM   5570  CG  LEU D  33      -7.515  30.479 -42.353  1.00 23.31           C
ATOM   5571  CD1 LEU D  33      -8.372  30.489 -43.605  1.00 23.03           C
ATOM   5572  CD2 LEU D  33      -6.086  30.759 -42.699  1.00 22.88           C
ATOM   5573  N   ASN D  34      -7.530  34.101 -43.465  1.00 22.96           N
ATOM   5574  CA  ASN D  34      -7.977  34.882 -44.606  1.00 20.96           C
ATOM   5575  C   ASN D  34      -7.695  34.114 -45.883  1.00 22.26           C
ATOM   5576  O   ASN D  34      -6.824  33.243 -45.908  1.00 23.47           O
ATOM   5577  CB  ASN D  34      -7.262  36.234 -44.636  1.00 21.92           C
ATOM   5578  CG  ASN D  34      -7.377  36.985 -43.314  1.00 27.05           C
ATOM   5579  ND2 ASN D  34      -6.241  37.221 -42.670  1.00 27.28           N
ATOM   5580  OD1 ASN D  34      -8.481  37.297 -42.847  1.00 26.71           O
ATOM   5581  N   TRP D  35      -8.485  34.379 -46.920  1.00 19.84           N
ATOM   5582  CA  TRP D  35      -8.313  33.758 -48.228  1.00 20.77           C
ATOM   5583  C   TRP D  35      -8.119  34.835 -49.285  1.00 20.08           C
ATOM   5584  O   TRP D  35      -8.780  35.878 -49.248  1.00 21.02           O
ATOM   5585  CB  TRP D  35      -9.502  32.880 -48.620  1.00 19.53           C
ATOM   5586  CG  TRP D  35      -9.579  31.597 -47.859  1.00 23.92           C
ATOM   5587  CD1 TRP D  35     -10.325  31.349 -46.746  1.00 26.12           C
ATOM   5588  CD2 TRP D  35      -8.899  30.375 -48.158  1.00 23.94           C
ATOM   5589  CE2 TRP D  35      -9.282  29.434 -47.186  1.00 23.00           C
ATOM   5590  CE3 TRP D  35      -8.003  29.985 -49.155  1.00 23.77           C
ATOM   5591  NE1 TRP D  35     -10.154  30.052 -46.338  1.00 21.53           N
ATOM   5592  CZ2 TRP D  35      -8.805  28.139 -47.176  1.00 24.76           C
ATOM   5593  CZ3 TRP D  35      -7.523  28.691 -49.136  1.00 24.06           C
ATOM   5594  CH2 TRP D  35      -7.922  27.789 -48.157  1.00 27.79           C
ATOM   5595  N   TYR D  36      -7.168  34.602 -50.198  1.00 21.07           N
ATOM   5596  CA  TYR D  36      -6.833  35.529 -51.271  1.00 20.97           C
ATOM   5597  C   TYR D  36      -6.844  34.796 -52.603  1.00 23.40           C
ATOM   5598  O   TYR D  36      -6.510  33.607 -52.669  1.00 23.25           O
ATOM   5599  CB  TYR D  36      -5.451  36.172 -51.058  1.00 18.69           C
ATOM   5600  CG  TYR D  36      -5.364  37.013 -49.830  1.00 21.11           C
ATOM   5601  CD2 TYR D  36      -5.633  38.377 -49.887  1.00 20.56           C
ATOM   5602  CD1 TYR D  36      -5.010  36.461 -48.611  1.00 19.92           C
ATOM   5603  CE2 TYR D  36      -5.566  39.163 -48.745  1.00 21.71           C
ATOM   5604  CE1 TYR D  36      -4.960  37.236 -47.473  1.00 21.64           C
ATOM   5605  CZ  TYR D  36      -5.229  38.589 -47.549  1.00 20.43           C
ATOM   5606  OH  TYR D  36      -5.160  39.357 -46.403  1.00 23.71           O
ATOM   5607  N   GLN D  37      -7.234  35.512 -53.661  1.00 21.69           N
ATOM   5608  CA  GLN D  37      -7.162  35.043 -55.042  1.00 22.41           C
ATOM   5609  C   GLN D  37      -6.100  35.841 -55.788  1.00 19.95           C
ATOM   5610  O   GLN D  37      -5.923  37.032 -55.541  1.00 20.62           O
ATOM   5611  CB  GLN D  37      -8.515  35.182 -55.736  1.00 21.42           C
ATOM   5612  CG  GLN D  37      -8.545  34.799 -57.185  1.00 19.63           C
ATOM   5613  CD  GLN D  37      -9.866  35.180 -57.793  1.00 23.37           C
ATOM   5614  NE2 GLN D  37     -10.614  34.196 -58.250  1.00 24.88           N
ATOM   5615  OE1 GLN D  37     -10.209  36.364 -57.865  1.00 28.26           O
ATOM   5616  N   GLN D  38      -5.318  35.171 -56.620  1.00 22.57           N
ATOM   5617  CA  GLN D  38      -4.388  35.883 -57.480  1.00 21.75           C
ATOM   5618  C   GLN D  38      -4.408  35.240 -58.843  1.00 24.33           C
ATOM   5619  O   GLN D  38      -4.162  34.034 -58.954  1.00 23.55           O
ATOM   5620  CB  GLN D  38      -2.951  35.875 -56.945  1.00 26.12           C
```

[1929]

```
ATOM   5621  CG  GLN D  38      -2.049  36.873 -57.685  1.00 26.14           C
ATOM   5622  CD  GLN D  38      -0.612  36.762 -57.247  1.00 26.55           C
ATOM   5623  NE2 GLN D  38       0.127  37.853 -57.347  1.00 24.78           N
ATOM   5624  OE1 GLN D  38      -0.180  35.709 -56.799  1.00 26.02           O
ATOM   5625  N   LYS D  39      -4.619  36.046 -59.857  1.00 24.66           N
ATOM   5626  CA  LYS D  39      -4.495  35.616 -61.233  1.00 24.96           C
ATOM   5627  C   LYS D  39      -3.141  36.015 -61.791  1.00 26.42           C
ATOM   5628  O   LYS D  39      -2.477  36.911 -61.258  1.00 25.51           O
ATOM   5629  CB  LYS D  39      -5.607  36.239 -62.075  1.00 26.23           C
ATOM   5630  CG  LYS D  39      -6.983  35.896 -61.567  1.00 24.62           C
ATOM   5631  CD  LYS D  39      -8.047  36.623 -62.345  1.00 27.73           C
ATOM   5632  CE  LYS D  39      -9.403  35.990 -62.111  1.00 30.94           C
ATOM   5633  NZ  LYS D  39     -10.517  36.916 -62.526  1.00 35.63           N
ATOM   5634  N   PRO D  40      -2.695  35.350 -62.861  1.00 30.14           N
ATOM   5635  CA  PRO D  40      -1.345  35.595 -63.385  1.00 25.64           C
ATOM   5636  C   PRO D  40      -1.182  37.042 -63.803  1.00 27.61           C
ATOM   5637  O   PRO D  40      -2.000  37.574 -64.560  1.00 29.09           O
ATOM   5638  CB  PRO D  40      -1.270  34.661 -64.590  1.00 26.91           C
ATOM   5639  CG  PRO D  40      -2.185  33.567 -64.265  1.00 30.36           C
ATOM   5640  CD  PRO D  40      -3.331  34.201 -63.520  1.00 29.39           C
ATOM   5641  N   GLY D  41      -0.104  37.672 -63.322  1.00 29.61           N
ATOM   5642  CA  GLY D  41       0.163  39.062 -63.637  1.00 26.97           C
ATOM   5643  C   GLY D  41      -0.731  40.051 -62.922  1.00 29.35           C
ATOM   5644  O   GLY D  41      -0.690  41.241 -63.236  1.00 29.04           O
ATOM   5645  N   CYS D  42      -1.562  39.604 -61.988  1.00 28.92           N
ATOM   5646  CA  CYS D  42      -2.408  40.521 -61.234  1.00 26.38           C
ATOM   5647  C   CYS D  42      -1.937  40.593 -59.790  1.00 25.05           C
ATOM   5648  O   CYS D  42      -1.235  39.713 -59.285  1.00 24.75           O
ATOM   5649  CB  CYS D  42      -3.879  40.089 -61.239  1.00 25.56           C
ATOM   5650  SG  CYS D  42      -4.674  39.763 -62.833  1.00 27.34           S
ATOM   5651  N   ALA D  43      -2.349  41.651 -59.120  1.00 26.24           N
ATOM   5652  CA  ALA D  43      -2.183  41.735 -57.683  1.00 24.66           C
ATOM   5653  C   ALA D  43      -3.185  40.816 -57.012  1.00 24.52           C
ATOM   5654  O   ALA D  43      -4.209  40.470 -57.609  1.00 23.37           O
ATOM   5655  CB  ALA D  43      -2.393  43.168 -57.202  1.00 25.10           C
ATOM   5656  N   PRO D  44      -2.895  40.374 -55.786  1.00 25.17           N
ATOM   5657  CA  PRO D  44      -3.861  39.556 -55.047  1.00 25.21           C
ATOM   5658  C   PRO D  44      -5.139  40.328 -54.721  1.00 24.68           C
ATOM   5659  O   PRO D  44      -5.177  41.565 -54.654  1.00 24.15           O
ATOM   5660  CB  PRO D  44      -3.099  39.181 -53.770  1.00 25.76           C
ATOM   5661  CG  PRO D  44      -1.659  39.353 -54.126  1.00 24.35           C
ATOM   5662  CD  PRO D  44      -1.617  40.491 -55.058  1.00 21.90           C
ATOM   5663  N   LYS D  45      -6.187  39.552 -54.457  1.00 22.45           N
ATOM   5664  CA  LYS D  45      -7.493  40.076 -54.094  1.00 22.02           C
ATOM   5665  C   LYS D  45      -7.974  39.356 -52.836  1.00 25.40           C
ATOM   5666  O   LYS D  45      -7.897  38.118 -52.754  1.00 22.22           O
ATOM   5667  CB  LYS D  45      -8.443  39.881 -55.285  1.00 24.54           C
ATOM   5668  CG  LYS D  45      -9.924  40.037 -55.067  1.00 27.58           C
ATOM   5669  CD  LYS D  45     -10.516  40.386 -56.390  1.00 32.79           C
ATOM   5670  CE  LYS D  45     -12.029  40.482 -56.388  1.00 33.25           C
ATOM   5671  NZ  LYS D  45     -12.729  39.581 -57.357  1.00 38.17           N
ATOM   5672  N   LEU D  46      -8.459  40.131 -51.859  1.00 21.51           N
ATOM   5673  CA  LEU D  46      -9.000  39.546 -50.644  1.00 21.08           C
ATOM   5674  C   LEU D  46     -10.346  38.938 -50.965  1.00 19.37           C
ATOM   5675  O   LEU D  46     -11.197  39.599 -51.557  1.00 21.88           O
ATOM   5676  CB  LEU D  46      -9.144  40.599 -49.550  1.00 24.53           C
ATOM   5677  CG  LEU D  46      -9.887  40.079 -48.319  1.00 21.88           C
ATOM   5678  CD1 LEU D  46      -9.098  38.975 -47.589  1.00 19.16           C
ATOM   5679  CD2 LEU D  46     -10.211  41.211 -47.372  1.00 20.69           C
ATOM   5680  N   LEU D  47     -10.531  37.673 -50.600  1.00 21.25           N
ATOM   5681  CA  LEU D  47     -11.788  36.966 -50.816  1.00 23.84           C
ATOM   5682  C   LEU D  47     -12.595  36.785 -49.541  1.00 22.57           C
ATOM   5683  O   LEU D  47     -13.776  37.140 -49.497  1.00 24.51           O
ATOM   5684  CB  LEU D  47     -11.528  35.571 -51.400  1.00 23.30           C
ATOM   5685  CG  LEU D  47     -10.873  35.416 -52.744  1.00 22.64           C
ATOM   5686  CD1 LEU D  47     -10.826  33.921 -52.975  1.00 21.14           C
ATOM   5687  CD2 LEU D  47     -11.722  36.104 -53.759  1.00 20.57           C
ATOM   5688  N   ILE D  48     -11.980  36.201 -48.519  1.00 22.73           N
```

[1930]

```
ATOM   5689  CA  ILE D  48     -12.614  35.836 -47.259  1.00 21.85           C
ATOM   5690  C   ILE D  48     -11.744  36.348 -46.124  1.00 23.09           C
ATOM   5691  O   ILE D  48     -10.512  36.228 -46.182  1.00 21.96           O
ATOM   5692  CB  ILE D  48     -12.751  34.302 -47.113  1.00 21.66           C
ATOM   5693  CG1 ILE D  48     -13.456  33.657 -48.315  1.00 23.36           C
ATOM   5694  CG2 ILE D  48     -13.458  33.954 -45.820  1.00 23.74           C
ATOM   5695  CD1 ILE D  48     -14.889  33.927 -48.369  1.00 25.92           C
ATOM   5696  N   TYR D  49     -12.374  36.880 -45.078  1.00 22.26           N
ATOM   5697  CA  TYR D  49     -11.672  37.177 -43.831  1.00 25.76           C
ATOM   5698  C   TYR D  49     -12.445  36.559 -42.673  1.00 23.96           C
ATOM   5699  O   TYR D  49     -13.612  36.163 -42.811  1.00 24.53           O
ATOM   5700  CB  TYR D  49     -11.469  38.679 -43.596  1.00 26.51           C
ATOM   5701  CG  TYR D  49     -12.744  39.455 -43.412  1.00 24.29           C
ATOM   5702  CD1 TYR D  49     -13.486  39.852 -44.507  1.00 26.13           C
ATOM   5703  CD2 TYR D  49     -13.203  39.792 -42.141  1.00 25.17           C
ATOM   5704  CE1 TYR D  49     -14.651  40.551 -44.346  1.00 27.58           C
ATOM   5705  CE2 TYR D  49     -14.368  40.489 -41.977  1.00 23.58           C
ATOM   5706  CZ  TYR D  49     -15.078  40.857 -43.082  1.00 24.36           C
ATOM   5707  OH  TYR D  49     -16.245  41.543 -42.959  1.00 32.84           O
ATOM   5708  N   ALA D  50     -11.759  36.431 -41.540  1.00 25.08           N
ATOM   5709  CA  ALA D  50     -12.312  35.787 -40.338  1.00 26.24           C
ATOM   5710  C   ALA D  50     -12.872  34.399 -40.644  1.00 27.64           C
ATOM   5711  O   ALA D  50     -13.941  34.027 -40.153  1.00 24.61           O
ATOM   5712  CB  ALA D  50     -13.377  36.661 -39.674  1.00 26.42           C
ATOM   5713  N   ALA D  51     -12.149  33.643 -41.491  1.00 26.53           N
ATOM   5714  CA  ALA D  51     -12.432  32.256 -41.883  1.00 25.40           C
ATOM   5715  C   ALA D  51     -13.667  32.106 -42.769  1.00 23.10           C
ATOM   5716  O   ALA D  51     -13.684  31.224 -43.634  1.00 23.69           O
ATOM   5717  CB  ALA D  51     -12.557  31.334 -40.668  1.00 24.78           C
ATOM   5718  N   SER D  52     -14.697  32.953 -42.598  1.00 23.78           N
ATOM   5719  CA  SER D  52     -15.966  32.735 -43.293  1.00 24.63           C
ATOM   5720  C   SER D  52     -16.674  33.993 -43.777  1.00 24.40           C
ATOM   5721  O   SER D  52     -17.724  33.867 -44.415  1.00 22.48           O
ATOM   5722  CB  SER D  52     -16.945  31.962 -42.395  1.00 26.93           C
ATOM   5723  OG  SER D  52     -17.322  32.748 -41.270  1.00 33.16           O
ATOM   5724  N   SER D  53     -16.156  35.190 -43.495  1.00 25.74           N
ATOM   5725  CA  SER D  53     -16.774  36.435 -43.938  1.00 25.75           C
ATOM   5726  C   SER D  53     -16.270  36.836 -45.327  1.00 23.87           C
ATOM   5727  O   SER D  53     -15.064  37.046 -45.524  1.00 25.59           O
ATOM   5728  CB  SER D  53     -16.489  37.544 -42.927  1.00 24.27           C
ATOM   5729  OG  SER D  53     -17.084  37.278 -41.658  1.00 28.83           O
ATOM   5730  N   LEU D  54     -17.200  37.039 -46.261  1.00 24.57           N
ATOM   5731  CA  LEU D  54     -16.866  37.416 -47.633  1.00 23.27           C
ATOM   5732  C   LEU D  54     -16.490  38.877 -47.741  1.00 26.40           C
ATOM   5733  O   LEU D  54     -17.227  39.750 -47.277  1.00 27.20           O
ATOM   5734  CB  LEU D  54     -18.044  37.175 -48.566  1.00 24.79           C
ATOM   5735  CG  LEU D  54     -18.059  35.842 -49.264  1.00 27.18           C
ATOM   5736  CD1 LEU D  54     -18.302  34.709 -48.255  1.00 28.26           C
ATOM   5737  CD2 LEU D  54     -19.101  35.871 -50.381  1.00 32.15           C
ATOM   5738  N   GLN D  55     -15.366  39.154 -48.388  1.00 28.39           N
ATOM   5739  CA  GLN D  55     -15.037  40.543 -48.644  1.00 26.45           C
ATOM   5740  C   GLN D  55     -15.994  41.087 -49.700  1.00 27.91           C
ATOM   5741  O   GLN D  55     -16.503  40.345 -50.546  1.00 26.36           O
ATOM   5742  CB  GLN D  55     -13.578  40.690 -49.081  1.00 25.16           C
ATOM   5743  CG  GLN D  55     -13.241  42.107 -49.562  1.00 27.26           C
ATOM   5744  CD  GLN D  55     -13.273  43.130 -48.421  1.00 29.70           C
ATOM   5745  NE2 GLN D  55     -13.003  44.396 -48.751  1.00 33.78           N
ATOM   5746  OE1 GLN D  55     -13.558  42.791 -47.263  1.00 33.29           O
ATOM   5747  N   SER D  56     -16.322  42.374 -49.585  1.00 30.81           N
ATOM   5748  CA  SER D  56     -17.228  43.004 -50.538  1.00 32.70           C
ATOM   5749  C   SER D  56     -16.680  42.886 -51.956  1.00 31.33           C
ATOM   5750  O   SER D  56     -15.484  43.064 -52.199  1.00 29.77           O
ATOM   5751  CB  SER D  56     -17.465  44.465 -50.173  1.00 34.23           C
ATOM   5752  OG  SER D  56     -16.272  45.206 -50.312  1.00 38.10           O
ATOM   5753  N   GLY D  57     -17.567  42.566 -52.892  1.00 33.26           N
ATOM   5754  CA  GLY D  57     -17.220  42.353 -54.279  1.00 31.01           C
ATOM   5755  C   GLY D  57     -16.986  40.903 -54.635  1.00 31.27           C
ATOM   5756  O   GLY D  57     -16.896  40.580 -55.819  1.00 36.83           O
```

[1931]

```
ATOM   5757  N   VAL D  58     -16.925  40.016 -53.653  1.00 32.44           N
ATOM   5758  CA  VAL D  58     -16.679  38.608 -53.934  1.00 27.99           C
ATOM   5759  C   VAL D  58     -18.020  37.911 -54.146  1.00 33.06           C
ATOM   5760  O   VAL D  58     -18.907  38.030 -53.286  1.00 33.39           O
ATOM   5761  CB  VAL D  58     -15.874  37.985 -52.789  1.00 28.26           C
ATOM   5762  CG1 VAL D  58     -15.614  36.514 -53.042  1.00 27.34           C
ATOM   5763  CG2 VAL D  58     -14.578  38.776 -52.590  1.00 26.05           C
ATOM   5764  N   PRO D  59     -18.222  37.184 -55.255  1.00 31.91           N
ATOM   5765  CA  PRO D  59     -19.503  36.488 -55.463  1.00 29.80           C
ATOM   5766  C   PRO D  59     -19.776  35.478 -54.360  1.00 31.04           C
ATOM   5767  O   PRO D  59     -18.868  34.801 -53.873  1.00 35.13           O
ATOM   5768  CB  PRO D  59     -19.309  35.787 -56.810  1.00 28.19           C
ATOM   5769  CG  PRO D  59     -18.210  36.552 -57.490  1.00 30.10           C
ATOM   5770  CD  PRO D  59     -17.319  37.067 -56.414  1.00 28.66           C
ATOM   5771  N   SER D  60     -21.054  35.312 -54.013  1.00 32.68           N
ATOM   5772  CA  SER D  60     -21.366  34.451 -52.872  1.00 31.72           C
ATOM   5773  C   SER D  60     -21.194  32.967 -53.164  1.00 33.28           C
ATOM   5774  O   SER D  60     -21.418  32.156 -52.262  1.00 31.91           O
ATOM   5775  CB  SER D  60     -22.777  34.741 -52.351  1.00 34.01           C
ATOM   5776  OG  SER D  60     -23.707  34.821 -53.406  1.00 37.60           O
ATOM   5777  N   ARG D  61     -20.810  32.587 -54.387  1.00 32.96           N
ATOM   5778  CA  ARG D  61     -20.418  31.209 -54.630  1.00 27.76           C
ATOM   5779  C   ARG D  61     -19.127  30.851 -53.916  1.00 29.50           C
ATOM   5780  O   ARG D  61     -18.780  29.665 -53.857  1.00 29.16           O
ATOM   5781  CB  ARG D  61     -20.250  30.948 -56.128  1.00 28.89           C
ATOM   5782  CG  ARG D  61     -19.163  31.783 -56.855  1.00 27.96           C
ATOM   5783  CD  ARG D  61     -19.076  31.330 -58.334  1.00 28.66           C
ATOM   5784  NE  ARG D  61     -18.058  32.008 -59.113  1.00 23.31           N
ATOM   5785  CZ  ARG D  61     -18.241  33.180 -59.709  1.00 25.71           C
ATOM   5786  NH1 ARG D  61     -19.399  33.799 -59.609  1.00 26.54           N
ATOM   5787  NH2 ARG D  61     -17.259  33.750 -60.389  1.00 29.46           N
ATOM   5788  N   PHE D  62     -18.377  31.846 -53.436  1.00 28.21           N
ATOM   5789  CA  PHE D  62     -17.213  31.591 -52.602  1.00 26.23           C
ATOM   5790  C   PHE D  62     -17.692  31.516 -51.171  1.00 28.34           C
ATOM   5791  O   PHE D  62     -18.469  32.363 -50.727  1.00 29.45           O
ATOM   5792  CB  PHE D  62     -16.149  32.688 -52.732  1.00 27.50           C
ATOM   5793  CG  PHE D  62     -15.432  32.684 -54.051  1.00 27.09           C
ATOM   5794  CD1 PHE D  62     -15.933  33.394 -55.130  1.00 27.82           C
ATOM   5795  CD2 PHE D  62     -14.261  31.959 -54.207  1.00 26.92           C
ATOM   5796  CE1 PHE D  62     -15.283  33.375 -56.344  1.00 26.75           C
ATOM   5797  CE2 PHE D  62     -13.608  31.936 -55.411  1.00 22.60           C
ATOM   5798  CZ  PHE D  62     -14.120  32.641 -56.480  1.00 25.96           C
ATOM   5799  N   SER D  63     -17.242  30.512 -50.452  1.00 27.74           N
ATOM   5800  CA  SER D  63     -17.566  30.452 -49.040  1.00 29.01           C
ATOM   5801  C   SER D  63     -16.391  29.879 -48.282  1.00 28.16           C
ATOM   5802  O   SER D  63     -15.595  29.109 -48.833  1.00 29.43           O
ATOM   5803  CB  SER D  63     -18.774  29.595 -48.802  1.00 29.17           C
ATOM   5804  OG  SER D  63     -18.416  28.268 -49.092  1.00 31.71           O
ATOM   5805  N   GLY D  64     -16.305  30.240 -47.009  1.00 27.31           N
ATOM   5806  CA  GLY D  64     -15.258  29.733 -46.153  1.00 27.06           C
ATOM   5807  C   GLY D  64     -15.836  29.179 -44.870  1.00 26.76           C
ATOM   5808  O   GLY D  64     -16.917  29.569 -44.431  1.00 26.37           O
ATOM   5809  N   SER D  65     -15.113  28.219 -44.296  1.00 27.66           N
ATOM   5810  CA  SER D  65     -15.530  27.593 -43.052  1.00 28.01           C
ATOM   5811  C   SER D  65     -14.307  27.038 -42.333  1.00 29.16           C
ATOM   5812  O   SER D  65     -13.236  26.845 -42.924  1.00 27.98           O
ATOM   5813  CB  SER D  65     -16.555  26.490 -43.286  1.00 31.97           C
ATOM   5814  OG  SER D  65     -15.923  25.372 -43.855  1.00 37.10           O
ATOM   5815  N   GLY D  66     -14.484  26.817 -41.037  1.00 31.43           N
ATOM   5816  CA  GLY D  66     -13.503  26.172 -40.200  1.00 29.98           C
ATOM   5817  C   GLY D  66     -13.137  27.041 -39.023  1.00 30.64           C
ATOM   5818  O   GLY D  66     -13.400  28.245 -39.023  1.00 32.73           O
ATOM   5819  N   SER D  67     -12.520  26.438 -38.015  1.00 32.15           N
ATOM   5820  CA  SER D  67     -11.977  27.195 -36.898  1.00 35.00           C
ATOM   5821  C   SER D  67     -10.917  26.338 -36.236  1.00 33.47           C
ATOM   5822  O   SER D  67     -10.927  25.105 -36.341  1.00 38.11           O
ATOM   5823  CB  SER D  67     -13.047  27.579 -35.875  1.00 33.84           C
ATOM   5824  OG  SER D  67     -13.502  26.404 -35.233  1.00 42.15           O
```

[1932]

```
ATOM   5825  N   GLY D  68     -10.019  27.004 -35.525  1.00 30.72           N
ATOM   5826  CA  GLY D  68      -8.953  26.274 -34.890  1.00 28.13           C
ATOM   5827  C   GLY D  68      -7.863  25.935 -35.870  1.00 27.93           C
ATOM   5828  O   GLY D  68      -6.996  26.779 -36.131  1.00 24.27           O
ATOM   5829  N   THR D  69      -7.892  24.710 -36.422  1.00 25.77           N
ATOM   5830  CA  THR D  69      -6.802  24.237 -37.260  1.00 28.95           C
ATOM   5831  C   THR D  69      -7.164  23.869 -38.683  1.00 30.00           C
ATOM   5832  O   THR D  69      -6.261  23.878 -39.523  1.00 31.72           O
ATOM   5833  CB  THR D  69      -6.154  22.992 -36.640  1.00 30.28           C
ATOM   5834  CG2 THR D  69      -5.616  23.313 -35.275  1.00 27.77           C
ATOM   5835  OG1 THR D  69      -7.152  21.973 -36.520  1.00 31.67           O
ATOM   5836  N   ASP D  70      -8.432  23.581 -39.006  1.00 32.04           N
ATOM   5837  CA  ASP D  70      -8.798  23.104 -40.342  1.00 32.83           C
ATOM   5838  C   ASP D  70      -9.735  24.100 -41.000  1.00 32.88           C
ATOM   5839  O   ASP D  70     -10.804  24.411 -40.449  1.00 33.19           O
ATOM   5840  CB  ASP D  70      -9.502  21.753 -40.297  1.00 36.05           C
ATOM   5841  CG  ASP D  70      -8.833  20.793 -39.381  1.00 45.18           C
ATOM   5842  OD2 ASP D  70      -9.461  20.431 -38.365  1.00 50.84           O
ATOM   5843  OD1 ASP D  70      -7.699  20.381 -39.669  1.00 49.98           O
ATOM   5844  N   PHE D  71      -9.365  24.557 -42.189  1.00 26.20           N
ATOM   5845  CA  PHE D  71     -10.136  25.561 -42.895  1.00 28.95           C
ATOM   5846  C   PHE D  71     -10.295  25.103 -44.328  1.00 27.87           C
ATOM   5847  O   PHE D  71      -9.438  24.394 -44.856  1.00 28.92           O
ATOM   5848  CB  PHE D  71      -9.446  26.929 -42.828  1.00 28.09           C
ATOM   5849  CG  PHE D  71      -9.175  27.379 -41.439  1.00 28.07           C
ATOM   5850  CD1 PHE D  71     -10.118  28.122 -40.748  1.00 24.55           C
ATOM   5851  CD2 PHE D  71      -7.996  27.016 -40.799  1.00 25.68           C
ATOM   5852  CE1 PHE D  71      -9.883  28.524 -39.459  1.00 25.47           C
ATOM   5853  CE2 PHE D  71      -7.745  27.420 -39.505  1.00 26.61           C
ATOM   5854  CZ  PHE D  71      -8.692  28.165 -38.828  1.00 26.90           C
ATOM   5855  N   THR D  72     -11.418  25.461 -44.939  1.00 26.09           N
ATOM   5856  CA  THR D  72     -11.652  25.096 -46.324  1.00 28.18           C
ATOM   5857  C   THR D  72     -12.275  26.264 -47.068  1.00 29.59           C
ATOM   5858  O   THR D  72     -13.125  26.979 -46.531  1.00 27.87           O
ATOM   5859  CB  THR D  72     -12.575  23.894 -46.461  1.00 33.32           C
ATOM   5860  CG2 THR D  72     -12.160  22.768 -45.542  1.00 33.32           C
ATOM   5861  OG1 THR D  72     -13.876  24.321 -46.091  1.00 34.56           O
ATOM   5862  N   LEU D  73     -11.877  26.420 -48.320  1.00 26.88           N
ATOM   5863  CA  LEU D  73     -12.474  27.375 -49.233  1.00 27.40           C
ATOM   5864  C   LEU D  73     -13.279  26.586 -50.251  1.00 26.39           C
ATOM   5865  O   LEU D  73     -12.757  25.649 -50.852  1.00 25.98           O
ATOM   5866  CB  LEU D  73     -11.380  28.184 -49.920  1.00 23.13           C
ATOM   5867  CG  LEU D  73     -11.801  29.122 -51.030  1.00 23.91           C
ATOM   5868  CD1 LEU D  73     -12.485  30.353 -50.444  1.00 19.85           C
ATOM   5869  CD2 LEU D  73     -10.586  29.484 -51.845  1.00 22.89           C
ATOM   5870  N   THR D  74     -14.546  26.953 -50.438  1.00 29.01           N
ATOM   5871  CA  THR D  74     -15.436  26.264 -51.366  1.00 28.88           C
ATOM   5872  C   THR D  74     -15.922  27.241 -52.424  1.00 32.12           C
ATOM   5873  O   THR D  74     -16.419  28.326 -52.082  1.00 28.15           O
ATOM   5874  CB  THR D  74     -16.665  25.671 -50.664  1.00 30.68           C
ATOM   5875  CG2 THR D  74     -17.492  24.899 -51.656  1.00 30.39           C
ATOM   5876  OG1 THR D  74     -16.256  24.785 -49.618  1.00 33.00           O
ATOM   5877  N   ILE D  75     -15.817  26.836 -53.699  1.00 28.33           N
ATOM   5878  CA  ILE D  75     -16.469  27.518 -54.813  1.00 29.26           C
ATOM   5879  C   ILE D  75     -17.587  26.593 -55.243  1.00 31.64           C
ATOM   5880  O   ILE D  75     -17.329  25.468 -55.689  1.00 30.67           O
ATOM   5881  CB  ILE D  75     -15.526  27.803 -55.986  1.00 30.29           C
ATOM   5882  CG1 ILE D  75     -14.214  28.410 -55.488  1.00 29.87           C
ATOM   5883  CG2 ILE D  75     -16.226  28.725 -56.994  1.00 28.00           C
ATOM   5884  CD1 ILE D  75     -13.141  28.478 -56.550  1.00 26.81           C
ATOM   5885  N   SER D  76     -18.833  27.045 -55.085  1.00 31.86           N
ATOM   5886  CA  SER D  76     -19.946  26.119 -55.230  1.00 32.82           C
ATOM   5887  C   SER D  76     -20.155  25.705 -56.685  1.00 34.94           C
ATOM   5888  O   SER D  76     -20.575  24.570 -56.957  1.00 35.49           O
ATOM   5889  CB  SER D  76     -21.210  26.769 -54.679  1.00 32.31           C
ATOM   5890  OG  SER D  76     -21.537  27.914 -55.454  1.00 32.56           O
ATOM   5891  N   SER D  77     -19.799  26.576 -57.629  1.00 32.17           N
ATOM   5892  CA  SER D  77     -20.003  26.307 -59.049  1.00 30.20           C
```

[1933]

```
ATOM   5893  C   SER D  77     -18.915  27.074 -59.796  1.00 29.06           C
ATOM   5894  O   SER D  77     -19.077  28.267 -60.071  1.00 27.84           O
ATOM   5895  CB  SER D  77     -21.404  26.742 -59.460  1.00 28.31           C
ATOM   5896  OG  SER D  77     -21.666  26.477 -60.820  1.00 34.48           O
ATOM   5897  N   LEU D  78     -17.813  26.391 -60.107  1.00 28.10           N
ATOM   5898  CA  LEU D  78     -16.635  27.053 -60.662  1.00 27.97           C
ATOM   5899  C   LEU D  78     -16.930  27.767 -61.982  1.00 27.75           C
ATOM   5900  O   LEU D  78     -17.425  27.156 -62.929  1.00 32.05           O
ATOM   5901  CB  LEU D  78     -15.530  26.011 -60.844  1.00 27.92           C
ATOM   5902  CG  LEU D  78     -14.150  26.601 -61.143  1.00 28.95           C
ATOM   5903  CD1 LEU D  78     -13.605  27.258 -59.905  1.00 26.04           C
ATOM   5904  CD2 LEU D  78     -13.194  25.533 -61.638  1.00 29.16           C
ATOM   5905  N   GLN D  79     -16.565  29.055 -62.076  1.00 26.46           N
ATOM   5906  CA  GLN D  79     -16.819  29.847 -63.278  1.00 27.53           C
ATOM   5907  C   GLN D  79     -15.533  30.180 -64.043  1.00 29.18           C
ATOM   5908  O   GLN D  79     -14.424  30.102 -63.495  1.00 28.00           O
ATOM   5909  CB  GLN D  79     -17.544  31.153 -62.936  1.00 28.57           C
ATOM   5910  CG  GLN D  79     -18.941  30.923 -62.418  1.00 31.19           C
ATOM   5911  CD  GLN D  79     -19.827  30.207 -63.395  1.00 29.09           C
ATOM   5912  NE2 GLN D  79     -20.327  29.066 -62.972  1.00 34.21           N
ATOM   5913  OE1 GLN D  79     -20.017  30.626 -64.528  1.00 29.83           O
ATOM   5914  N   PRO D  80     -15.647  30.536 -65.338  1.00 29.63           N
ATOM   5915  CA  PRO D  80     -14.429  30.786 -66.133  1.00 29.84           C
ATOM   5916  C   PRO D  80     -13.496  31.797 -65.499  1.00 29.82           C
ATOM   5917  O   PRO D  80     -12.269  31.635 -65.570  1.00 31.35           O
ATOM   5918  CB  PRO D  80     -14.981  31.304 -67.465  1.00 25.93           C
ATOM   5919  CG  PRO D  80     -16.329  30.696 -67.572  1.00 26.41           C
ATOM   5920  CD  PRO D  80     -16.867  30.620 -66.170  1.00 28.65           C
ATOM   5921  N   GLU D  81     -14.040  32.806 -64.833  1.00 29.72           N
ATOM   5922  CA  GLU D  81     -13.232  33.843 -64.208  1.00 27.98           C
ATOM   5923  C   GLU D  81     -12.598  33.409 -62.888  1.00 30.74           C
ATOM   5924  O   GLU D  81     -11.880  34.215 -62.278  1.00 30.33           O
ATOM   5925  CB  GLU D  81     -14.095  35.082 -64.002  1.00 27.62           C
ATOM   5926  CG  GLU D  81     -15.272  34.816 -63.065  1.00 32.20           C
ATOM   5927  CD  GLU D  81     -16.611  34.612 -63.811  1.00 33.99           C
ATOM   5928  OE1 GLU D  81     -16.673  33.808 -64.796  1.00 29.92           O
ATOM   5929  OE2 GLU D  81     -17.598  35.265 -63.382  1.00 38.66           O
ATOM   5930  N   ASP D  82     -12.832  32.172 -62.424  1.00 27.71           N
ATOM   5931  CA  ASP D  82     -12.307  31.701 -61.139  1.00 26.41           C
ATOM   5932  C   ASP D  82     -11.023  30.887 -61.255  1.00 24.70           C
ATOM   5933  O   ASP D  82     -10.478  30.492 -60.221  1.00 23.28           O
ATOM   5934  CB  ASP D  82     -13.342  30.850 -60.397  1.00 26.23           C
ATOM   5935  CG  ASP D  82     -14.601  31.624 -60.049  1.00 29.60           C
ATOM   5936  OD1 ASP D  82     -14.545  32.881 -59.973  1.00 28.24           O
ATOM   5937  OD2 ASP D  82     -15.646  30.957 -59.830  1.00 30.81           O
ATOM   5938  N   PHE D  83     -10.535  30.609 -62.472  1.00 25.64           N
ATOM   5939  CA  PHE D  83      -9.267  29.894 -62.625  1.00 25.72           C
ATOM   5940  C   PHE D  83      -8.124  30.820 -62.234  1.00 26.72           C
ATOM   5941  O   PHE D  83      -7.898  31.848 -62.878  1.00 27.04           O
ATOM   5942  CB  PHE D  83      -9.085  29.402 -64.057  1.00 25.44           C
ATOM   5943  CG  PHE D  83     -10.016  28.282 -64.430  1.00 28.04           C
ATOM   5944  CD2 PHE D  83     -11.102  28.504 -65.268  1.00 26.49           C
ATOM   5945  CD1 PHE D  83      -9.820  27.011 -63.925  1.00 29.73           C
ATOM   5946  CE2 PHE D  83     -11.968  27.481 -65.607  1.00 29.12           C
ATOM   5947  CE1 PHE D  83     -10.688  25.970 -64.261  1.00 29.57           C
ATOM   5948  CZ  PHE D  83     -11.765  26.209 -65.108  1.00 30.47           C
ATOM   5949  N   ALA D  84      -7.379  30.428 -61.213  1.00 24.44           N
ATOM   5950  CA  ALA D  84      -6.504  31.341 -60.510  1.00 23.97           C
ATOM   5951  C   ALA D  84      -5.818  30.549 -59.424  1.00 22.87           C
ATOM   5952  O   ALA D  84      -6.146  29.376 -59.223  1.00 23.70           O
ATOM   5953  CB  ALA D  84      -7.294  32.513 -59.913  1.00 23.15           C
ATOM   5954  N   THR D  85      -4.902  31.177 -58.696  1.00 23.08           N
ATOM   5955  CA  THR D  85      -4.278  30.564 -57.536  1.00 21.88           C
ATOM   5956  C   THR D  85      -4.839  31.170 -56.260  1.00 23.54           C
ATOM   5957  O   THR D  85      -5.033  32.385 -56.175  1.00 24.20           O
ATOM   5958  CB  THR D  85      -2.764  30.739 -57.576  1.00 25.45           C
ATOM   5959  CG2 THR D  85      -2.110  30.039 -56.366  1.00 24.54           C
ATOM   5960  OG1 THR D  85      -2.269  30.159 -58.795  1.00 26.97           O
```

[1934]

```
ATOM   5961  N   TYR D  86      -5.094  30.313 -55.272  1.00 21.59           N
ATOM   5962  CA  TYR D  86      -5.754  30.684 -54.030  1.00 23.71           C
ATOM   5963  C   TYR D  86      -4.786  30.456 -52.890  1.00 22.39           C
ATOM   5964  O   TYR D  86      -4.112  29.421 -52.853  1.00 22.95           O
ATOM   5965  CB  TYR D  86      -7.035  29.874 -53.834  1.00 22.40           C
ATOM   5966  CG  TYR D  86      -8.033  30.228 -54.888  1.00 21.74           C
ATOM   5967  CD2 TYR D  86      -8.069  29.540 -56.094  1.00 21.54           C
ATOM   5968  CD1 TYR D  86      -8.898  31.284 -54.712  1.00 21.83           C
ATOM   5969  CE2 TYR D  86      -8.964  29.887 -57.103  1.00 20.99           C
ATOM   5970  CE1 TYR D  86      -9.805  31.643 -55.709  1.00 24.33           C
ATOM   5971  CZ  TYR D  86      -9.826  30.931 -56.905  1.00 23.38           C
ATOM   5972  OH  TYR D  86     -10.697  31.283 -57.908  1.00 25.21           O
ATOM   5973  N   TYR D  87      -4.691  31.446 -51.995  1.00 23.18           N
ATOM   5974  CA  TYR D  87      -3.803  31.432 -50.845  1.00 22.80           C
ATOM   5975  C   TYR D  87      -4.615  31.629 -49.579  1.00 23.20           C
ATOM   5976  O   TYR D  87      -5.494  32.495 -49.537  1.00 22.62           O
ATOM   5977  CB  TYR D  87      -2.765  32.555 -50.932  1.00 20.97           C
ATOM   5978  CG  TYR D  87      -1.850  32.422 -52.102  1.00 21.92           C
ATOM   5979  CD2 TYR D  87      -2.146  33.039 -53.317  1.00 25.00           C
ATOM   5980  CD1 TYR D  87      -0.685  31.671 -52.012  1.00 23.60           C
ATOM   5981  CE2 TYR D  87      -1.315  32.902 -54.406  1.00 24.45           C
ATOM   5982  CE1 TYR D  87       0.162  31.536 -53.108  1.00 23.31           C
ATOM   5983  CZ  TYR D  87      -0.166  32.145 -54.292  1.00 23.31           C
ATOM   5984  OH  TYR D  87       0.657  32.023 -55.376  1.00 27.05           O
ATOM   5985  N   CYS D  88      -4.305  30.853 -48.541  1.00 24.48           N
ATOM   5986  CA  CYS D  88      -4.780  31.175 -47.207  1.00 24.99           C
ATOM   5987  C   CYS D  88      -3.659  31.857 -46.437  1.00 24.86           C
ATOM   5988  O   CYS D  88      -2.475  31.721 -46.765  1.00 22.65           O
ATOM   5989  CB  CYS D  88      -5.270  29.931 -46.453  1.00 22.01           C
ATOM   5990  SG  CYS D  88      -4.051  28.646 -46.175  1.00 29.76           S
ATOM   5991  N   GLN D  89      -4.044  32.631 -45.426  1.00 22.55           N
ATOM   5992  CA  GLN D  89      -3.042  33.280 -44.599  1.00 24.41           C
ATOM   5993  C   GLN D  89      -3.595  33.422 -43.188  1.00 23.44           C
ATOM   5994  O   GLN D  89      -4.706  33.927 -43.004  1.00 22.52           O
ATOM   5995  CB  GLN D  89      -2.656  34.655 -45.187  1.00 23.02           C
ATOM   5996  CG  GLN D  89      -1.545  35.343 -44.424  1.00 25.57           C
ATOM   5997  CD  GLN D  89      -1.925  36.689 -43.924  1.00 29.72           C
ATOM   5998  NE2 GLN D  89      -0.936  37.585 -43.798  1.00 31.44           N
ATOM   5999  OE1 GLN D  89      -3.099  36.943 -43.640  1.00 32.44           O
ATOM   6000  N   GLN D  90      -2.824  33.001 -42.199  1.00 20.65           N
ATOM   6001  CA  GLN D  90      -3.238  33.175 -40.811  1.00 25.27           C
ATOM   6002  C   GLN D  90      -2.804  34.555 -40.326  1.00 25.11           C
ATOM   6003  O   GLN D  90      -1.695  35.017 -40.628  1.00 24.22           O
ATOM   6004  CB  GLN D  90      -2.653  32.087 -39.900  1.00 24.32           C
ATOM   6005  CG  GLN D  90      -1.123  32.087 -39.747  1.00 24.63           C
ATOM   6006  CD  GLN D  90      -0.636  32.958 -38.627  1.00 23.34           C
ATOM   6007  NE2 GLN D  90       0.671  33.167 -38.585  1.00 24.43           N
ATOM   6008  OE1 GLN D  90      -1.419  33.461 -37.806  1.00 22.98           O
ATOM   6009  N   SER D  91      -3.696  35.222 -39.581  1.00 24.01           N
ATOM   6010  CA  SER D  91      -3.418  36.528 -38.999  1.00 22.70           C
ATOM   6011  C   SER D  91      -3.559  36.468 -37.490  1.00 24.55           C
ATOM   6012  O   SER D  91      -3.988  37.443 -36.861  1.00 22.93           O
ATOM   6013  CB  SER D  91      -4.339  37.609 -39.571  1.00 26.65           C
ATOM   6014  OG  SER D  91      -5.694  37.289 -39.289  1.00 26.47           O
ATOM   6015  N   TYR D  92      -3.269  35.299 -36.911  1.00 22.97           N
ATOM   6016  CA  TYR D  92      -3.478  35.079 -35.488  1.00 22.72           C
ATOM   6017  C   TYR D  92      -2.283  35.508 -34.656  1.00 24.14           C
ATOM   6018  O   TYR D  92      -2.461  36.163 -33.623  1.00 26.09           O
ATOM   6019  CB  TYR D  92      -3.802  33.602 -35.236  1.00 23.55           C
ATOM   6020  CG  TYR D  92      -4.069  33.214 -33.785  1.00 24.03           C
ATOM   6021  CD1 TYR D  92      -5.307  33.441 -33.210  1.00 23.58           C
ATOM   6022  CD2 TYR D  92      -3.113  32.548 -33.020  1.00 23.24           C
ATOM   6023  CE1 TYR D  92      -5.578  33.066 -31.907  1.00 24.19           C
ATOM   6024  CE2 TYR D  92      -3.383  32.178 -31.697  1.00 25.06           C
ATOM   6025  CZ  TYR D  92      -4.626  32.438 -31.151  1.00 21.21           C
ATOM   6026  OH  TYR D  92      -4.929  32.084 -29.858  1.00 24.37           O
ATOM   6027  N   SER D  93      -1.067  35.167 -35.078  1.00 22.98           N
ATOM   6028  CA  SER D  93       0.109  35.521 -34.295  1.00 26.63           C
```

[1935]

```
ATOM   6029  C   SER D  93       1.279  35.737 -35.249  1.00 27.92           C
ATOM   6030  O   SER D  93       1.504  34.953 -36.169  1.00 27.53           O
ATOM   6031  CB  SER D  93       0.424  34.477 -33.210  1.00 27.69           C
ATOM   6032  OG  SER D  93       0.911  33.263 -33.747  1.00 33.94           O
ATOM   6033  N   THR D  94       2.022  36.804 -35.016  1.00 27.38           N
ATOM   6034  CA  THR D  94       3.155  37.125 -35.844  1.00 26.65           C
ATOM   6035  C   THR D  94       4.238  36.089 -35.598  1.00 29.48           C
ATOM   6036  O   THR D  94       4.312  35.528 -34.509  1.00 30.26           O
ATOM   6037  CB  THR D  94       3.665  38.573 -35.541  1.00 30.73           C
ATOM   6038  CG2 THR D  94       3.838  38.785 -34.066  1.00 29.03           C
ATOM   6039  OG1 THR D  94       4.923  38.800 -36.195  1.00 33.85           O
ATOM   6040  N   PRO D  95       5.021  35.751 -36.634  1.00 30.17           N
ATOM   6041  CA  PRO D  95       4.923  36.240 -38.018  1.00 30.89           C
ATOM   6042  C   PRO D  95       3.712  35.659 -38.803  1.00 26.83           C
ATOM   6043  O   PRO D  95       3.397  34.482 -38.711  1.00 24.24           O
ATOM   6044  CB  PRO D  95       6.256  35.798 -38.638  1.00 32.28           C
ATOM   6045  CG  PRO D  95       6.732  34.660 -37.803  1.00 29.94           C
ATOM   6046  CD  PRO D  95       6.142  34.809 -36.445  1.00 30.78           C
ATOM   6047  N   LEU D  96       3.028  36.510 -39.548  1.00 24.59           N
ATOM   6048  CA  LEU D  96       1.900  36.061 -40.345  1.00 25.51           C
ATOM   6049  C   LEU D  96       2.422  35.220 -41.495  1.00 25.69           C
ATOM   6050  O   LEU D  96       3.489  35.511 -42.041  1.00 29.53           O
ATOM   6051  CB  LEU D  96       1.077  37.255 -40.841  1.00 22.14           C
ATOM   6052  CG  LEU D  96       0.536  38.179 -39.720  1.00 26.84           C
ATOM   6053  CD1 LEU D  96      -0.501  39.176 -40.234  1.00 28.82           C
ATOM   6054  CD2 LEU D  96      -0.016  37.451 -38.479  1.00 24.87           C
ATOM   6055  N   THR D  97       1.781  34.087 -41.746  1.00 24.77           N
ATOM   6056  CA  THR D  97       2.258  33.167 -42.763  1.00 23.27           C
ATOM   6057  C   THR D  97       1.150  32.798 -43.733  1.00 25.48           C
ATOM   6058  O   THR D  97      -0.000  32.625 -43.324  1.00 24.28           O
ATOM   6059  CB  THR D  97       2.794  31.922 -42.112  1.00 27.84           C
ATOM   6060  CG2 THR D  97       4.145  32.238 -41.458  1.00 25.36           C
ATOM   6061  OG1 THR D  97       1.847  31.488 -41.124  1.00 29.96           O
ATOM   6062  N   PHE D  98       1.515  32.635 -45.006  1.00 23.84           N
ATOM   6063  CA  PHE D  98       0.628  32.165 -46.056  1.00 23.22           C
ATOM   6064  C   PHE D  98       0.811  30.664 -46.236  1.00 23.32           C
ATOM   6065  O   PHE D  98       1.884  30.114 -45.975  1.00 24.01           O
ATOM   6066  CB  PHE D  98       0.935  32.841 -47.401  1.00 23.99           C
ATOM   6067  CG  PHE D  98       0.526  34.295 -47.491  1.00 21.68           C
ATOM   6068  CD1 PHE D  98       1.415  35.297 -47.137  1.00 20.37           C
ATOM   6069  CD2 PHE D  98      -0.705  34.650 -48.021  1.00 21.01           C
ATOM   6070  CE1 PHE D  98       1.069  36.647 -47.257  1.00 20.31           C
ATOM   6071  CE2 PHE D  98      -1.056  35.988 -48.145  1.00 23.50           C
ATOM   6072  CZ  PHE D  98      -0.167  36.989 -47.759  1.00 19.43           C
ATOM   6073  N   GLY D  99      -0.249  30.000 -46.671  1.00 22.33           N
ATOM   6074  CA  GLY D  99      -0.085  28.708 -47.280  1.00 22.91           C
ATOM   6075  C   GLY D  99       0.594  28.849 -48.632  1.00 25.41           C
ATOM   6076  O   GLY D  99       0.730  29.940 -49.183  1.00 24.30           O
ATOM   6077  N   GLN D 100       0.998  27.703 -49.201  1.00 26.05           N
ATOM   6078  CA  GLN D 100       1.831  27.675 -50.404  1.00 24.06           C
ATOM   6079  C   GLN D 100       1.061  27.945 -51.695  1.00 25.46           C
ATOM   6080  O   GLN D 100       1.682  28.095 -52.752  1.00 24.91           O
ATOM   6081  CB  GLN D 100       2.548  26.325 -50.505  1.00 23.97           C
ATOM   6082  CG  GLN D 100       1.719  25.179 -51.148  1.00 30.21           C
ATOM   6083  CD  GLN D 100       0.796  24.407 -50.177  1.00 33.43           C
ATOM   6084  NE2 GLN D 100       0.282  23.274 -50.653  1.00 30.69           N
ATOM   6085  OE1 GLN D 100       0.541  24.826 -49.029  1.00 30.23           O
ATOM   6086  N   GLY D 101      -0.260  28.021 -51.645  1.00 25.32           N
ATOM   6087  CA  GLY D 101      -1.036  28.274 -52.836  1.00 23.68           C
ATOM   6088  C   GLY D 101      -1.584  27.018 -53.463  1.00 24.93           C
ATOM   6089  O   GLY D 101      -0.963  25.958 -53.427  1.00 25.05           O
ATOM   6090  N   THR D 102      -2.781  27.131 -54.017  1.00 23.17           N
ATOM   6091  CA  THR D 102      -3.444  26.057 -54.740  1.00 25.76           C
ATOM   6092  C   THR D 102      -3.842  26.634 -56.083  1.00 25.10           C
ATOM   6093  O   THR D 102      -4.637  27.586 -56.132  1.00 24.30           O
ATOM   6094  CB  THR D 102      -4.684  25.581 -53.998  1.00 26.03           C
ATOM   6095  CG2 THR D 102      -5.456  24.538 -54.799  1.00 30.31           C
ATOM   6096  OG1 THR D 102      -4.287  25.016 -52.741  1.00 27.44           O
```

[1936]

```
ATOM   6097  N   LYS D 103      -3.268  26.115 -57.165  1.00 20.67           N
ATOM   6098  CA  LYS D 103      -3.639  26.598 -58.484  1.00 22.78           C
ATOM   6099  C   LYS D 103      -4.818  25.788 -58.982  1.00 26.14           C
ATOM   6100  O   LYS D 103      -4.741  24.557 -59.057  1.00 27.29           O
ATOM   6101  CB  LYS D 103      -2.487  26.499 -59.478  1.00 27.05           C
ATOM   6102  CG  LYS D 103      -2.860  27.046 -60.856  1.00 27.97           C
ATOM   6103  CD  LYS D 103      -1.686  26.982 -61.808  1.00 30.78           C
ATOM   6104  CE  LYS D 103      -1.918  27.871 -62.997  1.00 34.58           C
ATOM   6105  NZ  LYS D 103      -0.904  27.529 -64.018  1.00 40.43           N
ATOM   6106  N   VAL D 104      -5.896  26.476 -59.320  1.00 23.87           N
ATOM   6107  CA  VAL D 104      -7.059  25.864 -59.936  1.00 25.28           C
ATOM   6108  C   VAL D 104      -6.969  26.136 -61.432  1.00 29.62           C
ATOM   6109  O   VAL D 104      -7.025  27.300 -61.857  1.00 29.22           O
ATOM   6110  CB  VAL D 104      -8.351  26.435 -59.348  1.00 24.83           C
ATOM   6111  CG1 VAL D 104      -9.583  25.894 -60.114  1.00 27.72           C
ATOM   6112  CG2 VAL D 104      -8.425  26.152 -57.853  1.00 22.35           C
ATOM   6113  N   GLU D 105      -6.806  25.090 -62.253  1.00 27.33           N
ATOM   6114  CA  GLU D 105      -6.819  25.284 -63.698  1.00 28.16           C
ATOM   6115  C   GLU D 105      -7.759  24.271 -64.319  1.00 30.39           C
ATOM   6116  O   GLU D 105      -8.201  23.327 -63.662  1.00 30.38           O
ATOM   6117  CB  GLU D 105      -5.418  25.192 -64.324  1.00 32.85           C
ATOM   6118  CG  GLU D 105      -5.306  25.682 -65.848  1.00 41.09           C
ATOM   6119  CD  GLU D 105      -6.277  26.839 -66.289  1.00 35.34           C
ATOM   6120  OE1 GLU D 105      -7.460  26.569 -66.599  1.00 37.02           O
ATOM   6121  OE2 GLU D 105      -5.856  28.007 -66.394  1.00 33.42           O
ATOM   6122  N   ILE D 106      -8.081  24.484 -65.599  1.00 30.49           N
ATOM   6123  CA  ILE D 106      -9.127  23.695 -66.236  1.00 32.59           C
ATOM   6124  C   ILE D 106      -8.591  22.329 -66.630  1.00 35.32           C
ATOM   6125  O   ILE D 106      -7.424  22.170 -67.016  1.00 34.48           O
ATOM   6126  CB  ILE D 106      -9.738  24.429 -67.443  1.00 33.13           C
ATOM   6127  CG1 ILE D 106     -11.015  23.700 -67.847  1.00 32.14           C
ATOM   6128  CG2 ILE D 106      -8.776  24.474 -68.613  1.00 31.51           C
ATOM   6129  CD1 ILE D 106     -11.850  24.452 -68.760  1.00 30.57           C
ATOM   6130  N   LYS D 107      -9.475  21.334 -66.515  1.00 37.90           N
ATOM   6131  CA  LYS D 107      -9.145  19.959 -66.848  1.00 34.22           C
ATOM   6132  C   LYS D 107      -8.645  19.864 -68.280  1.00 34.70           C
ATOM   6133  O   LYS D 107      -9.078  20.613 -69.165  1.00 30.36           O
ATOM   6134  CB  LYS D 107     -10.363  19.054 -66.636  1.00 36.90           C
ATOM   6135  CG  LYS D 107      -9.956  17.591 -66.377  1.00 47.31           C
ATOM   6136  CD  LYS D 107     -11.084  16.673 -65.882  1.00 44.71           C
ATOM   6137  CE  LYS D 107     -10.527  15.311 -65.459  1.00 45.76           C
ATOM   6138  NZ  LYS D 107      -9.082  15.107 -65.809  1.00 48.25           N
ATOM   6139  O   ARG D 108      -9.131  17.777 -70.576  1.00 32.52           O
ATOM   6140  N   ARG D 108      -7.689  18.955 -68.487  1.00 42.55           N
ATOM   6141  CA  ARG D 108      -7.078  18.757 -69.794  1.00 34.54           C
ATOM   6142  C   ARG D 108      -8.164  18.506 -70.829  1.00 34.71           C
ATOM   6143  CB  ARG D 108      -6.111  17.574 -69.722  1.00 33.44           C
ATOM   6144  CG  ARG D 108      -4.932  17.614 -70.666  1.00 33.23           C
ATOM   6145  CD  ARG D 108      -4.244  16.245 -70.669  1.00 36.16           C
ATOM   6146  NE  ARG D 108      -3.266  16.025 -69.592  1.00 35.10           N
ATOM   6147  CZ  ARG D 108      -2.701  14.847 -69.312  1.00 32.43           C
ATOM   6148  NH1 ARG D 108      -3.008  13.740 -70.008  1.00 32.77           N
ATOM   6149  NH2 ARG D 108      -1.815  14.773 -68.331  1.00 34.29           N
ATOM   6150  O   GLY D 109     -11.264  19.754 -73.502  1.00 35.43           O
ATOM   6151  N   GLY D 109      -8.020  19.143 -71.988  1.00 34.08           N
ATOM   6152  CA  GLY D 109      -9.051  19.048 -73.000  1.00 33.38           C
ATOM   6153  C   GLY D 109     -10.324  19.810 -72.695  1.00 34.42           C
ATOM   6154  O   GLY D 110     -10.518  23.256 -72.164  1.00 34.48           O
ATOM   6155  N   GLY D 110     -10.389  20.527 -71.549  1.00 35.88           N
ATOM   6156  CA  GLY D 110     -11.572  21.298 -71.213  1.00 32.13           C
ATOM   6157  C   GLY D 110     -11.562  22.696 -71.810  1.00 31.87           C
ATOM   6158  O   GLY D 111     -14.481  25.316 -70.898  1.00 28.52           O
ATOM   6159  N   GLY D 111     -12.764  23.265 -71.901  1.00 27.93           N
ATOM   6160  CA  GLY D 111     -13.014  24.509 -72.594  1.00 26.86           C
ATOM   6161  C   GLY D 111     -13.558  25.577 -71.671  1.00 26.65           C
ATOM   6162  O   SER D 112     -11.793  29.172 -71.939  1.00 25.31           O
ATOM   6163  N   SER D 112     -12.954  26.759 -71.674  1.00 26.51           N
ATOM   6164  CA  SER D 112     -13.395  27.822 -70.787  1.00 26.34           C
```

[1937]

```
ATOM   6165  C   SER D 112     -12.842  29.141 -71.290  1.00 24.39           C
ATOM   6166  CB  SER D 112     -12.918  27.583 -69.358  1.00 26.33           C
ATOM   6167  OG  SER D 112     -12.910  28.793 -68.627  1.00 32.26           O
ATOM   6168  O   GLY D 113     -14.877  32.924 -70.515  1.00 24.80           O
ATOM   6169  N   GLY D 113     -13.562  30.222 -70.992  1.00 24.75           N
ATOM   6170  CA  GLY D 113     -13.110  31.552 -71.353  1.00 22.54           C
ATOM   6171  C   GLY D 113     -13.666  32.679 -70.511  1.00 23.36           C
ATOM   6172  O   GLY D 114     -12.302  35.813 -70.943  1.00 25.47           O
ATOM   6173  N   GLY D 114     -12.797  33.408 -69.816  1.00 25.87           N
ATOM   6174  CA  GLY D 114     -13.193  34.593 -69.078  1.00 25.76           C
ATOM   6175  C   GLY D 114     -12.918  35.852 -69.884  1.00 26.25           C
ATOM   6176  O   SER D 115     -11.587  40.014 -70.260  1.00 27.38           O
ATOM   6177  N   SER D 115     -13.411  36.989 -69.384  1.00 27.59           N
ATOM   6178  CA  SER D 115     -13.205  38.242 -70.116  1.00 27.78           C
ATOM   6179  C   SER D 115     -11.873  38.910 -69.770  1.00 28.27           C
ATOM   6180  CB  SER D 115     -14.365  39.217 -69.877  1.00 29.15           C
ATOM   6181  OG  SER D 115     -14.510  39.488 -68.505  1.00 33.25           O
ATOM   6182  O   GLY D 116     -10.864  39.530 -66.562  1.00 34.89           O
ATOM   6183  N   GLY D 116     -11.052  38.258 -68.960  1.00 27.95           N
ATOM   6184  CA  GLY D 116      -9.770  38.795 -68.573  1.00 29.12           C
ATOM   6185  C   GLY D 116      -9.932  39.688 -67.356  1.00 32.10           C
ATOM   6186  O   GLY D 117      -8.456  40.007 -64.428  1.00 30.98           O
ATOM   6187  N   GLY D 117      -9.031  40.647 -67.204  1.00 31.36           N
ATOM   6188  CA  GLY D 117      -9.138  41.580 -66.113  1.00 29.12           C
ATOM   6189  C   GLY D 117      -8.402  41.165 -64.868  1.00 31.49           C
ATOM   6190  O   CYS D 118      -8.504  43.891 -62.370  1.00 25.00           O
ATOM   6191  N   CYS D 118      -7.721  42.133 -64.295  1.00 28.10           N
ATOM   6192  CA  CYS D 118      -7.102  42.063 -63.006  1.00 26.50           C
ATOM   6193  C   CYS D 118      -7.884  42.892 -62.007  1.00 24.94           C
ATOM   6194  CB  CYS D 118      -5.674  42.600 -63.079  1.00 29.17           C
ATOM   6195  SG  CYS D 118      -4.503  41.513 -63.855  1.00 34.65           S
ATOM   6196  O   PRO D 119      -6.605  44.836 -59.901  1.00 26.11           O
ATOM   6197  N   PRO D 119      -7.853  42.524 -60.731  1.00 24.31           N
ATOM   6198  CA  PRO D 119      -8.489  43.363 -59.733  1.00 24.83           C
ATOM   6199  C   PRO D 119      -7.828  44.707 -59.675  1.00 26.70           C
ATOM   6200  CB  PRO D 119      -8.285  42.567 -58.433  1.00 24.71           C
ATOM   6201  CG  PRO D 119      -7.206  41.629 -58.706  1.00 28.06           C
ATOM   6202  CD  PRO D 119      -7.283  41.301 -60.163  1.00 22.94           C
ATOM   6203  O   PRO D 120      -7.061  46.646 -57.091  1.00 32.35           O
ATOM   6204  N   PRO D 120      -8.577  45.772 -59.356  1.00 28.15           N
ATOM   6205  CA  PRO D 120      -7.984  47.106 -59.248  1.00 34.11           C
ATOM   6206  C   PRO D 120      -6.887  47.147 -58.201  1.00 30.15           C
ATOM   6207  CB  PRO D 120      -9.167  47.990 -58.831  1.00 36.18           C
ATOM   6208  CG  PRO D 120     -10.379  47.193 -59.079  1.00 29.49           C
ATOM   6209  CD  PRO D 120     -10.012  45.776 -59.031  1.00 29.26           C
ATOM   6210  O   CYS D 121      -4.317  49.960 -58.790  1.00 29.13           O
ATOM   6211  N   CYS D 121      -5.778  47.800 -58.532  1.00 23.83           N
ATOM   6212  CA  CYS D 121      -4.704  47.944 -57.559  1.00 28.07           C
ATOM   6213  C   CYS D 121      -4.057  49.302 -57.783  1.00 28.70           C
ATOM   6214  CB  CYS D 121      -3.656  46.833 -57.698  1.00 25.01           C
ATOM   6215  SG  CYS D 121      -2.857  46.766 -59.346  1.00 28.83           S
ATOM   6216  O   GLY D 122      -4.219  52.340 -56.401  1.00 28.81           O
ATOM   6217  N   GLY D 122      -3.209  49.717 -56.841  1.00 25.01           N
ATOM   6218  CA  GLY D 122      -2.418  50.922 -57.056  1.00 27.85           C
ATOM   6219  C   GLY D 122      -3.302  52.136 -57.194  1.00 28.72           C
ATOM   6220  O   GLY D 123      -5.829  54.885 -59.490  1.00 42.60           O
ATOM   6221  N   GLY D 123      -3.035  52.958 -58.215  1.00 32.94           N
ATOM   6222  CA  GLY D 123      -3.818  54.155 -58.463  1.00 34.66           C
ATOM   6223  C   GLY D 123      -5.044  53.943 -59.316  1.00 39.59           C
ATOM   6224  O   SER D 124      -8.280  52.431 -59.253  1.00 40.57           O
ATOM   6225  N   SER D 124      -5.241  52.710 -59.794  1.00 42.22           N
ATOM   6226  CA  SER D 124      -6.331  52.309 -60.691  1.00 38.75           C
ATOM   6227  C   SER D 124      -7.556  51.730 -59.969  1.00 40.64           C
ATOM   6228  CB  SER D 124      -5.804  51.272 -61.695  1.00 35.66           C
ATOM   6229  N   GLU D 127     -10.666  57.270 -55.531  1.00 43.78           N
ATOM   6230  CA  GLU D 127     -10.866  56.190 -54.565  1.00 40.88           C
ATOM   6231  C   GLU D 127      -9.577  55.977 -53.768  1.00 40.07           C
ATOM   6232  O   GLU D 127      -8.664  56.839 -53.795  1.00 38.51           O
```

[1938]

```
ATOM   6233  CB  GLU D 127     -11.292  54.898 -55.275  1.00 34.05           C
ATOM   6234  N   VAL D 128      -9.470  54.821 -53.097  1.00 34.56           N
ATOM   6235  CA  VAL D 128      -8.274  54.540 -52.314  1.00 31.47           C
ATOM   6236  C   VAL D 128      -7.150  54.190 -53.279  1.00 33.62           C
ATOM   6237  O   VAL D 128      -7.347  53.427 -54.238  1.00 29.85           O
ATOM   6238  CB  VAL D 128      -8.532  53.395 -51.320  1.00 31.18           C
ATOM   6239  CG1 VAL D 128      -7.223  52.805 -50.818  1.00 26.76           C
ATOM   6240  CG2 VAL D 128      -9.363  53.874 -50.147  1.00 27.43           C
ATOM   6241  N   GLN D 129      -5.950  54.716 -53.004  1.00 27.93           N
ATOM   6242  CA  GLN D 129      -4.808  54.512 -53.872  1.00 27.59           C
ATOM   6243  C   GLN D 129      -3.577  54.204 -53.047  1.00 25.28           C
ATOM   6244  O   GLN D 129      -3.356  54.818 -52.000  1.00 25.07           O
ATOM   6245  CB  GLN D 129      -4.559  55.745 -54.748  1.00 30.73           C
ATOM   6246  CG  GLN D 129      -5.727  56.068 -55.637  1.00 33.71           C
ATOM   6247  CD  GLN D 129      -5.421  57.181 -56.594  1.00 41.21           C
ATOM   6248  NE2 GLN D 129      -6.036  57.134 -57.787  1.00 43.39           N
ATOM   6249  OE1 GLN D 129      -4.629  58.082 -56.275  1.00 46.36           O
ATOM   6250  N   LEU D 130      -2.771  53.271 -53.546  1.00 23.27           N
ATOM   6251  CA  LEU D 130      -1.472  52.933 -52.970  1.00 26.23           C
ATOM   6252  C   LEU D 130      -0.476  52.887 -54.115  1.00 27.50           C
ATOM   6253  O   LEU D 130      -0.529  51.974 -54.943  1.00 27.92           O
ATOM   6254  CB  LEU D 130      -1.486  51.592 -52.246  1.00 25.40           C
ATOM   6255  CG  LEU D 130      -2.269  51.433 -50.952  1.00 27.88           C
ATOM   6256  CD1 LEU D 130      -2.165  49.993 -50.501  1.00 23.81           C
ATOM   6257  CD2 LEU D 130      -1.708  52.375 -49.912  1.00 25.35           C
ATOM   6258  N   LEU D 131       0.414  53.872 -54.184  1.00 26.99           N
ATOM   6259  CA  LEU D 131       1.339  53.990 -55.301  1.00 26.73           C
ATOM   6260  C   LEU D 131       2.724  53.536 -54.852  1.00 27.01           C
ATOM   6261  O   LEU D 131       3.323  54.166 -53.977  1.00 27.00           O
ATOM   6262  CB  LEU D 131       1.405  55.436 -55.773  1.00 25.66           C
ATOM   6263  CG  LEU D 131       0.073  55.935 -56.296  1.00 28.83           C
ATOM   6264  CD1 LEU D 131       0.227  57.292 -56.962  1.00 36.40           C
ATOM   6265  CD2 LEU D 131      -0.610  54.901 -57.164  1.00 31.05           C
ATOM   6266  N   GLU D 132       3.272  52.514 -55.503  1.00 25.53           N
ATOM   6267  CA  GLU D 132       4.582  52.016 -55.103  1.00 24.08           C
ATOM   6268  C   GLU D 132       5.700  52.584 -55.969  1.00 28.50           C
ATOM   6269  O   GLU D 132       5.485  53.024 -57.102  1.00 30.14           O
ATOM   6270  CB  GLU D 132       4.629  50.495 -55.172  1.00 23.74           C
ATOM   6271  CG  GLU D 132       3.705  49.846 -54.218  1.00 23.30           C
ATOM   6272  CD  GLU D 132       3.935  48.384 -54.151  1.00 25.38           C
ATOM   6273  OE1 GLU D 132       5.095  47.976 -53.859  1.00 24.02           O
ATOM   6274  OE2 GLU D 132       2.957  47.631 -54.362  1.00 28.32           O
ATOM   6275  N   SER D 133       6.919  52.531 -55.429  1.00 29.37           N
ATOM   6276  CA  SER D 133       8.104  52.966 -56.165  1.00 28.56           C
ATOM   6277  C   SER D 133       9.338  52.572 -55.375  1.00 27.52           C
ATOM   6278  O   SER D 133       9.266  52.258 -54.184  1.00 25.25           O
ATOM   6279  CB  SER D 133       8.119  54.469 -56.446  1.00 29.25           C
ATOM   6280  OG  SER D 133       8.287  55.223 -55.267  1.00 30.00           O
ATOM   6281  N   GLY D 134      10.452  52.495 -56.088  1.00 30.67           N
ATOM   6282  CA  GLY D 134      11.737  52.189 -55.501  1.00 27.49           C
ATOM   6283  C   GLY D 134      12.330  50.900 -56.013  1.00 27.58           C
ATOM   6284  O   GLY D 134      13.496  50.613 -55.713  1.00 32.51           O
ATOM   6285  N   GLY D 135      11.583  50.075 -56.733  1.00 27.85           N
ATOM   6286  CA  GLY D 135      12.136  48.827 -57.202  1.00 29.85           C
ATOM   6287  C   GLY D 135      13.173  49.060 -58.284  1.00 29.15           C
ATOM   6288  O   GLY D 135      13.347  50.162 -58.812  1.00 30.74           O
ATOM   6289  N   GLY D 136      13.804  47.975 -58.689  1.00 25.69           N
ATOM   6290  CA  GLY D 136      14.760  48.034 -59.771  1.00 24.39           C
ATOM   6291  C   GLY D 136      15.867  47.038 -59.543  1.00 28.94           C
ATOM   6292  O   GLY D 136      15.778  46.174 -58.678  1.00 30.94           O
ATOM   6293  N   LEU D 137      16.941  47.206 -60.306  1.00 30.12           N
ATOM   6294  CA  LEU D 137      18.073  46.306 -60.174  1.00 29.44           C
ATOM   6295  C   LEU D 137      18.908  46.740 -58.986  1.00 29.04           C
ATOM   6296  O   LEU D 137      19.042  47.932 -58.712  1.00 32.75           O
ATOM   6297  CB  LEU D 137      18.904  46.317 -61.443  1.00 29.03           C
ATOM   6298  CG  LEU D 137      18.064  45.990 -62.666  1.00 30.45           C
ATOM   6299  CD1 LEU D 137      18.922  45.959 -63.910  1.00 30.01           C
ATOM   6300  CD2 LEU D 137      17.379  44.672 -62.466  1.00 29.80           C
```

[1939]

```
ATOM   6301  N   VAL D 138      19.402  45.766 -58.229  1.00 30.42           N
ATOM   6302  CA  VAL D 138      20.211  46.038 -57.048  1.00 30.47           C
ATOM   6303  C   VAL D 138      21.259  44.944 -56.942  1.00 30.68           C
ATOM   6304  O   VAL D 138      21.048  43.815 -57.384  1.00 33.49           O
ATOM   6305  CB  VAL D 138      19.345  46.152 -55.766  1.00 31.74           C
ATOM   6306  CG1 VAL D 138      18.556  44.871 -55.529  1.00 30.28           C
ATOM   6307  CG2 VAL D 138      20.188  46.546 -54.543  1.00 28.08           C
ATOM   6308  N   GLN D 139      22.362  45.269 -56.327  1.00 33.82           N
ATOM   6309  CA  GLN D 139      23.523  44.404 -56.259  1.00 32.46           C
ATOM   6310  C   GLN D 139      23.373  43.390 -55.122  1.00 33.96           C
ATOM   6311  O   GLN D 139      22.734  43.680 -54.110  1.00 33.31           O
ATOM   6312  CB  GLN D 139      24.761  45.274 -56.001  1.00 34.49           C
ATOM   6313  CG  GLN D 139      24.890  46.564 -56.911  1.00 39.99           C
ATOM   6314  CD  GLN D 139      23.885  47.747 -56.571  1.00 41.57           C
ATOM   6315  NE2 GLN D 139      23.861  48.768 -57.424  1.00 43.10           N
ATOM   6316  OE1 GLN D 139      23.165  47.720 -55.569  1.00 41.17           O
ATOM   6317  N   PRO D 140      23.932  42.182 -55.268  1.00 33.07           N
ATOM   6318  CA  PRO D 140      23.898  41.219 -54.167  1.00 31.57           C
ATOM   6319  C   PRO D 140      24.523  41.854 -52.938  1.00 32.99           C
ATOM   6320  O   PRO D 140      25.548  42.528 -53.031  1.00 35.11           O
ATOM   6321  CB  PRO D 140      24.725  40.044 -54.703  1.00 30.94           C
ATOM   6322  CG  PRO D 140      24.533  40.092 -56.107  1.00 31.51           C
ATOM   6323  CD  PRO D 140      24.520  41.567 -56.464  1.00 33.68           C
ATOM   6324  N   GLY D 141      23.857  41.713 -51.794  1.00 31.50           N
ATOM   6325  CA  GLY D 141      24.367  42.324 -50.581  1.00 32.25           C
ATOM   6326  C   GLY D 141      24.126  43.809 -50.463  1.00 29.90           C
ATOM   6327  O   GLY D 141      24.606  44.424 -49.502  1.00 33.71           O
ATOM   6328  N   GLY D 142      23.455  44.421 -51.427  1.00 31.72           N
ATOM   6329  CA  GLY D 142      23.267  45.853 -51.436  1.00 31.09           C
ATOM   6330  C   GLY D 142      22.057  46.270 -50.625  1.00 34.64           C
ATOM   6331  O   GLY D 142      21.513  45.507 -49.819  1.00 36.52           O
ATOM   6332  N   SER D 143      21.585  47.485 -50.899  1.00 32.65           N
ATOM   6333  CA  SER D 143      20.577  48.113 -50.057  1.00 32.40           C
ATOM   6334  C   SER D 143      19.584  48.846 -50.959  1.00 32.45           C
ATOM   6335  O   SER D 143      19.956  49.377 -52.004  1.00 33.52           O
ATOM   6336  CB  SER D 143      21.262  49.053 -49.046  1.00 34.42           C
ATOM   6337  OG  SER D 143      20.383  50.020 -48.520  1.00 41.42           O
ATOM   6338  N   LEU D 144      18.340  48.976 -50.502  1.00 33.37           N
ATOM   6339  CA  LEU D 144      17.317  49.598 -51.336  1.00 31.26           C
ATOM   6340  C   LEU D 144      16.140  49.996 -50.448  1.00 34.84           C
ATOM   6341  O   LEU D 144      15.920  49.377 -49.399  1.00 34.47           O
ATOM   6342  CB  LEU D 144      16.901  48.626 -52.442  1.00 32.23           C
ATOM   6343  CG  LEU D 144      15.971  49.089 -53.555  1.00 35.59           C
ATOM   6344  CD1 LEU D 144      16.603  50.255 -54.317  1.00 33.70           C
ATOM   6345  CD2 LEU D 144      15.658  47.918 -54.513  1.00 32.56           C
ATOM   6346  N   ARG D 145      15.381  51.028 -50.856  1.00 30.88           N
ATOM   6347  CA  ARG D 145      14.245  51.485 -50.051  1.00 28.41           C
ATOM   6348  C   ARG D 145      13.004  51.531 -50.923  1.00 31.60           C
ATOM   6349  O   ARG D 145      12.997  52.218 -51.954  1.00 31.65           O
ATOM   6350  CB  ARG D 145      14.467  52.880 -49.461  1.00 27.79           C
ATOM   6351  CG  ARG D 145      13.632  53.105 -48.230  1.00 31.05           C
ATOM   6352  CD  ARG D 145      13.817  54.501 -47.633  1.00 32.57           C
ATOM   6353  NE  ARG D 145      12.693  55.043 -46.872  1.00 45.08           N
ATOM   6354  CZ  ARG D 145      12.900  55.688 -45.721  1.00 45.43           C
ATOM   6355  NH1 ARG D 145      14.164  55.821 -45.277  1.00 47.54           N
ATOM   6356  NH2 ARG D 145      11.876  56.186 -45.014  1.00 48.31           N
ATOM   6357  N   LEU D 146      11.970  50.792 -50.535  1.00 29.04           N
ATOM   6358  CA  LEU D 146      10.719  50.888 -51.264  1.00 27.07           C
ATOM   6359  C   LEU D 146       9.810  51.919 -50.619  1.00 24.14           C
ATOM   6360  O   LEU D 146       9.827  52.106 -49.401  1.00 26.62           O
ATOM   6361  CB  LEU D 146      10.015  49.544 -51.323  1.00 25.09           C
ATOM   6362  CG  LEU D 146      10.871  48.410 -51.846  1.00 26.61           C
ATOM   6363  CD1 LEU D 146      10.066  47.130 -51.828  1.00 25.40           C
ATOM   6364  CD2 LEU D 146      11.330  48.748 -53.223  1.00 27.39           C
ATOM   6365  N   SER D 147       9.016  52.596 -51.447  1.00 23.20           N
ATOM   6366  CA  SER D 147       8.025  53.551 -50.962  1.00 25.31           C
ATOM   6367  C   SER D 147       6.641  53.179 -51.460  1.00 25.18           C
ATOM   6368  O   SER D 147       6.470  52.587 -52.516  1.00 23.27           O
```

[1940]

```
ATOM   6369  CB  SER D 147       8.310  54.999 -51.401  1.00 25.57           C
ATOM   6370  OG  SER D 147       9.582  55.445 -50.967  1.00 32.40           O
ATOM   6371  N   CYS D 148       5.650  53.616 -50.708  1.00 26.65           N
ATOM   6372  CA  CYS D 148       4.258  53.305 -50.995  1.00 25.02           C
ATOM   6373  C   CYS D 148       3.491  54.532 -50.550  1.00 26.88           C
ATOM   6374  O   CYS D 148       3.375  54.772 -49.340  1.00 27.23           O
ATOM   6375  CB  CYS D 148       3.819  52.054 -50.229  1.00 26.59           C
ATOM   6376  SG  CYS D 148       2.057  51.610 -50.364  1.00 31.48           S
ATOM   6377  N   ALA D 149       3.032  55.331 -51.504  1.00 22.26           N
ATOM   6378  CA  ALA D 149       2.348  56.580 -51.212  1.00 24.47           C
ATOM   6379  C   ALA D 149       0.848  56.335 -51.157  1.00 24.98           C
ATOM   6380  O   ALA D 149       0.269  55.821 -52.112  1.00 26.17           O
ATOM   6381  CB  ALA D 149       2.649  57.632 -52.276  1.00 27.08           C
ATOM   6382  N   ALA D 150       0.227  56.683 -50.041  1.00 24.17           N
ATOM   6383  CA  ALA D 150      -1.185  56.421 -49.832  1.00 25.08           C
ATOM   6384  C   ALA D 150      -2.001  57.699 -49.986  1.00 24.55           C
ATOM   6385  O   ALA D 150      -1.561  58.792 -49.627  1.00 25.58           O
ATOM   6386  CB  ALA D 150      -1.413  55.812 -48.450  1.00 25.43           C
ATOM   6387  N   SER D 151      -3.207  57.547 -50.506  1.00 22.28           N
ATOM   6388  CA  SER D 151      -4.153  58.645 -50.547  1.00 23.48           C
ATOM   6389  C   SER D 151      -5.546  58.037 -50.601  1.00 26.94           C
ATOM   6390  O   SER D 151      -5.716  56.846 -50.887  1.00 27.23           O
ATOM   6391  CB  SER D 151      -3.893  59.576 -51.737  1.00 28.46           C
ATOM   6392  OG  SER D 151      -4.049  58.874 -52.964  1.00 30.43           O
ATOM   6393  N   GLY D 152      -6.538  58.855 -50.260  1.00 28.89           N
ATOM   6394  CA  GLY D 152      -7.914  58.410 -50.282  1.00 27.88           C
ATOM   6395  C   GLY D 152      -8.432  57.843 -48.978  1.00 26.22           C
ATOM   6396  O   GLY D 152      -9.570  57.358 -48.944  1.00 29.77           O
ATOM   6397  N   PHE D 153      -7.637  57.850 -47.914  1.00 23.73           N
ATOM   6398  CA  PHE D 153      -8.104  57.339 -46.638  1.00 22.86           C
ATOM   6399  C   PHE D 153      -7.236  57.945 -45.549  1.00 23.09           C
ATOM   6400  O   PHE D 153      -6.209  58.557 -45.832  1.00 24.27           O
ATOM   6401  CB  PHE D 153      -8.101  55.807 -46.622  1.00 24.75           C
ATOM   6402  CG  PHE D 153      -6.744  55.180 -46.782  1.00 24.48           C
ATOM   6403  CD1 PHE D 153      -6.141  55.085 -48.026  1.00 27.19           C
ATOM   6404  CD2 PHE D 153      -6.100  54.635 -45.685  1.00 21.68           C
ATOM   6405  CE1 PHE D 153      -4.899  54.478 -48.167  1.00 24.36           C
ATOM   6406  CE2 PHE D 153      -4.863  54.043 -45.815  1.00 23.64           C
ATOM   6407  CZ  PHE D 153      -4.263  53.960 -47.050  1.00 26.31           C
ATOM   6408  N   THR D 154      -7.681  57.818 -44.297  1.00 23.79           N
ATOM   6409  CA  THR D 154      -6.915  58.337 -43.162  1.00 22.39           C
ATOM   6410  C   THR D 154      -5.790  57.343 -42.874  1.00 24.14           C
ATOM   6411  O   THR D 154      -5.959  56.361 -42.146  1.00 24.02           O
ATOM   6412  CB  THR D 154      -7.811  58.583 -41.953  1.00 24.93           C
ATOM   6413  CG2 THR D 154      -7.048  59.318 -40.859  1.00 23.83           C
ATOM   6414  OG1 THR D 154      -8.912  59.405 -42.355  1.00 23.97           O
ATOM   6415  N   PHE D 155      -4.624  57.629 -43.463  1.00 23.98           N
ATOM   6416  CA  PHE D 155      -3.488  56.713 -43.441  1.00 24.82           C
ATOM   6417  C   PHE D 155      -3.212  56.183 -42.048  1.00 24.56           C
ATOM   6418  O   PHE D 155      -3.104  54.967 -41.844  1.00 22.42           O
ATOM   6419  CB  PHE D 155      -2.245  57.427 -43.999  1.00 25.53           C
ATOM   6420  CG  PHE D 155      -1.052  56.530 -44.177  1.00 22.03           C
ATOM   6421  CD1 PHE D 155      -1.116  55.428 -44.999  1.00 24.00           C
ATOM   6422  CD2 PHE D 155       0.132  56.796 -43.521  1.00 23.22           C
ATOM   6423  CE1 PHE D 155      -0.023  54.581 -45.167  1.00 21.19           C
ATOM   6424  CE2 PHE D 155       1.243  55.967 -43.694  1.00 24.10           C
ATOM   6425  CZ  PHE D 155       1.158  54.856 -44.512  1.00 21.04           C
ATOM   6426  N   SER D 156      -3.163  57.075 -41.061  1.00 24.57           N
ATOM   6427  CA  SER D 156      -2.771  56.704 -39.710  1.00 22.52           C
ATOM   6428  C   SER D 156      -3.807  55.829 -39.009  1.00 24.92           C
ATOM   6429  O   SER D 156      -3.517  55.298 -37.933  1.00 25.02           O
ATOM   6430  CB  SER D 156      -2.497  57.969 -38.890  1.00 26.83           C
ATOM   6431  OG  SER D 156      -3.644  58.822 -38.807  1.00 25.68           O
ATOM   6432  N   SER D 157      -4.993  55.649 -39.591  1.00 24.40           N
ATOM   6433  CA  SER D 157      -6.004  54.787 -39.008  1.00 22.68           C
ATOM   6434  C   SER D 157      -5.855  53.338 -39.423  1.00 22.27           C
ATOM   6435  O   SER D 157      -6.703  52.516 -39.057  1.00 21.42           O
ATOM   6436  CB  SER D 157      -7.401  55.289 -39.376  1.00 24.50           C
```

[1941]

```
ATOM   6437  OG  SER D 157      -7.614  56.591 -38.837  1.00 26.47           O
ATOM   6438  N   TYR D 158      -4.789  52.997 -40.144  1.00 22.40           N
ATOM   6439  CA  TYR D 158      -4.644  51.669 -40.719  1.00 21.44           C
ATOM   6440  C   TYR D 158      -3.226  51.167 -40.536  1.00 21.40           C
ATOM   6441  O   TYR D 158      -2.273  51.868 -40.889  1.00 23.03           O
ATOM   6442  CB  TYR D 158      -4.985  51.647 -42.221  1.00 21.28           C
ATOM   6443  CG  TYR D 158      -6.404  52.046 -42.507  1.00 21.37           C
ATOM   6444  CD2 TYR D 158      -7.411  51.104 -42.562  1.00 22.97           C
ATOM   6445  CD1 TYR D 158      -6.742  53.377 -42.666  1.00 24.61           C
ATOM   6446  CE2 TYR D 158      -8.708  51.470 -42.805  1.00 24.80           C
ATOM   6447  CE1 TYR D 158      -8.034  53.756 -42.904  1.00 24.51           C
ATOM   6448  CZ  TYR D 158      -9.013  52.797 -42.974  1.00 24.71           C
ATOM   6449  OH  TYR D 158     -10.302  53.206 -43.215  1.00 28.61           O
ATOM   6450  N   ALA D 159      -3.095  49.952 -40.015  1.00 19.53           N
ATOM   6451  CA  ALA D 159      -1.841  49.226 -40.117  1.00 20.83           C
ATOM   6452  C   ALA D 159      -1.543  48.910 -41.579  1.00 21.19           C
ATOM   6453  O   ALA D 159      -2.431  48.916 -42.442  1.00 19.92           O
ATOM   6454  CB  ALA D 159      -1.901  47.943 -39.297  1.00 20.31           C
ATOM   6455  N   MET D 160      -0.263  48.662 -41.875  1.00 22.39           N
ATOM   6456  CA  MET D 160       0.163  48.417 -43.246  1.00 22.50           C
ATOM   6457  C   MET D 160       1.088  47.210 -43.299  1.00 19.30           C
ATOM   6458  O   MET D 160       1.648  46.796 -42.285  1.00 18.28           O
ATOM   6459  CB  MET D 160       0.853  49.643 -43.847  1.00 16.61           C
ATOM   6460  CG  MET D 160      -0.024  50.907 -43.879  1.00 23.51           C
ATOM   6461  SD  MET D 160      -1.274  50.849 -45.179  1.00 24.28           S
ATOM   6462  CE  MET D 160      -0.247  50.745 -46.635  1.00 22.16           C
ATOM   6463  N   SER D 161       1.254  46.657 -44.502  1.00 17.91           N
ATOM   6464  CA  SER D 161       2.017  45.434 -44.657  1.00 20.45           C
ATOM   6465  C   SER D 161       2.807  45.446 -45.960  1.00 21.57           C
ATOM   6466  O   SER D 161       2.446  46.131 -46.916  1.00 20.67           O
ATOM   6467  CB  SER D 161       1.075  44.223 -44.600  1.00 21.34           C
ATOM   6468  OG  SER D 161       1.807  43.018 -44.701  1.00 26.89           O
ATOM   6469  N   TRP D 162       3.909  44.691 -45.977  1.00 19.81           N
ATOM   6470  CA  TRP D 162       4.623  44.347 -47.196  1.00 21.86           C
ATOM   6471  C   TRP D 162       4.549  42.841 -47.404  1.00 20.10           C
ATOM   6472  O   TRP D 162       4.828  42.065 -46.495  1.00 20.74           O
ATOM   6473  CB  TRP D 162       6.090  44.777 -47.148  1.00 21.23           C
ATOM   6474  CG  TRP D 162       6.303  46.252 -47.183  1.00 21.78           C
ATOM   6475  CD1 TRP D 162       6.525  47.064 -46.116  1.00 24.03           C
ATOM   6476  CD2 TRP D 162       6.312  47.102 -48.341  1.00 22.22           C
ATOM   6477  CE2 TRP D 162       6.547  48.411 -47.894  1.00 22.72           C
ATOM   6478  CE3 TRP D 162       6.138  46.881 -49.711  1.00 22.43           C
ATOM   6479  NE1 TRP D 162       6.669  48.363 -46.531  1.00 23.45           N
ATOM   6480  CZ2 TRP D 162       6.612  49.506 -48.771  1.00 23.86           C
ATOM   6481  CZ3 TRP D 162       6.217  47.967 -50.581  1.00 21.90           C
ATOM   6482  CH2 TRP D 162       6.447  49.254 -50.108  1.00 24.67           C
ATOM   6483  N   VAL D 163       4.124  42.447 -48.603  1.00 23.52           N
ATOM   6484  CA  VAL D 163       4.073  41.009 -48.996  1.00 23.02           C
ATOM   6485  C   VAL D 163       4.843  40.879 -50.321  1.00 22.23           C
ATOM   6486  O   VAL D 163       4.602  41.692 -51.210  1.00 23.96           O
ATOM   6487  CB  VAL D 163       2.627  40.491 -49.089  1.00 21.78           C
ATOM   6488  CG1 VAL D 163       2.542  39.117 -49.732  1.00 22.32           C
ATOM   6489  CG2 VAL D 163       1.922  40.505 -47.745  1.00 21.98           C
ATOM   6490  N   ARG D 164       5.750  39.910 -50.413  1.00 22.60           N
ATOM   6491  CA  ARG D 164       6.571  39.719 -51.627  1.00 22.90           C
ATOM   6492  C   ARG D 164       6.174  38.453 -52.385  1.00 25.27           C
ATOM   6493  O   ARG D 164       5.531  37.571 -51.805  1.00 25.25           O
ATOM   6494  CB  ARG D 164       8.064  39.723 -51.315  1.00 22.62           C
ATOM   6495  CG  ARG D 164       8.595  38.463 -50.652  1.00 29.83           C
ATOM   6496  CD  ARG D 164      10.005  38.800 -50.238  1.00 29.30           C
ATOM   6497  NE  ARG D 164      10.740  37.700 -49.656  1.00 29.25           N
ATOM   6498  CZ  ARG D 164      11.946  37.820 -49.135  1.00 28.62           C
ATOM   6499  NH1 ARG D 164      12.544  38.997 -49.119  1.00 27.28           N
ATOM   6500  NH2 ARG D 164      12.545  36.766 -48.624  1.00 30.09           N
ATOM   6501  N   GLN D 165       6.494  38.426 -53.670  1.00 22.53           N
ATOM   6502  CA  GLN D 165       6.215  37.223 -54.477  1.00 23.77           C
ATOM   6503  C   GLN D 165       7.379  36.982 -55.428  1.00 24.23           C
ATOM   6504  O   GLN D 165       7.545  37.764 -56.370  1.00 25.35           O
```

[1942]

```
ATOM   6505  CB  GLN D 165       4.875  37.311 -55.191  1.00 25.85           C
ATOM   6506  CG  GLN D 165       4.643  36.164 -56.156  1.00 28.70           C
ATOM   6507  CD  GLN D 165       3.237  36.192 -56.688  1.00 27.31           C
ATOM   6508  NE2 GLN D 165       2.540  35.078 -56.543  1.00 24.25           N
ATOM   6509  OE1 GLN D 165       2.779  37.203 -57.208  1.00 28.55           O
ATOM   6510  N   ALA D 166       8.188  35.981 -55.126  1.00 22.93           N
ATOM   6511  CA  ALA D 166       9.276  35.599 -56.001  1.00 25.18           C
ATOM   6512  C   ALA D 166       8.735  35.143 -57.355  1.00 28.72           C
ATOM   6513  O   ALA D 166       7.612  34.632 -57.449  1.00 28.87           O
ATOM   6514  CB  ALA D 166      10.083  34.465 -55.380  1.00 25.94           C
ATOM   6515  N   PRO D 167       9.499  35.347 -58.423  1.00 32.59           N
ATOM   6516  CA  PRO D 167       9.023  34.940 -59.748  1.00 29.79           C
ATOM   6517  C   PRO D 167       8.556  33.493 -59.738  1.00 29.88           C
ATOM   6518  O   PRO D 167       9.287  32.611 -59.287  1.00 33.80           O
ATOM   6519  CB  PRO D 167      10.247  35.151 -60.641  1.00 29.79           C
ATOM   6520  CG  PRO D 167      11.072  36.176 -59.934  1.00 27.33           C
ATOM   6521  CD  PRO D 167      10.696  36.205 -58.483  1.00 30.41           C
ATOM   6522  N   GLY D 168       7.305  33.251 -60.128  1.00 31.11           N
ATOM   6523  CA  GLY D 168       6.828  31.881 -60.158  1.00 30.71           C
ATOM   6524  C   GLY D 168       6.659  31.198 -58.814  1.00 32.85           C
ATOM   6525  O   GLY D 168       6.470  29.981 -58.785  1.00 32.51           O
ATOM   6526  N   LYS D 169       6.731  31.922 -57.700  1.00 31.43           N
ATOM   6527  CA  LYS D 169       6.535  31.343 -56.377  1.00 30.82           C
ATOM   6528  C   LYS D 169       5.313  31.985 -55.710  1.00 28.25           C
ATOM   6529  O   LYS D 169       4.546  32.721 -56.340  1.00 24.13           O
ATOM   6530  CB  LYS D 169       7.811  31.502 -55.546  1.00 30.03           C
ATOM   6531  CG  LYS D 169       8.991  30.831 -56.236  1.00 34.99           C
ATOM   6532  CD  LYS D 169       8.747  29.322 -56.366  1.00 40.90           C
ATOM   6533  CE  LYS D 169       9.735  28.635 -57.339  1.00 46.06           C
ATOM   6534  NZ  LYS D 169      11.139  28.511 -56.848  1.00 47.95           N
ATOM   6535  N   GLY D 170       5.111  31.652 -54.441  1.00 26.54           N
ATOM   6536  CA  GLY D 170       3.910  32.024 -53.723  1.00 24.71           C
ATOM   6537  C   GLY D 170       4.009  33.386 -53.078  1.00 25.63           C
ATOM   6538  O   GLY D 170       5.026  34.074 -53.168  1.00 26.15           O
ATOM   6539  N   LEU D 171       2.903  33.792 -52.444  1.00 25.66           N
ATOM   6540  CA  LEU D 171       2.905  34.999 -51.628  1.00 22.81           C
ATOM   6541  C   LEU D 171       3.706  34.757 -50.349  1.00 23.66           C
ATOM   6542  O   LEU D 171       3.649  33.676 -49.753  1.00 25.39           O
ATOM   6543  CB  LEU D 171       1.475  35.419 -51.291  1.00 20.97           C
ATOM   6544  CG  LEU D 171       0.592  35.761 -52.489  1.00 21.35           C
ATOM   6545  CD1 LEU D 171      -0.827  36.077 -52.037  1.00 20.87           C
ATOM   6546  CD2 LEU D 171       1.188  36.945 -53.235  1.00 23.75           C
ATOM   6547  N   GLU D 172       4.480  35.754 -49.935  1.00 21.99           N
ATOM   6548  CA  GLU D 172       5.316  35.605 -48.752  1.00 24.95           C
ATOM   6549  C   GLU D 172       5.234  36.888 -47.944  1.00 23.39           C
ATOM   6550  O   GLU D 172       5.625  37.961 -48.429  1.00 24.43           O
ATOM   6551  CB  GLU D 172       6.763  35.296 -49.154  1.00 27.99           C
ATOM   6552  CG  GLU D 172       7.790  35.152 -48.036  1.00 29.62           C
ATOM   6553  CD  GLU D 172       9.203  34.876 -48.586  1.00 34.12           C
ATOM   6554  OE1 GLU D 172       9.368  34.922 -49.831  1.00 40.02           O
ATOM   6555  OE2 GLU D 172      10.129  34.560 -47.792  1.00 37.48           O
ATOM   6556  N   TRP D 173       4.733  36.773 -46.718  1.00 23.28           N
ATOM   6557  CA  TRP D 173       4.579  37.932 -45.847  1.00 22.27           C
ATOM   6558  C   TRP D 173       5.963  38.394 -45.396  1.00 23.42           C
ATOM   6559  O   TRP D 173       6.804  37.569 -45.029  1.00 23.03           O
ATOM   6560  CB  TRP D 173       3.695  37.566 -44.653  1.00 19.56           C
ATOM   6561  CG  TRP D 173       3.429  38.700 -43.688  1.00 21.36           C
ATOM   6562  CD1 TRP D 173       2.518  39.702 -43.832  1.00 22.16           C
ATOM   6563  CD2 TRP D 173       4.090  38.941 -42.441  1.00 23.11           C
ATOM   6564  CE2 TRP D 173       3.519  40.103 -41.882  1.00 23.79           C
ATOM   6565  CE3 TRP D 173       5.103  38.285 -41.739  1.00 24.43           C
ATOM   6566  NE1 TRP D 173       2.569  40.557 -42.757  1.00 22.69           N
ATOM   6567  CZ2 TRP D 173       3.937  40.627 -40.674  1.00 24.35           C
ATOM   6568  CZ3 TRP D 173       5.513  38.803 -40.522  1.00 24.74           C
ATOM   6569  CH2 TRP D 173       4.936  39.955 -40.004  1.00 26.00           C
ATOM   6570  N   VAL D 174       6.210  39.702 -45.467  1.00 20.33           N
ATOM   6571  CA  VAL D 174       7.504  40.291 -45.126  1.00 21.64           C
ATOM   6572  C   VAL D 174       7.451  41.041 -43.805  1.00 24.18           C
```

[1943]

```
ATOM   6573  O   VAL D 174       8.285  40.826 -42.927  1.00 24.24           O
ATOM   6574  CB  VAL D 174       8.010  41.208 -46.265  1.00 20.04           C
ATOM   6575  CG1 VAL D 174       9.306  41.892 -45.865  1.00 22.77           C
ATOM   6576  CG2 VAL D 174       8.225  40.383 -47.510  1.00 23.09           C
ATOM   6577  N   SER D 175       6.490  41.946 -43.651  1.00 22.89           N
ATOM   6578  CA  SER D 175       6.540  42.853 -42.512  1.00 22.28           C
ATOM   6579  C   SER D 175       5.194  43.536 -42.360  1.00 21.50           C
ATOM   6580  O   SER D 175       4.461  43.703 -43.343  1.00 21.74           O
ATOM   6581  CB  SER D 175       7.628  43.913 -42.699  1.00 22.87           C
ATOM   6582  OG  SER D 175       7.664  44.767 -41.579  1.00 27.76           O
ATOM   6583  N   ALA D 176       4.909  43.987 -41.129  1.00 20.55           N
ATOM   6584  CA  ALA D 176       3.749  44.830 -40.875  1.00 20.75           C
ATOM   6585  C   ALA D 176       4.085  45.920 -39.859  1.00 19.30           C
ATOM   6586  O   ALA D 176       5.010  45.807 -39.051  1.00 19.77           O
ATOM   6587  CB  ALA D 176       2.553  44.006 -40.387  1.00 20.39           C
ATOM   6588  N   ILE D 177       3.303  46.990 -39.900  1.00 21.28           N
ATOM   6589  CA  ILE D 177       3.523  48.130 -39.032  1.00 20.13           C
ATOM   6590  C   ILE D 177       2.166  48.673 -38.603  1.00 19.98           C
ATOM   6591  O   ILE D 177       1.224  48.755 -39.401  1.00 18.87           O
ATOM   6592  CB  ILE D 177       4.381  49.213 -39.714  1.00 18.77           C
ATOM   6593  CG1 ILE D 177       4.716  50.298 -38.716  1.00 22.86           C
ATOM   6594  CG2 ILE D 177       3.688  49.801 -40.942  1.00 20.79           C
ATOM   6595  CD1 ILE D 177       5.723  51.278 -39.230  1.00 23.10           C
ATOM   6596  N   SER D 178       2.063  49.015 -37.327  1.00 22.55           N
ATOM   6597  CA  SER D 178       0.826  49.513 -36.773  1.00 18.21           C
ATOM   6598  C   SER D 178       0.529  50.901 -37.328  1.00 19.57           C
ATOM   6599  O   SER D 178       1.389  51.562 -37.905  1.00 23.30           O
ATOM   6600  CB  SER D 178       0.933  49.536 -35.252  1.00 23.03           C
ATOM   6601  OG  SER D 178       1.931  50.457 -34.840  1.00 21.87           O
ATOM   6602  N   GLY D 179      -0.710  51.354 -37.126  1.00 22.37           N
ATOM   6603  CA  GLY D 179      -1.118  52.655 -37.634  1.00 23.31           C
ATOM   6604  C   GLY D 179      -0.235  53.792 -37.167  1.00 21.85           C
ATOM   6605  O   GLY D 179       0.046  54.723 -37.928  1.00 23.81           O
ATOM   6606  N   SER D 180       0.162  53.769 -35.895  1.00 20.45           N
ATOM   6607  CA  SER D 180       1.008  54.811 -35.326  1.00 23.26           C
ATOM   6608  C   SER D 180       2.483  54.626 -35.634  1.00 25.92           C
ATOM   6609  O   SER D 180       3.253  55.583 -35.518  1.00 27.93           O
ATOM   6610  CB  SER D 180       0.842  54.859 -33.808  1.00 27.65           C
ATOM   6611  OG  SER D 180       1.456  53.740 -33.186  1.00 30.52           O
ATOM   6612  N   GLY D 181       2.900  53.425 -35.995  1.00 25.47           N
ATOM   6613  CA  GLY D 181       4.304  53.123 -36.099  1.00 24.16           C
ATOM   6614  C   GLY D 181       4.921  52.563 -34.843  1.00 24.91           C
ATOM   6615  O   GLY D 181       6.099  52.187 -34.867  1.00 30.81           O
ATOM   6616  N   GLY D 182       4.163  52.462 -33.746  1.00 24.35           N
ATOM   6617  CA  GLY D 182       4.735  52.009 -32.491  1.00 25.56           C
ATOM   6618  C   GLY D 182       5.039  50.521 -32.420  1.00 30.48           C
ATOM   6619  O   GLY D 182       5.756  50.092 -31.515  1.00 32.43           O
ATOM   6620  N   SER D 183       4.473  49.710 -33.308  1.00 27.54           N
ATOM   6621  CA  SER D 183       4.759  48.282 -33.306  1.00 26.16           C
ATOM   6622  C   SER D 183       5.150  47.845 -34.702  1.00 23.94           C
ATOM   6623  O   SER D 183       4.526  48.243 -35.685  1.00 25.57           O
ATOM   6624  CB  SER D 183       3.566  47.461 -32.824  1.00 26.52           C
ATOM   6625  OG  SER D 183       3.071  48.012 -31.620  1.00 31.85           O
ATOM   6626  N   THR D 184       6.183  47.025 -34.790  1.00 25.43           N
ATOM   6627  CA  THR D 184       6.637  46.515 -36.070  1.00 26.39           C
ATOM   6628  C   THR D 184       6.879  45.023 -35.960  1.00 26.00           C
ATOM   6629  O   THR D 184       7.344  44.534 -34.926  1.00 27.57           O
ATOM   6630  CB  THR D 184       7.904  47.263 -36.563  1.00 25.00           C
ATOM   6631  CG2 THR D 184       7.569  48.682 -36.952  1.00 21.68           C
ATOM   6632  OG1 THR D 184       8.930  47.242 -35.557  1.00 24.36           O
ATOM   6633  N   TYR D 185       6.569  44.314 -37.039  1.00 23.29           N
ATOM   6634  CA  TYR D 185       6.611  42.868 -37.086  1.00 25.12           C
ATOM   6635  C   TYR D 185       7.282  42.432 -38.381  1.00 28.20           C
ATOM   6636  O   TYR D 185       7.158  43.083 -39.421  1.00 26.07           O
ATOM   6637  CB  TYR D 185       5.197  42.286 -37.016  1.00 25.44           C
ATOM   6638  CG  TYR D 185       4.374  42.851 -35.893  1.00 24.29           C
ATOM   6639  CD1 TYR D 185       4.412  42.277 -34.630  1.00 26.19           C
ATOM   6640  CD2 TYR D 185       3.578  43.965 -36.081  1.00 26.40           C
```

[1944]

```
ATOM   6641  CE1 TYR D 185       3.651  42.800 -33.581  1.00 30.08           C
ATOM   6642  CE2 TYR D 185       2.817  44.494 -35.042  1.00 25.99           C
ATOM   6643  CZ  TYR D 185       2.864  43.908 -33.805  1.00 28.35           C
ATOM   6644  OH  TYR D 185       2.126  44.419 -32.772  1.00 28.20           O
ATOM   6645  N   TYR D 186       7.993  41.319 -38.316  1.00 25.77           N
ATOM   6646  CA  TYR D 186       8.778  40.897 -39.452  1.00 27.09           C
ATOM   6647  C   TYR D 186       8.675  39.399 -39.618  1.00 28.08           C
ATOM   6648  O   TYR D 186       8.438  38.671 -38.654  1.00 28.93           O
ATOM   6649  CB  TYR D 186      10.233  41.289 -39.284  1.00 27.36           C
ATOM   6650  CG  TYR D 186      10.483  42.759 -39.199  1.00 25.95           C
ATOM   6651  CD2 TYR D 186      10.762  43.499 -40.339  1.00 23.79           C
ATOM   6652  CD1 TYR D 186      10.440  43.408 -37.993  1.00 23.00           C
ATOM   6653  CE2 TYR D 186      11.005  44.869 -40.267  1.00 25.48           C
ATOM   6654  CE1 TYR D 186      10.685  44.759 -37.913  1.00 23.86           C
ATOM   6655  CZ  TYR D 186      10.965  45.480 -39.056  1.00 20.40           C
ATOM   6656  OH  TYR D 186      11.224  46.821 -39.052  1.00 20.28           O
ATOM   6657  N   ALA D 187       8.809  38.959 -40.856  1.00 24.62           N
ATOM   6658  CA  ALA D 187       9.047  37.560 -41.126  1.00 24.96           C
ATOM   6659  C   ALA D 187      10.442  37.163 -40.631  1.00 29.72           C
ATOM   6660  O   ALA D 187      11.366  37.984 -40.573  1.00 28.33           O
ATOM   6661  CB  ALA D 187       8.906  37.294 -42.613  1.00 24.34           C
ATOM   6662  N   ASP D 188      10.580  35.891 -40.252  1.00 28.74           N
ATOM   6663  CA  ASP D 188      11.840  35.397 -39.701  1.00 29.25           C
ATOM   6664  C   ASP D 188      13.007  35.660 -40.640  1.00 32.77           C
ATOM   6665  O   ASP D 188      14.071  36.122 -40.205  1.00 32.43           O
ATOM   6666  CB  ASP D 188      11.742  33.904 -39.406  1.00 30.51           C
ATOM   6667  CG  ASP D 188      10.808  33.595 -38.253  1.00 34.27           C
ATOM   6668  OD1 ASP D 188      10.578  34.482 -37.409  1.00 34.24           O
ATOM   6669  OD2 ASP D 188      10.312  32.448 -38.189  1.00 39.02           O
ATOM   6670  N   SER D 189      12.838  35.337 -41.933  1.00 29.82           N
ATOM   6671  CA  SER D 189      13.946  35.381 -42.880  1.00 28.09           C
ATOM   6672  C   SER D 189      14.381  36.785 -43.219  1.00 27.85           C
ATOM   6673  O   SER D 189      15.248  36.919 -44.081  1.00 31.65           O
ATOM   6674  CB  SER D 189      13.632  34.665 -44.187  1.00 29.39           C
ATOM   6675  OG  SER D 189      12.555  35.261 -44.863  1.00 32.27           O
ATOM   6676  N   VAL D 190      13.766  37.832 -42.672  1.00 30.06           N
ATOM   6677  CA  VAL D 190      14.217  39.188 -42.942  1.00 24.87           C
ATOM   6678  C   VAL D 190      14.548  39.986 -41.687  1.00 28.89           C
ATOM   6679  O   VAL D 190      14.990  41.133 -41.816  1.00 27.00           O
ATOM   6680  CB  VAL D 190      13.213  39.979 -43.808  1.00 25.17           C
ATOM   6681  CG1 VAL D 190      12.835  39.241 -45.044  1.00 28.44           C
ATOM   6682  CG2 VAL D 190      11.970  40.401 -42.992  1.00 26.69           C
ATOM   6683  N   LYS D 191      14.341  39.455 -40.471  1.00 31.30           N
ATOM   6684  CA  LYS D 191      14.670  40.272 -39.294  1.00 32.48           C
ATOM   6685  C   LYS D 191      16.166  40.573 -39.267  1.00 29.85           C
ATOM   6686  O   LYS D 191      16.991  39.736 -39.623  1.00 32.92           O
ATOM   6687  CB  LYS D 191      14.233  39.647 -37.939  1.00 33.87           C
ATOM   6688  CG  LYS D 191      12.692  39.638 -37.780  1.00 41.27           C
ATOM   6689  CD  LYS D 191      11.986  39.095 -36.486  1.00 37.73           C
ATOM   6690  CE  LYS D 191      10.864  40.096 -36.067  1.00 44.33           C
ATOM   6691  NZ  LYS D 191       9.808  39.755 -35.039  1.00 47.56           N
ATOM   6692  N   GLY D 192      16.506  41.776 -38.825  1.00 31.66           N
ATOM   6693  CA  GLY D 192      17.870  42.224 -38.819  1.00 31.18           C
ATOM   6694  C   GLY D 192      18.352  42.779 -40.136  1.00 27.44           C
ATOM   6695  O   GLY D 192      19.366  43.486 -40.151  1.00 33.04           O
ATOM   6696  N   ARG D 193      17.628  42.550 -41.228  1.00 27.05           N
ATOM   6697  CA  ARG D 193      17.995  43.076 -42.535  1.00 25.80           C
ATOM   6698  C   ARG D 193      17.024  44.096 -43.093  1.00 29.38           C
ATOM   6699  O   ARG D 193      17.463  45.000 -43.808  1.00 27.07           O
ATOM   6700  CB  ARG D 193      18.099  41.945 -43.577  1.00 26.52           C
ATOM   6701  CG  ARG D 193      19.011  40.821 -43.209  1.00 30.85           C
ATOM   6702  CD  ARG D 193      19.235  39.821 -44.329  1.00 30.23           C
ATOM   6703  NE  ARG D 193      18.041  39.133 -44.795  1.00 30.02           N
ATOM   6704  CZ  ARG D 193      17.609  39.173 -46.051  1.00 32.43           C
ATOM   6705  NH1 ARG D 193      18.281  39.877 -46.945  1.00 31.60           N
ATOM   6706  NH2 ARG D 193      16.518  38.497 -46.419  1.00 32.56           N
ATOM   6707  N   PHE D 194      15.724  43.986 -42.793  1.00 28.23           N
ATOM   6708  CA  PHE D 194      14.742  44.934 -43.301  1.00 27.78           C
```

[1945]

```
ATOM   6709  C   PHE D 194      14.168  45.743 -42.152  1.00 26.51           C
ATOM   6710  O   PHE D 194      14.056  45.263 -41.018  1.00 25.81           O
ATOM   6711  CB  PHE D 194      13.557  44.289 -44.041  1.00 26.91           C
ATOM   6712  CG  PHE D 194      13.909  43.520 -45.290  1.00 26.43           C
ATOM   6713  CD1 PHE D 194      15.195  43.454 -45.780  1.00 26.52           C
ATOM   6714  CD2 PHE D 194      12.895  42.940 -46.035  1.00 28.50           C
ATOM   6715  CE1 PHE D 194      15.473  42.754 -46.945  1.00 28.41           C
ATOM   6716  CE2 PHE D 194      13.167  42.256 -47.203  1.00 27.01           C
ATOM   6717  CZ  PHE D 194      14.456  42.167 -47.658  1.00 27.53           C
ATOM   6718  N   THR D 195      13.762  46.967 -42.464  1.00 26.88           N
ATOM   6719  CA  THR D 195      13.112  47.828 -41.491  1.00 27.14           C
ATOM   6720  C   THR D 195      11.903  48.469 -42.148  1.00 25.66           C
ATOM   6721  O   THR D 195      12.033  49.133 -43.180  1.00 26.82           O
ATOM   6722  CB  THR D 195      14.081  48.892 -40.981  1.00 25.42           C
ATOM   6723  CG2 THR D 195      13.381  49.816 -39.999  1.00 24.55           C
ATOM   6724  OG1 THR D 195      15.163  48.240 -40.302  1.00 25.86           O
ATOM   6725  N   ILE D 196      10.732  48.234 -41.577  1.00 24.43           N
ATOM   6726  CA  ILE D 196       9.510  48.895 -42.011  1.00 24.85           C
ATOM   6727  C   ILE D 196       9.344  50.178 -41.212  1.00 24.48           C
ATOM   6728  O   ILE D 196       9.685  50.245 -40.023  1.00 22.25           O
ATOM   6729  CB  ILE D 196       8.298  47.952 -41.854  1.00 25.53           C
ATOM   6730  CG1 ILE D 196       7.069  48.506 -42.596  1.00 23.44           C
ATOM   6731  CG2 ILE D 196       7.994  47.684 -40.367  1.00 23.37           C
ATOM   6732  CD1 ILE D 196       5.897  47.516 -42.666  1.00 19.30           C
ATOM   6733  N   SER D 197       8.850  51.220 -41.867  1.00 24.21           N
ATOM   6734  CA  SER D 197       8.553  52.458 -41.173  1.00 22.38           C
ATOM   6735  C   SER D 197       7.482  53.171 -41.969  1.00 24.68           C
ATOM   6736  O   SER D 197       7.106  52.746 -43.064  1.00 25.07           O
ATOM   6737  CB  SER D 197       9.782  53.366 -41.022  1.00 23.73           C
ATOM   6738  OG  SER D 197      10.271  53.776 -42.287  1.00 25.26           O
ATOM   6739  N   ARG D 198       6.984  54.260 -41.406  1.00 21.64           N
ATOM   6740  CA  ARG D 198       5.957  55.036 -42.079  1.00 23.73           C
ATOM   6741  C   ARG D 198       6.064  56.473 -41.620  1.00 23.45           C
ATOM   6742  O   ARG D 198       6.457  56.746 -40.482  1.00 24.00           O
ATOM   6743  CB  ARG D 198       4.535  54.532 -41.815  1.00 24.13           C
ATOM   6744  CG  ARG D 198       4.129  54.602 -40.390  1.00 25.55           C
ATOM   6745  CD  ARG D 198       2.639  54.622 -40.362  1.00 24.34           C
ATOM   6746  NE  ARG D 198       2.001  53.334 -40.353  1.00 23.49           N
ATOM   6747  CZ  ARG D 198       0.761  53.122 -40.783  1.00 23.09           C
ATOM   6748  NH1 ARG D 198       0.035  54.098 -41.296  1.00 20.18           N
ATOM   6749  NH2 ARG D 198       0.259  51.906 -40.713  1.00 23.02           N
ATOM   6750  N   ASP D 199       5.677  57.385 -42.503  1.00 24.05           N
ATOM   6751  CA  ASP D 199       5.658  58.813 -42.221  1.00 24.69           C
ATOM   6752  C   ASP D 199       4.199  59.228 -42.386  1.00 25.53           C
ATOM   6753  O   ASP D 199       3.706  59.396 -43.508  1.00 26.08           O
ATOM   6754  CB  ASP D 199       6.579  59.569 -43.172  1.00 25.18           C
ATOM   6755  CG  ASP D 199       6.716  61.035 -42.824  1.00 30.12           C
ATOM   6756  OD1 ASP D 199       5.770  61.640 -42.264  1.00 27.97           O
ATOM   6757  OD2 ASP D 199       7.811  61.585 -43.100  1.00 35.43           O
ATOM   6758  N   ASN D 200       3.487  59.324 -41.267  1.00 24.34           N
ATOM   6759  CA  ASN D 200       2.063  59.606 -41.350  1.00 26.24           C
ATOM   6760  C   ASN D 200       1.792  61.025 -41.814  1.00 28.54           C
ATOM   6761  O   ASN D 200       0.707  61.302 -42.341  1.00 29.22           O
ATOM   6762  CB  ASN D 200       1.427  59.336 -39.989  1.00 24.61           C
ATOM   6763  CG  ASN D 200       1.264  57.858 -39.732  1.00 24.82           C
ATOM   6764  ND2 ASN D 200       1.086  57.444 -38.479  1.00 24.29           N
ATOM   6765  OD1 ASN D 200       1.358  57.089 -40.677  1.00 27.59           O
ATOM   6766  N   SER D 201       2.772  61.913 -41.705  1.00 27.15           N
ATOM   6767  CA  SER D 201       2.567  63.258 -42.213  1.00 25.53           C
ATOM   6768  C   SER D 201       2.590  63.271 -43.726  1.00 24.71           C
ATOM   6769  O   SER D 201       1.833  64.015 -44.347  1.00 29.82           O
ATOM   6770  CB  SER D 201       3.621  64.197 -41.640  1.00 30.39           C
ATOM   6771  OG  SER D 201       4.930  63.820 -42.047  1.00 34.22           O
ATOM   6772  N   LYS D 202       3.447  62.445 -44.336  1.00 28.22           N
ATOM   6773  CA  LYS D 202       3.560  62.272 -45.782  1.00 27.83           C
ATOM   6774  C   LYS D 202       2.718  61.098 -46.316  1.00 28.08           C
ATOM   6775  O   LYS D 202       2.772  60.821 -47.519  1.00 28.18           O
ATOM   6776  CB  LYS D 202       5.037  62.086 -46.167  1.00 28.11           C
```

[1946]

```
ATOM   6777  N   ASN D 203       1.935  60.421 -45.458  1.00 26.25           N
ATOM   6778  CA  ASN D 203       1.073  59.296 -45.842  1.00 23.59           C
ATOM   6779  C   ASN D 203       1.806  58.264 -46.686  1.00 24.27           C
ATOM   6780  O   ASN D 203       1.283  57.767 -47.675  1.00 23.22           O
ATOM   6781  CB  ASN D 203      -0.166  59.760 -46.600  1.00 25.98           C
ATOM   6782  CG  ASN D 203      -1.180  60.486 -45.730  1.00 29.97           C
ATOM   6783  ND2 ASN D 203      -2.278  60.894 -46.349  1.00 35.92           N
ATOM   6784  OD1 ASN D 203      -1.003  60.649 -44.525  1.00 30.82           O
ATOM   6785  N   THR D 204       3.006  57.900 -46.257  1.00 26.18           N
ATOM   6786  CA  THR D 204       3.863  57.014 -47.029  1.00 25.41           C
ATOM   6787  C   THR D 204       4.425  55.909 -46.149  1.00 24.39           C
ATOM   6788  O   THR D 204       4.852  56.154 -45.013  1.00 24.48           O
ATOM   6789  CB  THR D 204       5.003  57.792 -47.669  1.00 24.59           C
ATOM   6790  CG2 THR D 204       5.919  56.888 -48.442  1.00 23.91           C
ATOM   6791  OG1 THR D 204       4.448  58.799 -48.530  1.00 25.79           O
ATOM   6792  N   LEU D 205       4.443  54.703 -46.697  1.00 23.63           N
ATOM   6793  CA  LEU D 205       5.024  53.532 -46.054  1.00 23.44           C
ATOM   6794  C   LEU D 205       6.372  53.230 -46.701  1.00 22.23           C
ATOM   6795  O   LEU D 205       6.544  53.421 -47.905  1.00 26.18           O
ATOM   6796  CB  LEU D 205       4.085  52.327 -46.192  1.00 21.11           C
ATOM   6797  CG  LEU D 205       4.609  50.974 -45.723  1.00 19.29           C
ATOM   6798  CD1 LEU D 205       4.619  50.902 -44.261  1.00 20.79           C
ATOM   6799  CD2 LEU D 205       3.807  49.843 -46.303  1.00 23.49           C
ATOM   6800  N   TYR D 206       7.324  52.763 -45.905  1.00 23.15           N
ATOM   6801  CA  TYR D 206       8.656  52.467 -46.410  1.00 22.07           C
ATOM   6802  C   TYR D 206       9.090  51.065 -46.025  1.00 24.95           C
ATOM   6803  O   TYR D 206       8.801  50.582 -44.922  1.00 24.37           O
ATOM   6804  CB  TYR D 206       9.680  53.423 -45.841  1.00 27.58           C
ATOM   6805  CG  TYR D 206       9.379  54.873 -46.079  1.00 27.19           C
ATOM   6806  CD2 TYR D 206       8.863  55.654 -45.065  1.00 24.56           C
ATOM   6807  CD1 TYR D 206       9.648  55.468 -47.307  1.00 29.72           C
ATOM   6808  CE2 TYR D 206       8.592  56.985 -45.280  1.00 29.45           C
ATOM   6809  CE1 TYR D 206       9.389  56.805 -47.538  1.00 31.42           C
ATOM   6810  CZ  TYR D 206       8.864  57.558 -46.515  1.00 30.74           C
ATOM   6811  OH  TYR D 206       8.595  58.890 -46.720  1.00 34.14           O
ATOM   6812  N   LEU D 207       9.878  50.448 -46.901  1.00 25.83           N
ATOM   6813  CA  LEU D 207      10.548  49.196 -46.566  1.00 24.70           C
ATOM   6814  C   LEU D 207      12.018  49.369 -46.913  1.00 25.77           C
ATOM   6815  O   LEU D 207      12.382  49.470 -48.088  1.00 30.02           O
ATOM   6816  CB  LEU D 207       9.926  48.007 -47.306  1.00 24.45           C
ATOM   6817  CG  LEU D 207      10.500  46.660 -46.857  1.00 25.53           C
ATOM   6818  CD1 LEU D 207      10.130  46.385 -45.415  1.00 22.46           C
ATOM   6819  CD2 LEU D 207      10.060  45.506 -47.760  1.00 24.46           C
ATOM   6820  N   GLN D 208      12.852  49.456 -45.892  1.00 28.64           N
ATOM   6821  CA  GLN D 208      14.285  49.577 -46.089  1.00 27.66           C
ATOM   6822  C   GLN D 208      14.872  48.177 -46.080  1.00 25.07           C
ATOM   6823  O   GLN D 208      14.738  47.452 -45.093  1.00 27.96           O
ATOM   6824  CB  GLN D 208      14.884  50.464 -45.005  1.00 28.42           C
ATOM   6825  CG  GLN D 208      16.371  50.487 -45.017  1.00 28.01           C
ATOM   6826  CD  GLN D 208      16.874  51.123 -46.253  1.00 28.47           C
ATOM   6827  NE2 GLN D 208      17.770  50.428 -46.933  1.00 30.14           N
ATOM   6828  OE1 GLN D 208      16.425  52.213 -46.645  1.00 29.71           O
ATOM   6829  N   MET D 209      15.498  47.794 -47.184  1.00 27.30           N
ATOM   6830  CA  MET D 209      16.027  46.456 -47.385  1.00 27.87           C
ATOM   6831  C   MET D 209      17.546  46.522 -47.414  1.00 31.60           C
ATOM   6832  O   MET D 209      18.121  47.259 -48.217  1.00 32.54           O
ATOM   6833  CB  MET D 209      15.512  45.871 -48.702  1.00 29.70           C
ATOM   6834  CG  MET D 209      13.986  45.836 -48.843  1.00 30.75           C
ATOM   6835  SD  MET D 209      13.366  45.005 -50.337  1.00 37.02           S
ATOM   6836  CE  MET D 209      13.781  46.141 -51.633  1.00 31.99           C
ATOM   6837  N   ASN D 210      18.195  45.699 -46.596  1.00 32.07           N
ATOM   6838  CA  ASN D 210      19.648  45.646 -46.573  1.00 32.36           C
ATOM   6839  C   ASN D 210      20.124  44.218 -46.774  1.00 31.89           C
ATOM   6840  O   ASN D 210      19.371  43.250 -46.586  1.00 32.57           O
ATOM   6841  CB  ASN D 210      20.197  46.191 -45.246  1.00 30.52           C
ATOM   6842  CG  ASN D 210      19.807  47.635 -45.006  1.00 30.25           C
ATOM   6843  ND2 ASN D 210      19.386  47.922 -43.783  1.00 34.25           N
ATOM   6844  OD1 ASN D 210      19.836  48.473 -45.909  1.00 33.23           O
```

[1947]

```
ATOM   6845  N   SER D 211      21.400  44.102 -47.149  1.00 32.80           N
ATOM   6846  CA  SER D 211      22.066  42.807 -47.307  1.00 31.85           C
ATOM   6847  C   SER D 211      21.228  41.851 -48.156  1.00 31.00           C
ATOM   6848  O   SER D 211      20.943  40.720 -47.762  1.00 33.28           O
ATOM   6849  CB  SER D 211      22.379  42.190 -45.947  1.00 30.56           C
ATOM   6850  OG  SER D 211      23.059  43.098 -45.112  1.00 32.07           O
ATOM   6851  N   LEU D 212      20.841  42.310 -49.340  1.00 30.75           N
ATOM   6852  CA  LEU D 212      19.946  41.533 -50.181  1.00 31.04           C
ATOM   6853  C   LEU D 212      20.624  40.264 -50.682  1.00 35.63           C
ATOM   6854  O   LEU D 212      21.822  40.256 -50.993  1.00 35.89           O
ATOM   6855  CB  LEU D 212      19.465  42.378 -51.355  1.00 31.82           C
ATOM   6856  CG  LEU D 212      18.550  43.513 -50.875  1.00 33.23           C
ATOM   6857  CD1 LEU D 212      18.436  44.609 -51.907  1.00 32.16           C
ATOM   6858  CD2 LEU D 212      17.168  42.985 -50.497  1.00 32.13           C
ATOM   6859  N   ARG D 213      19.824  39.201 -50.794  1.00 34.99           N
ATOM   6860  CA  ARG D 213      20.182  37.886 -51.305  1.00 32.44           C
ATOM   6861  C   ARG D 213      19.236  37.531 -52.449  1.00 32.93           C
ATOM   6862  O   ARG D 213      18.320  38.291 -52.781  1.00 31.40           O
ATOM   6863  CB  ARG D 213      19.996  36.821 -50.222  1.00 31.01           C
ATOM   6864  CG  ARG D 213      20.605  37.076 -48.881  1.00 35.53           C
ATOM   6865  CD  ARG D 213      19.809  36.216 -47.888  1.00 39.35           C
ATOM   6866  NE  ARG D 213      20.329  36.247 -46.525  1.00 42.34           N
ATOM   6867  CZ  ARG D 213      19.645  35.834 -45.459  1.00 41.67           C
ATOM   6868  NH1 ARG D 213      18.391  35.388 -45.589  1.00 38.75           N
ATOM   6869  NH2 ARG D 213      20.202  35.913 -44.257  1.00 43.49           N
ATOM   6870  N   ALA D 214      19.515  36.397 -53.107  1.00 31.19           N
ATOM   6871  CA  ALA D 214      18.680  35.949 -54.222  1.00 31.08           C
ATOM   6872  C   ALA D 214      17.245  35.704 -53.780  1.00 31.83           C
ATOM   6873  O   ALA D 214      16.302  35.922 -54.559  1.00 30.42           O
ATOM   6874  CB  ALA D 214      19.253  34.676 -54.846  1.00 31.29           C
ATOM   6875  N   GLU D 215      17.069  35.224 -52.545  1.00 32.53           N
ATOM   6876  CA  GLU D 215      15.755  35.007 -51.951  1.00 32.86           C
ATOM   6877  C   GLU D 215      14.935  36.291 -51.893  1.00 30.43           C
ATOM   6878  O   GLU D 215      13.708  36.216 -51.773  1.00 29.05           O
ATOM   6879  CB  GLU D 215      15.931  34.397 -50.549  1.00 31.22           C
ATOM   6880  CG  GLU D 215      14.731  34.497 -49.638  1.00 40.68           C
ATOM   6881  CD  GLU D 215      15.122  34.512 -48.160  1.00 46.65           C
ATOM   6882  OE1 GLU D 215      14.751  35.481 -47.460  1.00 45.87           O
ATOM   6883  OE2 GLU D 215      15.771  33.554 -47.690  1.00 45.81           O
ATOM   6884  N   ASP D 216      15.567  37.457 -52.023  1.00 28.51           N
ATOM   6885  CA  ASP D 216      14.829  38.707 -51.963  1.00 26.44           C
ATOM   6886  C   ASP D 216      14.364  39.173 -53.333  1.00 26.48           C
ATOM   6887  O   ASP D 216      13.556  40.095 -53.412  1.00 27.17           O
ATOM   6888  CB  ASP D 216      15.691  39.795 -51.320  1.00 27.96           C
ATOM   6889  CG  ASP D 216      16.199  39.409 -49.913  1.00 31.06           C
ATOM   6890  OD2 ASP D 216      17.244  39.944 -49.499  1.00 35.23           O
ATOM   6891  OD1 ASP D 216      15.587  38.577 -49.212  1.00 32.61           O
ATOM   6892  N   THR D 217      14.819  38.550 -54.414  1.00 27.65           N
ATOM   6893  CA  THR D 217      14.297  38.920 -55.722  1.00 26.89           C
ATOM   6894  C   THR D 217      12.817  38.594 -55.740  1.00 28.41           C
ATOM   6895  O   THR D 217      12.419  37.420 -55.620  1.00 26.45           O
ATOM   6896  CB  THR D 217      15.014  38.142 -56.826  1.00 28.10           C
ATOM   6897  CG2 THR D 217      14.474  38.471 -58.196  1.00 27.87           C
ATOM   6898  OG1 THR D 217      16.428  38.418 -56.790  1.00 32.05           O
ATOM   6899  N   ALA D 218      11.995  39.621 -55.883  1.00 28.24           N
ATOM   6900  CA  ALA D 218      10.560  39.372 -55.852  1.00 27.37           C
ATOM   6901  C   ALA D 218       9.858  40.648 -56.248  1.00 26.39           C
ATOM   6902  O   ALA D 218      10.447  41.740 -56.202  1.00 26.15           O
ATOM   6903  CB  ALA D 218      10.086  38.929 -54.470  1.00 25.83           C
ATOM   6904  N   VAL D 219       8.584  40.498 -56.592  1.00 23.38           N
ATOM   6905  CA  VAL D 219       7.677  41.639 -56.643  1.00 23.73           C
ATOM   6906  C   VAL D 219       7.274  41.972 -55.213  1.00 21.87           C
ATOM   6907  O   VAL D 219       6.913  41.086 -54.434  1.00 22.87           O
ATOM   6908  CB  VAL D 219       6.453  41.314 -57.524  1.00 20.96           C
ATOM   6909  CG1 VAL D 219       5.428  42.450 -57.481  1.00 24.67           C
ATOM   6910  CG2 VAL D 219       6.903  41.037 -58.968  1.00 24.75           C
ATOM   6911  N   TYR D 220       7.382  43.234 -54.836  1.00 19.82           N
ATOM   6912  CA  TYR D 220       7.065  43.653 -53.481  1.00 20.34           C
```

[1948]

```
ATOM   6913  C   TYR D 220       5.765  44.450 -53.493  1.00 23.38           C
ATOM   6914  O   TYR D 220       5.668  45.487 -54.156  1.00 25.21           O
ATOM   6915  CB  TYR D 220       8.219  44.468 -52.899  1.00 21.50           C
ATOM   6916  CG  TYR D 220       9.335  43.582 -52.411  1.00 21.97           C
ATOM   6917  CD1 TYR D 220      10.225  42.991 -53.302  1.00 21.99           C
ATOM   6918  CD2 TYR D 220       9.476  43.304 -51.059  1.00 22.58           C
ATOM   6919  CE1 TYR D 220      11.227  42.148 -52.847  1.00 22.26           C
ATOM   6920  CE2 TYR D 220      10.473  42.458 -50.601  1.00 21.49           C
ATOM   6921  CZ  TYR D 220      11.338  41.886 -51.510  1.00 21.30           C
ATOM   6922  OH  TYR D 220      12.313  41.040 -51.045  1.00 24.68           O
ATOM   6923  N   TYR D 221       4.782  43.995 -52.735  1.00 21.01           N
ATOM   6924  CA  TYR D 221       3.493  44.670 -52.629  1.00 20.85           C
ATOM   6925  C   TYR D 221       3.379  45.338 -51.272  1.00 21.71           C
ATOM   6926  O   TYR D 221       3.744  44.741 -50.259  1.00 21.54           O
ATOM   6927  CB  TYR D 221       2.320  43.681 -52.743  1.00 23.42           C
ATOM   6928  CG  TYR D 221       2.153  42.916 -54.022  1.00 22.64           C
ATOM   6929  CD2 TYR D 221       1.332  43.413 -55.027  1.00 24.27           C
ATOM   6930  CD1 TYR D 221       2.757  41.689 -54.214  1.00 21.99           C
ATOM   6931  CE2 TYR D 221       1.134  42.716 -56.206  1.00 26.91           C
ATOM   6932  CE1 TYR D 221       2.574  40.986 -55.397  1.00 25.66           C
ATOM   6933  CZ  TYR D 221       1.754  41.505 -56.386  1.00 27.08           C
ATOM   6934  OH  TYR D 221       1.551  40.829 -57.579  1.00 28.02           O
ATOM   6935  N   CYS D 222       2.835  46.553 -51.240  1.00 23.36           N
ATOM   6936  CA  CYS D 222       2.304  47.110 -49.997  1.00 25.63           C
ATOM   6937  C   CYS D 222       0.798  46.854 -49.969  1.00 21.70           C
ATOM   6938  O   CYS D 222       0.172  46.640 -51.012  1.00 22.75           O
ATOM   6939  CB  CYS D 222       2.604  48.613 -49.840  1.00 24.09           C
ATOM   6940  SG  CYS D 222       2.035  49.703 -51.165  1.00 32.82           S
ATOM   6941  N   ALA D 223       0.235  46.767 -48.765  1.00 22.45           N
ATOM   6942  CA  ALA D 223      -1.183  46.453 -48.655  1.00 21.88           C
ATOM   6943  C   ALA D 223      -1.740  47.096 -47.391  1.00 23.59           C
ATOM   6944  O   ALA D 223      -1.044  47.238 -46.383  1.00 24.14           O
ATOM   6945  CB  ALA D 223      -1.450  44.938 -48.654  1.00 20.34           C
ATOM   6946  N   LYS D 224      -3.004  47.485 -47.464  1.00 21.82           N
ATOM   6947  CA  LYS D 224      -3.686  48.149 -46.374  1.00 21.14           C
ATOM   6948  C   LYS D 224      -4.485  47.128 -45.572  1.00 21.63           C
ATOM   6949  O   LYS D 224      -5.252  46.352 -46.143  1.00 21.65           O
ATOM   6950  CB  LYS D 224      -4.585  49.224 -46.978  1.00 22.16           C
ATOM   6951  CG  LYS D 224      -5.638  49.778 -46.095  1.00 25.94           C
ATOM   6952  CD  LYS D 224      -6.457  50.785 -46.900  1.00 25.71           C
ATOM   6953  CE  LYS D 224      -7.698  51.144 -46.136  1.00 28.52           C
ATOM   6954  NZ  LYS D 224      -8.474  49.891 -45.829  1.00 28.70           N
ATOM   6955  N   TYR D 225      -4.293  47.114 -44.257  1.00 22.77           N
ATOM   6956  CA  TYR D 225      -5.152  46.300 -43.418  1.00 22.90           C
ATOM   6957  C   TYR D 225      -6.522  46.952 -43.323  1.00 25.24           C
ATOM   6958  O   TYR D 225      -6.715  48.132 -43.629  1.00 23.06           O
ATOM   6959  CB  TYR D 225      -4.583  46.119 -41.999  1.00 23.98           C
ATOM   6960  CG  TYR D 225      -3.431  45.139 -41.912  1.00 23.62           C
ATOM   6961  CD2 TYR D 225      -2.115  45.575 -41.914  1.00 22.37           C
ATOM   6962  CD1 TYR D 225      -3.666  43.774 -41.847  1.00 29.78           C
ATOM   6963  CE2 TYR D 225      -1.063  44.681 -41.862  1.00 24.69           C
ATOM   6964  CE1 TYR D 225      -2.608  42.856 -41.794  1.00 30.28           C
ATOM   6965  CZ  TYR D 225      -1.312  43.326 -41.801  1.00 28.14           C
ATOM   6966  OH  TYR D 225      -0.261  42.436 -41.763  1.00 29.80           O
ATOM   6967  N   ASP D 226      -7.494  46.159 -42.906  1.00 25.19           N
ATOM   6968  CA  ASP D 226      -8.815  46.709 -42.704  1.00 22.74           C
ATOM   6969  C   ASP D 226      -9.446  45.902 -41.587  1.00 26.32           C
ATOM   6970  O   ASP D 226      -9.142  44.719 -41.414  1.00 26.69           O
ATOM   6971  CB  ASP D 226      -9.647  46.638 -43.982  1.00 25.84           C
ATOM   6972  CG  ASP D 226     -10.936  47.435 -43.887  1.00 28.51           C
ATOM   6973  OD1 ASP D 226     -10.875  48.643 -43.574  1.00 30.37           O
ATOM   6974  OD2 ASP D 226     -12.019  46.848 -44.089  1.00 33.14           O
ATOM   6975  N   GLY D 227     -10.273  46.566 -40.792  1.00 25.35           N
ATOM   6976  CA  GLY D 227     -10.991  45.877 -39.743  1.00 27.35           C
ATOM   6977  C   GLY D 227     -10.129  45.398 -38.587  1.00 26.64           C
ATOM   6978  O   GLY D 227      -9.171  46.059 -38.149  1.00 24.25           O
ATOM   6979  N   ILE D 228     -10.480  44.213 -38.089  1.00 25.16           N
ATOM   6980  CA  ILE D 228      -9.900  43.684 -36.867  1.00 27.09           C
```

[1949]

```
ATOM   6981  C   ILE D 228      -9.343  42.283 -37.048  1.00 26.07           C
ATOM   6982  O   ILE D 228      -8.675  41.763 -36.149  1.00 26.76           O
ATOM   6983  CB  ILE D 228     -10.963  43.673 -35.760  1.00 25.27           C
ATOM   6984  CG1 ILE D 228     -12.088  42.745 -36.199  1.00 26.76           C
ATOM   6985  CG2 ILE D 228     -11.508  45.079 -35.493  1.00 27.90           C
ATOM   6986  CD1 ILE D 228     -13.294  42.768 -35.303  1.00 33.46           C
ATOM   6987  N   TYR D 229      -9.590  41.657 -38.195  1.00 24.15           N
ATOM   6988  CA  TYR D 229      -9.143  40.285 -38.367  1.00 24.62           C
ATOM   6989  C   TYR D 229      -7.871  40.168 -39.191  1.00 25.61           C
ATOM   6990  O   TYR D 229      -7.518  39.060 -39.593  1.00 25.50           O
ATOM   6991  CB  TYR D 229     -10.252  39.432 -38.984  1.00 29.83           C
ATOM   6992  CG  TYR D 229     -11.350  39.035 -38.013  1.00 26.58           C
ATOM   6993  CD1 TYR D 229     -11.186  37.953 -37.158  1.00 26.35           C
ATOM   6994  CD2 TYR D 229     -12.553  39.730 -37.968  1.00 42.14           C
ATOM   6995  CE1 TYR D 229     -12.185  37.585 -36.268  1.00 26.71           C
ATOM   6996  CE2 TYR D 229     -13.554  39.370 -37.084  1.00 26.88           C
ATOM   6997  CZ  TYR D 229     -13.359  38.305 -36.234  1.00 24.36           C
ATOM   6998  OH  TYR D 229     -14.332  37.919 -35.360  1.00 28.09           O
ATOM   6999  N   GLY D 230      -7.160  41.267 -39.436  1.00 22.02           N
ATOM   7000  CA  GLY D 230      -5.870  41.169 -40.096  1.00 25.12           C
ATOM   7001  C   GLY D 230      -5.921  40.930 -41.592  1.00 24.88           C
ATOM   7002  O   GLY D 230      -4.913  40.523 -42.183  1.00 25.75           O
ATOM   7003  N   GLU D 231      -7.061  41.194 -42.225  1.00 24.66           N
ATOM   7004  CA  GLU D 231      -7.219  41.071 -43.664  1.00 23.68           C
ATOM   7005  C   GLU D 231      -6.657  42.283 -44.390  1.00 23.62           C
ATOM   7006  O   GLU D 231      -6.739  43.419 -43.910  1.00 22.83           O
ATOM   7007  CB  GLU D 231      -8.690  40.881 -44.015  1.00 23.25           C
ATOM   7008  CG  GLU D 231      -9.551  42.058 -43.724  1.00 22.71           C
ATOM   7009  CD  GLU D 231     -10.174  42.064 -42.335  1.00 24.19           C
ATOM   7010  OE1 GLU D 231      -9.568  41.580 -41.357  1.00 24.12           O
ATOM   7011  OE2 GLU D 231     -11.302  42.589 -42.211  1.00 24.90           O
ATOM   7012  N   LEU D 232      -6.103  42.030 -45.575  1.00 23.64           N
ATOM   7013  CA  LEU D 232      -5.532  43.064 -46.430  1.00 23.33           C
ATOM   7014  C   LEU D 232      -6.503  43.349 -47.572  1.00 23.40           C
ATOM   7015  O   LEU D 232      -6.634  42.542 -48.492  1.00 22.02           O
ATOM   7016  CB  LEU D 232      -4.170  42.613 -46.961  1.00 20.48           C
ATOM   7017  CG  LEU D 232      -3.169  42.400 -45.826  1.00 19.47           C
ATOM   7018  CD1 LEU D 232      -1.931  41.658 -46.267  1.00 19.89           C
ATOM   7019  CD2 LEU D 232      -2.812  43.734 -45.258  1.00 22.21           C
ATOM   7020  N   ASP D 233      -7.208  44.480 -47.505  1.00 23.09           N
ATOM   7021  CA  ASP D 233      -8.276  44.692 -48.462  1.00 23.00           C
ATOM   7022  C   ASP D 233      -7.845  45.492 -49.686  1.00 25.67           C
ATOM   7023  O   ASP D 233      -8.535  45.450 -50.710  1.00 26.18           O
ATOM   7024  CB  ASP D 233      -9.493  45.359 -47.770  1.00 23.90           C
ATOM   7025  CG  ASP D 233      -9.271  46.836 -47.397  1.00 28.22           C
ATOM   7026  OD1 ASP D 233      -8.121  47.273 -47.148  1.00 25.18           O
ATOM   7027  OD2 ASP D 233     -10.283  47.574 -47.321  1.00 27.19           O
ATOM   7028  N   PHE D 234      -6.705  46.167 -49.663  1.00 23.13           N
ATOM   7029  CA  PHE D 234      -6.310  46.903 -50.849  1.00 24.21           C
ATOM   7030  C   PHE D 234      -4.806  46.824 -51.020  1.00 23.19           C
ATOM   7031  O   PHE D 234      -4.055  46.921 -50.041  1.00 22.40           O
ATOM   7032  CB  PHE D 234      -6.760  48.363 -50.807  1.00 25.84           C
ATOM   7033  CG  PHE D 234      -6.657  49.039 -52.144  1.00 26.53           C
ATOM   7034  CD1 PHE D 234      -7.644  48.862 -53.102  1.00 26.27           C
ATOM   7035  CD2 PHE D 234      -5.541  49.807 -52.470  1.00 27.53           C
ATOM   7036  CE1 PHE D 234      -7.542  49.463 -54.376  1.00 25.32           C
ATOM   7037  CE2 PHE D 234      -5.437  50.421 -53.744  1.00 27.56           C
ATOM   7038  CZ  PHE D 234      -6.446  50.237 -54.688  1.00 26.62           C
ATOM   7039  N   TRP D 235      -4.379  46.657 -52.279  1.00 21.61           N
ATOM   7040  CA  TRP D 235      -2.994  46.348 -52.584  1.00 21.98           C
ATOM   7041  C   TRP D 235      -2.415  47.333 -53.586  1.00 22.69           C
ATOM   7042  O   TRP D 235      -3.091  47.781 -54.521  1.00 22.90           O
ATOM   7043  CB  TRP D 235      -2.864  44.922 -53.148  1.00 21.62           C
ATOM   7044  CG  TRP D 235      -3.271  43.843 -52.200  1.00 20.01           C
ATOM   7045  CD1 TRP D 235      -4.506  43.645 -51.655  1.00 20.44           C
ATOM   7046  CD2 TRP D 235      -2.435  42.815 -51.677  1.00 17.95           C
ATOM   7047  CE2 TRP D 235      -3.222  42.031 -50.809  1.00 18.00           C
ATOM   7048  CE3 TRP D 235      -1.090  42.485 -51.848  1.00 21.40           C
```

[1950]

```
ATOM   7049  NE1 TRP D 235      -4.483  42.561 -50.804  1.00 21.61           N
ATOM   7050  CZ2 TRP D 235      -2.715  40.927 -50.133  1.00 19.92           C
ATOM   7051  CZ3 TRP D 235      -0.583  41.381 -51.161  1.00 20.69           C
ATOM   7052  CH2 TRP D 235      -1.396  40.616 -50.324  1.00 19.90           C
ATOM   7053  N   GLY D 236      -1.138  47.622 -53.423  1.00 19.70           N
ATOM   7054  CA  GLY D 236      -0.409  48.230 -54.510  1.00 25.84           C
ATOM   7055  C   GLY D 236      -0.272  47.245 -55.658  1.00 25.05           C
ATOM   7056  O   GLY D 236      -0.574  46.058 -55.539  1.00 26.41           O
ATOM   7057  N   CYS D 237       0.148  47.742 -56.815  1.00 23.78           N
ATOM   7058  CA  CYS D 237       0.296  46.834 -57.951  1.00 25.92           C
ATOM   7059  C   CYS D 237       1.599  46.049 -57.913  1.00 26.17           C
ATOM   7060  O   CYS D 237       1.780  45.153 -58.742  1.00 30.55           O
ATOM   7061  CB  CYS D 237       0.190  47.589 -59.271  1.00 23.20           C
ATOM   7062  SG  CYS D 237      -1.437  48.292 -59.486  1.00 31.45           S
ATOM   7063  N   GLY D 238       2.503  46.364 -56.997  1.00 26.82           N
ATOM   7064  CA  GLY D 238       3.762  45.652 -56.891  1.00 26.64           C
ATOM   7065  C   GLY D 238       4.881  46.417 -57.570  1.00 28.57           C
ATOM   7066  O   GLY D 238       4.666  47.171 -58.529  1.00 29.51           O
ATOM   7067  N   THR D 239       6.098  46.254 -57.047  1.00 28.09           N
ATOM   7068  CA  THR D 239       7.281  46.824 -57.683  1.00 26.09           C
ATOM   7069  C   THR D 239       8.378  45.775 -57.613  1.00 25.58           C
ATOM   7070  O   THR D 239       8.549  45.110 -56.587  1.00 27.43           O
ATOM   7071  CB  THR D 239       7.705  48.150 -57.028  1.00 28.44           C
ATOM   7072  CG2 THR D 239       8.171  47.961 -55.591  1.00 29.52           C
ATOM   7073  OG1 THR D 239       8.772  48.746 -57.779  1.00 34.95           O
ATOM   7074  N   LEU D 240       9.092  45.593 -58.717  1.00 25.72           N
ATOM   7075  CA  LEU D 240       9.997  44.456 -58.851  1.00 26.55           C
ATOM   7076  C   LEU D 240      11.394  44.821 -58.345  1.00 26.47           C
ATOM   7077  O   LEU D 240      11.968  45.832 -58.754  1.00 25.48           O
ATOM   7078  CB  LEU D 240      10.034  43.989 -60.311  1.00 25.18           C
ATOM   7079  CG  LEU D 240      10.964  42.829 -60.673  1.00 24.27           C
ATOM   7080  CD1 LEU D 240      10.630  41.540 -59.929  1.00 23.01           C
ATOM   7081  CD2 LEU D 240      11.003  42.612 -62.191  1.00 27.36           C
ATOM   7082  N   VAL D 241      11.930  43.990 -57.457  1.00 25.33           N
ATOM   7083  CA  VAL D 241      13.295  44.107 -56.959  1.00 25.32           C
ATOM   7084  C   VAL D 241      14.054  42.890 -57.485  1.00 28.74           C
ATOM   7085  O   VAL D 241      13.650  41.740 -57.245  1.00 28.73           O
ATOM   7086  CB  VAL D 241      13.336  44.183 -55.420  1.00 29.01           C
ATOM   7087  CG1 VAL D 241      14.747  44.420 -54.922  1.00 28.66           C
ATOM   7088  CG2 VAL D 241      12.437  45.308 -54.892  1.00 23.90           C
ATOM   7089  N   THR D 242      15.107  43.142 -58.268  1.00 31.04           N
ATOM   7090  CA  THR D 242      15.949  42.096 -58.840  1.00 29.42           C
ATOM   7091  C   THR D 242      17.359  42.224 -58.293  1.00 30.37           C
ATOM   7092  O   THR D 242      17.989  43.273 -58.451  1.00 30.65           O
ATOM   7093  CB  THR D 242      15.991  42.165 -60.362  1.00 31.35           C
ATOM   7094  CG2 THR D 242      16.646  40.893 -60.927  1.00 34.96           C
ATOM   7095  OG1 THR D 242      14.659  42.281 -60.872  1.00 30.42           O
ATOM   7096  N   VAL D 243      17.877  41.143 -57.718  1.00 28.59           N
ATOM   7097  CA  VAL D 243      19.254  41.107 -57.232  1.00 34.43           C
ATOM   7098  C   VAL D 243      20.156  40.609 -58.354  1.00 34.56           C
ATOM   7099  O   VAL D 243      19.945  39.512 -58.881  1.00 36.45           O
ATOM   7100  CB  VAL D 243      19.375  40.204 -55.996  1.00 32.99           C
ATOM   7101  CG1 VAL D 243      20.810  40.132 -55.548  1.00 32.19           C
ATOM   7102  CG2 VAL D 243      18.524  40.768 -54.875  1.00 29.40           C
ATOM   7103  N   SER D 244      21.170  41.409 -58.712  1.00 36.21           N
ATOM   7104  CA  SER D 244      21.996  41.131 -59.888  1.00 33.95           C
ATOM   7105  C   SER D 244      23.328  41.861 -59.786  1.00 36.62           C
ATOM   7106  O   SER D 244      23.352  43.070 -59.522  1.00 35.47           O
ATOM   7107  CB  SER D 244      21.265  41.557 -61.165  1.00 37.29           C
ATOM   7108  OG  SER D 244      20.717  42.865 -61.023  1.00 42.11           O
ATOM   7109  N   SER D 245      24.429  41.148 -60.036  1.00 38.77           N
ATOM   7110  CA  SER D 245      25.771  41.742 -59.929  1.00 37.55           C
ATOM   7111  C   SER D 245      26.422  42.001 -61.275  1.00 35.16           C
ATOM   7112  O   SER D 245      26.524  43.171 -61.693  1.00 38.87           O
ATOM   7113  CB  SER D 245      26.681  40.860 -59.068  1.00 34.68           C
ATOM   7114  OG  SER D 245      26.556  39.500 -59.433  1.00 35.12           O
TER    7118       SER D 245
HETATM 7115  S   SO4 G   1      17.333 -11.849 -19.399  1.00 29.76           S
```

[1951]

```
HETATM 7116  O1  SO4 G   1      18.095 -12.370 -20.550  1.00 45.71           O
HETATM 7117  O2  SO4 G   1      17.131 -10.424 -19.572  1.00 36.94           O
HETATM 7118  O3  SO4 G   1      16.001 -12.479 -19.405  1.00 35.71           O
HETATM 7119  O4  SO4 G   1      18.054 -12.017 -18.096  1.00 41.35           O
TER    7124      SO4 G   1
HETATM 7120  O   HOH S   1       2.366   2.089  13.860  1.00 27.03           O
HETATM 7121  O   HOH S   2      -1.907 -19.134 -19.857  1.00 20.24           O
HETATM 7122  O   HOH S   3       1.279  50.672 -31.909  1.00 20.33           O
HETATM 7123  O   HOH S   4       7.619 -10.729  -1.289  1.00 38.76           O
HETATM 7124  O   HOH S   5      -2.855 -15.087 -26.647  1.00 19.10           O
HETATM 7125  O   HOH S   6      19.099 -14.295  14.372  1.00 20.77           O
HETATM 7126  O   HOH S   7      13.266  -2.050  -5.231  1.00 23.27           O
HETATM 7127  O   HOH S   8      10.053   0.279 -37.292  1.00 23.05           O
HETATM 7128  O   HOH S   9       7.517   7.700 -34.797  1.00 30.97           O
HETATM 7129  O   HOH S  10       5.188  58.804 -38.607  1.00 26.36           O
HETATM 7130  O   HOH S  11     -22.837  36.729 -55.590  1.00 29.80           O
HETATM 7131  O   HOH S  12      -6.286  -4.320 -27.363  1.00 25.08           O
HETATM 7132  O   HOH S  13      12.044 -12.156  12.984  1.00 18.86           O
HETATM 7133  O   HOH S  14      -5.286  -4.017 -48.201  1.00 27.19           O
HETATM 7134  O   HOH S  15      20.823  -5.115  -3.753  1.00 23.70           O
HETATM 7135  O   HOH S  16      20.020 -10.534 -14.851  1.00 20.99           O
HETATM 7136  O   HOH S  17     -13.772  36.590 -57.740  1.00 33.77           O
HETATM 7137  O   HOH S  18      22.458  13.100 -13.022  1.00 31.57           O
HETATM 7138  O   HOH S  19      18.962  11.233 -18.387  1.00 28.90           O
HETATM 7139  O   HOH S  20      17.365 -22.496  27.736  1.00 24.20           O
HETATM 7140  O   HOH S  21     -11.988  29.529 -44.050  1.00 24.55           O
HETATM 7141  O   HOH S  22       3.938  -7.611  -0.716  1.00 25.84           O
HETATM 7142  O   HOH S  23      -1.601  -9.011  10.904  1.00 25.12           O
HETATM 7143  O   HOH S  24      14.695  13.155 -18.411  1.00 26.99           O
HETATM 7144  O   HOH S  25     -19.369  39.780 -51.200  1.00 28.94           O
HETATM 7145  O   HOH S  26     -11.466  42.197 -52.633  1.00 25.60           O
HETATM 7146  O   HOH S  27      12.147  52.114 -43.290  1.00 25.73           O
HETATM 7147  O   HOH S  28      -1.818  60.318 -41.571  1.00 35.47           O
HETATM 7148  O   HOH S  29      14.552  -0.112  26.640  1.00 23.05           O
HETATM 7149  O   HOH S  30      17.869 -10.687 -27.976  1.00 30.01           O
HETATM 7150  O   HOH S  31      18.603   1.260  19.599  1.00 23.80           O
HETATM 7151  O   HOH S  32       0.286  15.867   6.529  1.00 30.80           O
HETATM 7152  O   HOH S  33      24.243  -8.064  12.282  1.00 29.97           O
HETATM 7153  O   HOH S  34     -17.026  34.379 -67.277  1.00 27.87           O
HETATM 7154  O   HOH S  35       2.316  -9.555  -1.833  1.00 30.93           O
HETATM 7155  O   HOH S  36       0.647  -4.492 -27.517  1.00 21.33           O
HETATM 7156  O   HOH S  37     -13.605  35.326 -59.251  1.00 24.02           O
HETATM 7157  O   HOH S  38      18.391  -6.406  -5.112  1.00 29.28           O
HETATM 7158  O   HOH S  39      13.594 -17.054  16.273  1.00 21.01           O
HETATM 7159  O   HOH S  40      -2.667  -5.735 -29.148  1.00 21.43           O
HETATM 7160  O   HOH S  41      13.113  19.675   4.922  1.00 23.84           O
HETATM 7161  O   HOH S  42      -1.254  52.206 -33.795  1.00 22.58           O
HETATM 7162  O   HOH S  43      -6.065  58.360 -37.690  1.00 23.92           O
HETATM 7163  O   HOH S  44       7.006  -3.939  30.054  1.00 20.70           O
HETATM 7164  O   HOH S  45      16.331  -1.967  26.480  1.00 22.44           O
HETATM 7165  O   HOH S  46      17.519 -14.986 -12.202  1.00 24.47           O
HETATM 7166  O   HOH S  47      -6.991  43.706 -54.463  1.00 24.52           O
HETATM 7167  O   HOH S  48       1.770  50.830 -57.453  1.00 23.67           O
HETATM 7168  O   HOH S  49       2.453  30.972 -50.640  1.00 22.77           O
HETATM 7169  O   HOH S  50      -2.487  56.172 -35.324  1.00 20.94           O
HETATM 7170  O   HOH S  51      31.001 -14.657 -52.311  1.00 38.22           O
HETATM 7171  O   HOH S  52       3.531  -7.134 -30.625  1.00 28.70           O
HETATM 7172  O   HOH S  53      -4.090  38.569 -44.339  1.00 30.82           O
HETATM 7173  O   HOH S  54      17.047 -22.691  24.463  1.00 23.92           O
HETATM 7174  O   HOH S  55      10.467  18.404   3.262  1.00 32.83           O
HETATM 7175  O   HOH S  56       1.612   0.059   5.443  1.00 29.02           O
HETATM 7176  O   HOH S  57       7.698  54.457 -38.445  1.00 22.27           O
HETATM 7177  O   HOH S  58       5.900  56.552 -37.232  1.00 27.97           O
HETATM 7178  O   HOH S  59       8.475   1.265 -11.698  1.00 25.28           O
HETATM 7179  O   HOH S  60       2.290  -2.468  24.765  1.00 31.76           O
HETATM 7180  O   HOH S  61      21.294   4.908 -20.848  1.00 26.71           O
HETATM 7181  O   HOH S  62     -21.929  29.242 -66.283  1.00 29.47           O
HETATM 7182  O   HOH S  63       7.704  13.529 -52.124  1.00 29.84           O
```

[1952]

```
HETATM 7183  O   HOH S  64       7.466  -6.651 -43.601  1.00 29.53           O
HETATM 7184  O   HOH S  65      11.578  47.911 -36.615  1.00 26.54           O
HETATM 7185  O   HOH S  66       4.797   1.227 -31.036  1.00 29.03           O
HETATM 7186  O   HOH S  67       4.833   5.538 -16.097  1.00 31.55           O
HETATM 7187  O   HOH S  68      21.654  13.999   1.706  1.00 25.26           O
HETATM 7188  O   HOH S  69      10.020  -4.418 -57.111  1.00 23.44           O
HETATM 7189  O   HOH S  70     -11.338  30.741 -68.223  1.00 25.28           O
HETATM 7190  O   HOH S  71      -2.409 -21.419 -21.096  1.00 26.49           O
HETATM 7191  O   HOH S  72      -4.526 -14.659 -24.587  1.00 18.58           O
HETATM 7192  O   HOH S  73     -16.428  26.115 -47.344  1.00 32.26           O
HETATM 7193  O   HOH S  74      16.711 -15.886 -53.534  1.00 23.26           O
HETATM 7194  O   HOH S  75      13.160 -12.175   1.912  1.00 23.10           O
HETATM 7195  O   HOH S  76     -10.692  46.437 -51.778  1.00 38.29           O
HETATM 7196  O   HOH S  77      10.685  33.587 -42.329  1.00 31.76           O
HETATM 7197  O   HOH S  78     -20.909  32.361 -49.030  1.00 32.50           O
HETATM 7198  O   HOH S  79      14.479  12.501 -22.722  1.00 29.87           O
HETATM 7199  O   HOH S  80     -15.995  37.023 -67.223  1.00 19.94           O
HETATM 7200  O   HOH S  81      25.590  -3.648 -34.203  1.00 29.50           O
HETATM 7201  O   HOH S  82       3.243 -32.054 -15.017  1.00 21.66           O
HETATM 7202  O   HOH S  83      -1.397 -17.389 -25.612  1.00 22.12           O
HETATM 7203  O   HOH S  84      17.554   1.671   6.965  1.00 25.71           O
HETATM 7204  O   HOH S  85      19.977  -3.677 -65.227  1.00 29.80           O
HETATM 7205  O   HOH S  86       7.946  34.440 -52.663  1.00 27.70           O
HETATM 7206  O   HOH S  87      20.690 -19.658  26.157  1.00 24.28           O
HETATM 7207  O   HOH S  88       2.591  -5.299 -36.400  1.00 30.24           O
HETATM 7208  O   HOH S  89       8.830  13.696 -48.804  1.00 30.36           O
HETATM 7209  O   HOH S  90      10.156   8.183 -38.792  1.00 33.86           O
HETATM 7210  O   HOH S  91      12.374   7.788   0.366  1.00 29.15           O
HETATM 7211  O   HOH S  92       3.606  -3.953 -37.758  1.00 31.11           O
HETATM 7212  O   HOH S  93       1.215   4.680  12.190  1.00 25.04           O
HETATM 7213  O   HOH S  94       8.823  33.724 -40.806  1.00 27.16           O
HETATM 7214  O   HOH S  95      22.993   1.861  18.910  1.00 40.23           O
HETATM 7215  O   HOH S  96      -5.124 -21.696 -20.529  1.00 22.23           O
HETATM 7216  O   HOH S  97      13.022 -21.815  33.468  1.00 31.04           O
HETATM 7217  O   HOH S  98       8.446   2.272 -30.583  1.00 24.16           O
HETATM 7218  O   HOH S  99      15.687  20.473  20.519  1.00 29.45           O
HETATM 7219  O   HOH S 100      11.782 -23.506  28.370  1.00 28.91           O
HETATM 7220  O   HOH S 101       0.094  -2.760  12.677  1.00 26.68           O
HETATM 7221  O   HOH S 102     -17.159  35.068 -39.917  1.00 42.31           O
HETATM 7222  O   HOH S 103      22.503  -8.477  29.148  1.00 33.52           O
HETATM 7223  O   HOH S 104      19.260  15.323 -14.402  1.00 34.35           O
HETATM 7224  O   HOH S 105       4.865  29.275 -50.977  1.00 32.19           O
HETATM 7225  O   HOH S 106      13.240 -11.401  -6.419  1.00 26.11           O
HETATM 7226  O   HOH S 107      15.098 -14.493  -6.034  1.00 29.44           O
HETATM 7227  O   HOH S 108       6.394  -0.621  26.066  1.00 35.64           O
HETATM 7228  O   HOH S 109       5.771   1.196  -7.783  1.00 39.02           O
HETATM 7229  O   HOH S 110     -19.923  27.814 -51.576  1.00 31.99           O
HETATM 7230  O   HOH S 111      21.320   3.832   3.583  1.00 32.96           O
HETATM 7231  O   HOH S 112       3.452  32.724 -34.084  1.00 29.96           O
HETATM 7232  O   HOH S 113     -18.914  22.481 -67.486  1.00 32.85           O
HETATM 7233  O   HOH S 114      -8.190  -2.051 -42.700  1.00 42.17           O
HETATM 7234  O   HOH S 115      11.821  -4.201 -42.722  1.00 25.73           O
HETATM 7235  O   HOH S 116      25.336   2.278   8.247  1.00 34.96           O
HETATM 7236  O   HOH S 117       5.446  35.150 -60.344  1.00 34.19           O
HETATM 7237  O   HOH S 118      25.566  13.554   3.847  1.00 29.89           O
HETATM 7238  O   HOH S 119      22.215  -5.729   0.133  1.00 35.77           O
HETATM 7239  O   HOH S 120      32.762   5.060  -5.201  1.00 36.08           O
HETATM 7240  O   HOH S 121      -8.191   0.289 -54.050  1.00 39.59           O
HETATM 7241  O   HOH S 122       6.706   0.411 -24.530  1.00 23.56           O
HETATM 7242  O   HOH S 123       8.662  59.844 -49.007  1.00 30.63           O
HETATM 7243  O   HOH S 124       0.022 -12.753 -42.630  1.00 40.45           O
HETATM 7244  O   HOH S 125       3.325  -5.782 -27.925  1.00 18.55           O
HETATM 7245  O   HOH S 126      -3.089  30.945 -61.513  1.00 21.75           O
HETATM 7246  O   HOH S 127       8.189  20.792   9.867  1.00 27.05           O
HETATM 7247  O   HOH S 128     -12.512  42.842 -39.738  1.00 24.87           O
HETATM 7248  O   HOH S 129       7.681   5.528 -24.088  1.00 21.16           O
HETATM 7249  O   HOH S 130       2.624  41.420 -60.209  1.00 29.06           O
HETATM 7250  O   HOH S 131      -8.868  -7.690 -26.569  1.00 36.00           O
```

[1953]

```
HETATM 7251  O   HOH S 132       6.993  34.813 -41.826  1.00 27.82           O
HETATM 7252  O   HOH S 133       2.675  -0.632  19.294  1.00 23.81           O
HETATM 7253  O   HOH S 134       6.848  35.050 -44.328  1.00 34.98           O
HETATM 7254  O   HOH S 135      24.409 -10.630  28.538  1.00 28.44           O
HETATM 7255  O   HOH S 136       7.046   6.696  26.128  1.00 27.59           O
HETATM 7256  O   HOH S 137      22.582  -7.720  -6.426  1.00 34.13           O
HETATM 7257  O   HOH S 138       6.799   4.214 -32.122  1.00 26.78           O
HETATM 7258  O   HOH S 139      -1.248 -24.439 -10.355  1.00 29.33           O
HETATM 7259  O   HOH S 140       6.307  55.918 -54.333  1.00 28.50           O
HETATM 7260  O   HOH S 141      27.147  -0.441 -61.563  1.00 29.81           O
HETATM 7261  O   HOH S 142      -8.722  36.946 -40.643  1.00 38.21           O
HETATM 7262  O   HOH S 143      13.891 -20.311  36.810  1.00 27.68           O
HETATM 7263  O   HOH S 144      -5.683 -19.140 -19.122  1.00 25.33           O
HETATM 7264  O   HOH S 145      -2.424   2.574 -50.933  1.00 27.30           O
HETATM 7265  O   HOH S 146      10.811  45.810 -34.520  1.00 42.93           O
HETATM 7266  O   HOH S 147      14.038  -5.813 -42.431  1.00 27.30           O
HETATM 7267  O   HOH S 148      -5.980   3.946 -21.645  1.00 31.06           O
HETATM 7268  O   HOH S 149      20.962  -7.405   1.835  1.00 28.85           O
HETATM 7269  O   HOH S 150      25.412  -9.142   9.832  1.00 26.22           O
HETATM 7270  O   HOH S 151       0.453   4.887  21.151  1.00 33.12           O
HETATM 7271  O   HOH S 152      23.985  -3.465  21.912  1.00 34.59           O
HETATM 7272  O   HOH S 153       1.833 -26.902  -5.421  1.00 35.76           O
HETATM 7273  O   HOH S 154       3.339  28.293 -43.682  1.00 37.41           O
HETATM 7274  O   HOH S 155      -5.505   4.533 -25.614  1.00 34.70           O
HETATM 7275  O   HOH S 156       0.863 -13.300  15.490  1.00 25.68           O
HETATM 7276  O   HOH S 157      20.925  -2.675   7.077  1.00 16.19           O
HETATM 7277  O   HOH S 158      21.864   7.760  13.165  1.00 23.55           O
HETATM 7278  O   HOH S 159      19.011   8.365 -26.567  1.00 32.88           O
HETATM 7279  O   HOH S 160      16.823  -1.889   1.149  1.00 24.12           O
HETATM 7280  O   HOH S 161      18.324  11.668   0.757  1.00 27.59           O
HETATM 7281  O   HOH S 162      15.365  -4.456  39.605  1.00 26.77           O
HETATM 7282  O   HOH S 163     -18.445  31.901 -46.213  1.00 27.47           O
HETATM 7283  O   HOH S 164     -13.517  -1.421 -39.665  1.00 40.18           O
HETATM 7284  O   HOH S 165      -3.329 -20.109 -17.855  1.00 26.29           O
HETATM 7285  O   HOH S 166      -4.238  43.627 -60.558  1.00 27.95           O
HETATM 7286  O   HOH S 167      22.251  -5.152  24.029  1.00 27.73           O
HETATM 7287  O   HOH S 168       1.331  -8.791  -6.086  1.00 25.75           O
HETATM 7288  O   HOH S 169      15.947  13.576  23.995  1.00 28.18           O
HETATM 7289  O   HOH S 170      14.599  -6.253 -33.723  1.00 28.83           O
HETATM 7290  O   HOH S 171      22.448   5.936  12.754  1.00 28.87           O
HETATM 7291  O   HOH S 172      18.839   4.957  22.036  1.00 35.10           O
HETATM 7292  O   HOH S 173      11.411   7.437  27.305  1.00 33.12           O
HETATM 7293  O   HOH S 174      15.566 -13.927 -21.379  1.00 28.03           O
HETATM 7294  O   HOH S 175       3.409  -2.876  27.618  1.00 32.67           O
HETATM 7295  O   HOH S 176       7.291  44.137 -32.051  1.00 33.24           O
HETATM 7296  O   HOH S 177      21.453  -3.020 -34.552  1.00 34.05           O
HETATM 7297  O   HOH S 178      -1.949  29.165 -31.528  1.00 29.44           O
HETATM 7298  O   HOH S 179       1.379   5.741 -21.924  1.00 45.71           O
HETATM 7299  O   HOH S 180       6.995   3.532  28.334  1.00 46.38           O
HETATM 7300  O   HOH S 181       3.571 -24.847  -1.772  1.00 36.61           O
HETATM 7301  O   HOH S 182     -22.482  33.900 -56.778  1.00 32.41           O
HETATM 7302  O   HOH S 183       8.876 -10.536 -49.296  1.00 44.35           O
HETATM 7303  O   HOH S 184       5.713  16.848   3.885  1.00 27.04           O
HETATM 7304  O   HOH S 185       1.028 -11.267   0.328  1.00 34.99           O
HETATM 7305  O   HOH S 186       6.759  66.127 -42.831  1.00 39.98           O
HETATM 7306  O   HOH S 187      25.310   8.907 -17.641  1.00 30.67           O
HETATM 7307  O   HOH S 188      35.669   4.757 -52.091  1.00 42.96           O
HETATM 7308  O   HOH S 189      -2.919  61.003 -38.126  1.00 39.28           O
HETATM 7309  O   HOH S 190      23.747  -5.315  26.239  1.00 33.41           O
HETATM 7310  O   HOH S 191      14.542  -9.154  -4.780  1.00 38.84           O
HETATM 7311  O   HOH S 192      12.171 -16.681  37.100  1.00 33.82           O
HETATM 7312  O   HOH S 193      29.856  11.499   2.773  1.00 39.26           O
HETATM 7313  O   HOH S 194      16.241  24.882  15.082  1.00 49.84           O
HETATM 7314  O   HOH S 195       0.474  22.907 -41.138  1.00 38.83           O
HETATM 7315  O   HOH S 196     -12.677  43.952 -44.808  1.00 28.30           O
HETATM 7316  O   HOH S 197      18.927  -1.850  -0.864  1.00 26.52           O
HETATM 7317  O   HOH S 198     -16.374  43.820 -46.618  1.00 31.54           O
HETATM 7318  O   HOH S 199      20.121  -9.467  35.868  1.00 20.00           O
```

[1954]

```
HETATM 7319  O   HOH S 200       1.377 -18.460 -26.828  1.00 22.80           O
HETATM 7320  O   HOH S 201      21.636  -6.854  35.784  1.00 26.45           O
HETATM 7321  O   HOH S 202       8.941   4.276  28.447  1.00 36.92           O
HETATM 7322  O   HOH S 203       5.390 -14.643   1.561  1.00 28.59           O
HETATM 7323  O   HOH S 204      22.642  16.148   0.926  1.00 34.60           O
HETATM 7324  O   HOH S 205       9.255   4.424 -11.038  1.00 33.25           O
HETATM 7325  O   HOH S 206       7.866  46.791 -32.021  1.00 32.93           O
HETATM 7326  O   HOH S 207       6.006 -21.747 -25.736  1.00 25.38           O
HETATM 7327  O   HOH S 208      15.323  15.789 -14.436  1.00 35.07           O
HETATM 7328  O   HOH S 209       8.262  -7.208  -3.011  1.00 29.88           O
HETATM 7329  O   HOH S 210       4.691 -17.126 -30.067  1.00 32.50           O
HETATM 7330  O   HOH S 211       5.070 -16.340   3.740  1.00 40.45           O
HETATM 7331  O   HOH S 212      10.051  22.930  18.580  1.00 39.81           O
HETATM 7332  O   HOH S 213      12.188  10.991 -51.008  1.00 18.71           O
HETATM 7333  O   HOH S 214      18.537  -7.549  27.357  1.00 18.70           O
HETATM 7334  O   HOH S 215     -10.311  56.300 -43.951  1.00 20.42           O
HETATM 7335  O   HOH S 216      -5.340   3.388 -18.682  1.00 23.67           O
HETATM 7336  O   HOH S 217      19.149  -6.122  25.600  1.00 26.82           O
HETATM 7337  O   HOH S 218      13.722 -21.480  -2.955  1.00 28.23           O
HETATM 7338  O   HOH S 219      12.169 -11.892 -51.452  1.00 47.06           O
HETATM 7339  O   HOH S 220      -8.827  37.551 -65.622  1.00 32.95           O
HETATM 7340  O   HOH S 221      13.837  -9.032  36.407  1.00 33.28           O
HETATM 7341  O   HOH S 222       7.153   5.169 -19.137  1.00 30.88           O
HETATM 7342  O   HOH S 223       9.912  -9.314  -4.386  1.00 27.39           O
HETATM 7343  O   HOH S 224     -11.785  50.688 -44.868  1.00 40.23           O
HETATM 7344  O   HOH S 225      -6.090  61.773 -49.323  1.00 33.59           O
HETATM 7345  O   HOH S 226       8.641   6.562  -9.994  1.00 37.01           O
HETATM 7346  O   HOH S 227      25.867   3.476 -36.755  1.00 36.70           O
HETATM 7347  O   HOH S 228      26.174  16.882  10.265  1.00 35.47           O
HETATM 7348  O   HOH S 229      21.470  18.560   2.696  1.00 30.73           O
HETATM 7349  O   HOH S 230      15.875 -10.519  -3.534  1.00 31.67           O
HETATM 7350  O   HOH S 231      10.611  55.500 -54.568  1.00 31.47           O
HETATM 7351  O   HOH S 232      24.716  43.170 -63.119  1.00 37.75           O
HETATM 7352  O   HOH S 233       1.705  16.694 -62.956  1.00 36.31           O
HETATM 7353  O   HOH S 234      26.721   4.726  10.585  1.00 32.65           O
HETATM 7354  O   HOH S 235      14.220 -18.964  -2.541  1.00 36.90           O
HETATM 7355  O   HOH S 236      21.897  -8.525   7.392  1.00 37.60           O
HETATM 7356  O   HOH S 237      -7.371  17.621 -59.930  1.00 31.41           O
HETATM 7357  O   HOH S 238       5.323  -7.534 -56.407  1.00 16.82           O
HETATM 7358  O   HOH S 239      20.684  -7.048  27.110  1.00 26.02           O
HETATM 7359  O   HOH S 240      11.764  57.988 -53.206  1.00 33.19           O
HETATM 7360  O   HOH S 241       1.333   2.026 -26.830  1.00 26.16           O
HETATM 7361  O   HOH S 242      22.815  10.690  23.720  1.00 36.87           O
HETATM 7362  O   HOH S 243      26.154  16.992 -53.975  1.00 51.76           O
HETATM 7363  O   HOH S 244       3.408   4.968  28.278  1.00 34.41           O
HETATM 7364  O   HOH S 245      22.312  43.553 -63.427  1.00 39.22           O
HETATM 7365  O   HOH S 246      -2.866   9.748  23.359  1.00 49.27           O
HETATM 7366  O   HOH S 247       9.835  -4.958 -44.425  1.00 24.98           O
HETATM 7367  O   HOH S 248     -23.026  23.804 -61.607  1.00 37.26           O
HETATM 7368  O   HOH S 249      28.454  10.145   5.005  1.00 29.99           O
HETATM 7369  O   HOH S 250       6.101  60.336 -50.148  1.00 33.15           O
HETATM 7370  O   HOH S 251     -13.377  -6.108 -16.381  1.00 49.88           O
HETATM 7371  O   HOH S 252       4.774 -13.475 -31.973  1.00 36.03           O
HETATM 7372  O   HOH S 253      16.900  15.029  -6.688  1.00 29.76           O
HETATM 7373  O   HOH S 254       7.222 -19.264  24.442  1.00 28.53           O
HETATM 7374  O   HOH S 255     -12.947   5.134 -34.740  1.00 32.57           O
HETATM 7375  O   HOH S 256       4.012   7.351 -31.998  1.00 27.47           O
HETATM 7376  O   HOH S 257      16.654   2.763   2.460  1.00 37.80           O
HETATM 7377  O   HOH S 258       8.402  -3.965  -3.771  1.00 26.24           O
HETATM 7378  O   HOH S 259       9.681  11.014 -59.457  1.00 36.58           O
HETATM 7379  O   HOH S 260       5.607  -1.615  -9.076  1.00 38.20           O
HETATM 7380  O   HOH S 261      -8.074  42.875 -52.019  1.00 36.08           O
HETATM 7381  O   HOH S 262      18.848  14.452  -6.375  1.00 30.37           O
HETATM 7382  O   HOH S 263      18.119  12.797 -15.823  1.00 28.86           O
HETATM 7383  O   HOH S 264     -11.924   7.668 -36.329  1.00 37.51           O
HETATM 7384  O   HOH S 265      15.852  25.780  10.284  1.00 38.39           O
HETATM 7385  O   HOH S 266       7.997   9.277 -66.085  1.00 32.71           O
HETATM 7386  O   HOH S 267     -18.323  18.800 -59.130  1.00 34.79           O
```

[1955]

```
HETATM 7387  O   HOH S 268      -2.691  11.119 -17.578  1.00 39.77           O
HETATM 7388  O   HOH S 269      18.054 -11.027 -31.004  1.00 39.18           O
HETATM 7389  O   HOH S 270       1.494  -4.679  24.624  1.00 48.73           O
HETATM 7390  O   HOH S 271     -12.012   8.915 -33.464  1.00 42.14           O
HETATM 7391  O   HOH S 272      14.625   4.327   1.503  1.00 32.02           O
HETATM 7392  O   HOH S 273       4.753  -3.342 -34.196  1.00 35.07           O
HETATM 7393  O   HOH S 274      -1.000  58.018 -53.399  1.00 34.62           O
HETATM 7394  O   HOH S 275      -1.313  12.163 -64.428  1.00 45.03           O
HETATM 7395  O   HOH S 276      10.792  53.420 -59.024  1.00 37.68           O
HETATM 7396  O   HOH S 277      -1.858   8.952 -15.741  1.00 33.37           O
HETATM 7397  O   HOH S 278      16.090   6.150  -4.998  1.00 22.16           O
HETATM 7398  O   HOH S 279      21.986 -17.829  27.439  1.00 32.06           O
HETATM 7399  O   HOH S 280       2.117 -22.263 -25.897  1.00 23.55           O
HETATM 7400  O   HOH S 281      19.353   6.345 -31.124  1.00 28.05           O
HETATM 7401  O   HOH S 282       3.853  33.219 -59.106  1.00 29.80           O
HETATM 7402  O   HOH S 283       6.533   6.791 -32.483  1.00 33.56           O
HETATM 7403  O   HOH S 284      24.607  -1.919   1.438  1.00 28.00           O
HETATM 7404  O   HOH S 285      13.647  -8.026   2.259  1.00 27.33           O
HETATM 7405  O   HOH S 286       2.692 -15.148 -31.301  1.00 45.01           O
HETATM 7406  O   HOH S 287      14.214  35.118 -55.268  1.00 28.38           O
HETATM 7407  O   HOH S 288       5.025  14.703 -62.297  1.00 39.44           O
HETATM 7408  O   HOH S 289      23.970  11.320 -17.542  1.00 34.04           O
HETATM 7409  O   HOH S 290       5.167 -16.118  -2.627  1.00 27.42           O
HETATM 7410  O   HOH S 291      18.910  38.320 -61.531  1.00 40.60           O
HETATM 7411  O   HOH S 292      18.124   2.261 -37.583  1.00 37.55           O
HETATM 7412  O   HOH S 293      -3.491   6.710  26.569  1.00 43.54           O
HETATM 7413  O   HOH S 294      -4.276  30.761 -63.997  1.00 34.06           O
HETATM 7414  O   HOH S 295      -1.978  30.568 -65.786  1.00 44.14           O
HETATM 7415  O   HOH S 296     -13.714  20.529 -68.945  1.00 33.72           O
HETATM 7416  O   HOH S 297      -4.727  -6.126 -53.710  1.00 36.59           O
HETATM 7417  O   HOH S 298      15.971 -16.035 -24.122  1.00 41.75           O
HETATM 7418  O   HOH S 299      -4.187  61.539 -40.025  1.00 43.75           O
HETATM 7419  O   HOH S 300      14.964   7.257   2.874  1.00 32.81           O
HETATM 7420  O   HOH S 301      19.836  -5.082  34.256  1.00 24.13           O
HETATM 7421  O   HOH S 302       0.674 -24.923 -26.022  1.00 19.38           O
HETATM 7422  O   HOH S 303     -18.506  28.690 -42.030  1.00 36.96           O
HETATM 7423  O   HOH S 304       0.145  51.681 -59.948  1.00 29.94           O
HETATM 7424  O   HOH S 305     -19.836  33.225 -65.088  1.00 32.39           O
HETATM 7425  O   HOH S 306       8.585  18.578   4.330  1.00 33.40           O
HETATM 7426  O   HOH S 307      -5.244  28.834 -63.872  1.00 30.67           O
HETATM 7427  O   HOH S 308      -7.008  35.713 -65.771  1.00 26.50           O
HETATM 7428  O   HOH S 309      17.415  -9.195  -4.797  1.00 38.82           O
HETATM 7429  O   HOH S 310       7.783   6.941 -65.489  1.00 36.70           O
HETATM 7430  O   HOH S 311       3.438  32.510 -36.906  1.00 34.53           O
HETATM 7431  O   HOH S 312      31.717  12.655  -6.112  1.00 34.80           O
HETATM 7432  O   HOH S 313       5.645  28.904 -33.657  1.00 38.73           O
HETATM 7433  O   HOH S 314      14.823  10.677 -36.621  1.00 38.52           O
HETATM 7434  O   HOH S 315       0.515  25.032 -63.877  1.00 35.67           O
HETATM 7435  O   HOH S 316      -8.544  -1.056 -25.294  1.00 38.84           O
HETATM 7436  O   HOH S 317      20.532  12.973 -19.884  1.00 38.97           O
HETATM 7437  O   HOH S 318      17.081   8.916   2.981  1.00 36.40           O
HETATM 7438  O   HOH S 319      17.550  -0.450 -36.208  1.00 32.45           O
HETATM 7439  O   HOH S 320      -9.811  16.216  20.804  1.00 36.17           O
HETATM 7440  O   HOH S 321      26.063 -10.994  26.666  1.00 39.04           O
HETATM 7441  O   HOH S 322      -2.623  61.456 -48.943  1.00 42.70           O
HETATM 7442  O   HOH S 323       1.606  54.135 -30.255  1.00 29.51           O
HETATM 7443  O   HOH S 324      -4.381 -13.200  -9.046  1.00 31.12           O
HETATM 7444  O   HOH S 325      24.686 -13.636 -56.894  1.00 43.77           O
HETATM 7445  O   HOH S 326       9.126 -30.425  -4.020  1.00 43.90           O
HETATM 7446  O   HOH S 327       6.275  -8.636 -42.019  1.00 30.34           O
HETATM 7447  O   HOH S 328     -10.788   5.958 -39.910  1.00 34.09           O
HETATM 7448  O   HOH S 329      17.070  22.376  18.963  1.00 41.86           O
HETATM 7449  O   HOH S 330      -1.030  33.213 -60.147  1.00 34.71           O
HETATM 7450  O   HOH S 331      24.579  17.692   7.473  1.00 29.58           O
HETATM 7451  O   HOH S 332       6.318 -16.245   5.678  1.00 29.52           O
HETATM 7452  O   HOH S 333       4.031 -21.618 -26.543  1.00 31.84           O
HETATM 7453  O   HOH S 334      -7.780   9.011 -38.686  1.00 30.39           O
HETATM 7454  O   HOH S 335      -4.543  11.089  16.405  1.00 36.35           O
```

[1956]

```
HETATM 7455  O   HOH S 336      -0.493  33.333 -57.523  1.00 34.96           O
HETATM 7456  O   HOH S 337      33.060  11.063  -6.424  1.00 35.18           O
HETATM 7457  O   HOH S 338     -22.361  27.510 -64.826  1.00 35.00           O
HETATM 7458  O   HOH S 339       4.862  -5.464 -32.706  1.00 43.43           O
HETATM 7459  O   HOH S 340      21.758  11.959 -21.571  1.00 45.10           O
HETATM 7460  O   HOH S 341      26.575  -7.941   8.077  1.00 33.36           O
HETATM 7461  O   HOH S 342     -14.977  23.440 -68.262  1.00 42.56           O
HETATM 7462  O   HOH S 343      27.451   3.382 -29.283  1.00 43.60           O
HETATM 7463  O   HOH S 344      14.894 -22.491 -17.769  1.00 39.21           O
HETATM 7464  O   HOH S 345      13.815   0.511  -5.105  1.00 32.78           O
HETATM 7465  O   HOH S 346      28.425  21.354 -35.951  1.00 50.27           O
HETATM 7466  O   HOH S 347       7.225  47.693 -30.554  1.00 49.41           O
HETATM 7467  O   HOH S 348      15.814 -21.948  37.890  1.00 42.75           O
HETATM 7468  O   HOH S 349      12.001 -16.266 -30.517  1.00 44.51           O
HETATM 7469  O   HOH S 350       8.929 -16.177 -29.048  1.00 24.27           O
HETATM 7470  O   HOH S 351       7.619  -0.590  -9.228  1.00 28.36           O
HETATM 7471  O   HOH S 352      21.562 -13.244  12.992  1.00 23.79           O
HETATM 7472  O   HOH S 353      15.726 -24.218 -18.908  1.00 40.96           O
HETATM 7473  O   HOH S 354     -12.658  -5.244 -19.279  1.00 32.30           O
HETATM 7474  O   HOH S 355       0.698  29.429 -59.456  1.00 32.23           O
HETATM 7475  O   HOH S 356      -6.602  52.494 -57.711  1.00 35.41           O
HETATM 7476  O   HOH S 357      -6.887   3.268 -23.623  1.00 41.59           O
HETATM 7477  O   HOH S 358       1.476 -16.888  29.476  1.00 30.79           O
HETATM 7478  O   HOH S 359       7.573  -0.842  28.480  1.00 28.34           O
HETATM 7479  O   HOH S 360      22.860  -3.839 -40.426  1.00 33.34           O
HETATM 7480  O   HOH S 361      -3.858 -19.203 -10.377  1.00 31.88           O
HETATM 7481  O   HOH S 362      14.794 -19.379 -12.819  1.00 31.08           O
HETATM 7482  O   HOH S 363      17.983 -16.806  11.601  1.00 35.64           O
HETATM 7483  O   HOH S 364      14.947   6.086  -6.685  1.00 33.60           O
HETATM 7484  O   HOH S 365     -11.361  50.548 -46.910  1.00 48.02           O
HETATM 7485  O   HOH S 366      37.233  -2.324 -51.855  1.00 39.06           O
HETATM 7486  O   HOH S 367      -7.974  -5.828 -27.571  1.00 47.44           O
HETATM 7487  O   HOH S 368      19.287  33.548 -51.016  1.00 33.37           O
HETATM 7488  O   HOH S 369      13.689  12.334  -0.804  1.00 35.93           O
HETATM 7489  O   HOH S 370       1.893  20.370 -48.747  1.00 31.49           O
HETATM 7490  O   HOH S 371      -3.583  14.788 -27.307  1.00 35.38           O
HETATM 7491  O   HOH S 372      -1.131  17.163 -39.471  1.00 35.89           O
HETATM 7492  O   HOH S 373      16.258 -18.343 -22.382  1.00 37.08           O
HETATM 7493  O   HOH S 374     -17.546  22.687 -43.385  1.00 42.98           O
HETATM 7494  O   HOH S 375      -3.056  -5.887   3.923  1.00 36.11           O
HETATM 7495  O   HOH S 376      17.285   9.564 -37.758  1.00 42.40           O
HETATM 7496  O   HOH S 377      14.780  12.602  -3.380  1.00 34.20           O
HETATM 7497  O   HOH S 378      -8.652   1.267 -47.328  1.00 41.85           O
HETATM 7498  O   HOH S 379      -9.195  -8.311 -12.419  1.00 33.05           O
HETATM 7499  O   HOH S 380     -21.748  25.318 -65.831  1.00 45.83           O
HETATM 7500  O   HOH S 381      -3.510   6.261 -62.937  1.00 36.81           O
HETATM 7501  O   HOH S 382      22.366  -4.115  27.975  1.00 34.34           O
HETATM 7502  O   HOH S 383      25.640   1.653 -34.370  1.00 36.34           O
HETATM 7503  O   HOH S 384      22.878  -6.437  33.246  1.00 44.06           O
HETATM 7504  O   HOH S 385     -24.184  31.682 -55.492  1.00 39.28           O
HETATM 7505  O   HOH S 386      -6.701   4.196 -11.430  1.00 44.73           O
HETATM 7506  O   HOH S 387       7.551 -21.891  -2.649  1.00 27.23           O
HETATM 7507  O   HOH S 388      -0.357  19.849 -49.834  1.00 31.18           O
HETATM 7508  O   HOH S 389      23.155  46.219 -47.166  1.00 36.17           O
HETATM 7509  O   HOH S 390      -9.170 -12.994 -12.036  1.00 35.80           O
HETATM 7510  O   HOH S 391      -8.952   1.107 -56.626  1.00 37.37           O
HETATM 7511  O   HOH S 392       4.672  33.573 -45.640  1.00 15.33           O
HETATM 7512  O   HOH S 393       2.061  -2.902 -36.048  1.00 23.60           O
HETATM 7513  O   HOH S 394       7.759  -4.183 -35.418  1.00 35.12           O
HETATM 7514  O   HOH S 395     -19.652  22.462 -50.281  1.00 47.78           O
HETATM 7515  O   HOH S 396      -9.937  -1.446 -13.189  1.00 24.92           O
HETATM 7516  O   HOH S 397       2.892   9.282   3.076  1.00 24.48           O
HETATM 7517  O   HOH S 398      -1.575  -1.428  -5.803  1.00 42.04           O
HETATM 7518  O   HOH S 399       3.686   8.251 -29.047  1.00 27.67           O
HETATM 7519  O   HOH S 400       8.356  -6.586 -36.583  1.00 33.71           O
HETATM 7520  O   HOH S 401      29.277   4.118   1.930  1.00 50.12           O
HETATM 7521  O   HOH S 402      15.811 -30.958  -6.819  1.00 36.66           O
HETATM 7522  O   HOH S 403      28.981  15.409  19.762  1.00 36.26           O
```

[1957]

```
HETATM 7523  O   HOH S 404      16.795  12.014  -0.869  1.00 43.99           O
HETATM 7524  O   HOH S 405      27.823  15.041  -3.435  1.00 43.45           O
HETATM 7525  O   HOH S 406     -10.273  50.210 -48.784  1.00 44.13           O
HETATM 7526  O   HOH S 407      13.472  14.290  25.754  1.00 42.18           O
HETATM 7527  O   HOH S 408      -5.032  14.662 -33.612  1.00 36.67           O
HETATM 7528  O   HOH S 409      19.667 -12.906 -17.103  1.00 40.77           O
HETATM 7529  O   HOH S 410      26.961 -10.814  21.777  1.00 28.87           O
HETATM 7530  O   HOH S 411     -18.731  26.748 -47.218  1.00 45.48           O
HETATM 7531  O   HOH S 412     -10.555  -8.515 -10.847  1.00 52.54           O
HETATM 7532  O   HOH S 413      17.330  21.825  22.139  1.00 44.09           O
HETATM 7533  O   HOH S 414       4.564 -18.363  -3.181  1.00 44.25           O
HETATM 7534  O   HOH S 415      10.077  10.287 -33.753  1.00 37.67           O
HETATM 7535  O   HOH S 416      23.358 -18.353  30.040  1.00 48.16           O
HETATM 7536  O   HOH S 417       2.630   2.386   0.702  1.00 45.01           O
HETATM 7537  O   HOH S 418      -8.532   4.589 -21.054  1.00 48.59           O
HETATM 7538  O   HOH S 419     -13.559  41.427 -66.642  1.00 45.14           O
HETATM 7539  O   HOH S 420      29.645  -8.542 -30.213  1.00 40.24           O
HETATM 7540  O   HOH S 421       6.477  30.336 -52.396  1.00 46.48           O
HETATM 7541  O   HOH S 422      10.637  11.686 -62.048  1.00 60.42           O
HETATM 7542  O   HOH S 423      -6.172  13.357 -23.958  1.00 50.77           O
HETATM 7543  O   HOH S 424      -0.111  -7.637  -2.497  1.00 42.16           O
HETATM 7544  O   HOH S 425      -6.104  17.209 -65.606  1.00 41.99           O
TER    7550      HOH S 425
END
```

[1958]

[1959] [표 19]

Glk1spFv_HL(mscg385)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3    정밀화.
REMARK   3   프로그램      : PHENIX (1.18_3855: ???)
REMARK   3     저자        : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                : Hintze,Hung,Ioerger,Liebschner,McCoy,McKee,Moriarty,
REMARK   3                : Oeffner,Poon,Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,
REMARK   3                : Sauter,Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  X선 데이터.
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)         : 2.10
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)        : 35.35
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)     : 2.00
REMARK   3   범위의 완전성          (%)  : 99.53
REMARK   3   반사 수                    : 24789
REMARK   3   반사 수 (비이상)           : 24789
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값     (작업 + 시험 세트)     : 0.1842
REMARK   3   R값             (작업 세트)     : 0.1820
REMARK   3   자유 R값                       : 0.2238
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈   (%) : 4.99
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트       : 1238
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3  BIN       분해능 범위    COMPL.    NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWORK CCFREE
REMARK   3    1   35.35 -    4.37    1.00     2630   138  0.1481 0.1724   0.946  0.911
REMARK   3    2    4.37 -    3.47    1.00     2617   137  0.1493 0.1645   0.944  0.925
REMARK   3    3    3.47 -    3.03    1.00     2643   139  0.1762 0.2413   0.928  0.865
REMARK   3    4    3.03 -    2.75    1.00     2611   137  0.2018 0.2444   0.908  0.836
REMARK   3    5    2.75 -    2.55    1.00     2614   138  0.2139 0.2399   0.897  0.852
REMARK   3    6    2.55 -    2.40    1.00     2628   138  0.2119 0.2903   0.899  0.812
REMARK   3    7    2.40 -    2.28    0.99     2618   138  0.2278 0.3041   0.875  0.805
REMARK   3    8    2.28 -    2.18    0.99     2598   136  0.2425 0.3051   0.869  0.789
REMARK   3    9    2.18 -    2.10    0.99     2592   137  0.2570 0.3275   0.857  0.809
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법          : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경            : 1.11
REMARK   3   수축 반경            : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자     : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)       : 0.25
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반)   : 27.07
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  기하학적 구조 제한 라이브러리: GEOSTD + 모노머 라이브러리 + CDL V1.2
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3    결합       :  0.007   0.102   3641
REMARK   3    각도       :  0.927   8.660   4931
REMARK   3    키랄성     :  0.054   0.209    531
REMARK   3    평면성     :  0.006   0.036    638
```

[1960]

```
REMARK   3    이면각    : 14.876 143.726   1275
REMARK   3    최소 비결합 거리 : 1.936
REMARK   3
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3    모든 원자 충돌 점수 : 5.17
REMARK   3    라마찬드란 플롯:
REMARK   3      이상치 :  0.00 %
REMARK   3      허용   :  2.49 %
REMARK   3      선호   : 97.51 %
REMARK   3    회전 이성질체 이상치 :  2.08 %
REMARK   3    CBETA 편차         :  0.00 %
REMARK   3    펩티드 평면:
REMARK   3      CIS-프롤린      : 20.00 %
REMARK   3      CIS-전반        : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 프롤린  : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 전반    : 0.00 %
REMARK   3
REMARK   3  RAMA-Z (라마찬드란 플롯 Z 점수):
REMARK   3  해석: 불량 |RAMA-Z| > 3; 의심 2 < |RAMA-Z| < 3; 양호 |RAMA-Z| < 2.
REMARK   3  전체/나선/시트/루프에 대한 점수는 독립적으로 스케일링됨;
REMARK   3  따라서, 값은 단순하게 관련되어 있지 않음.
REMARK   3    전체 : -0.70 (0.36), 잔기: 481
REMARK   3    나선 : -3.95 (0.13), 잔기: 12
REMARK   3    시트 : -0.28 (0.35), 잔기: 214
REMARK   3    루프 : -0.32 (0.35), 잔기: 255
REMARK   3
REMARK   3                  min    max   평균 <Bi,j>   iso  aniso
REMARK   3     전체    :   17.03  79.53  34.70   3.54  3744     0
REMARK   3     단백질  :   17.03  79.53  34.58   3.54  3564     0
REMARK   3     물      :   21.44  59.90  37.08    N/A   180     0
REMARK   3     사슬  A:   17.03  75.27  32.31    N/A  1785     0
REMARK   3     사슬  S:   21.44  59.90  37.08    N/A   180     0
REMARK   3     사슬  B:   18.42  79.53  36.87    N/A  1779     0
REMARK   3     히스토그램:
REMARK   3             값            원자 수
REMARK   3      17.03 - 23.28        268
REMARK   3      23.28 - 29.53       1061
REMARK   3      29.53 - 35.78       1021
REMARK   3      35.78 - 42.03        635
REMARK   3      42.03 - 48.28        372
REMARK   3      48.28 - 54.53        220
REMARK   3      54.53 - 60.78         94
REMARK   3      60.78 - 67.03         59
REMARK   3      67.03 - 73.28         12
REMARK   3      73.28 - 79.53          2
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  비틀림 NCS 세부사항.
REMARK   3   NCS 군의 수 : 1
REMARK   3   NCS 군 : 1
REMARK   3     선택                : (사슬 'A' 및 (resid 1 내지 61
REMARK   3                         : 또는 (resid 62 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                         : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                         : 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2)) 또는 resid
REMARK   3                         : 63 내지 72 또는 (resid 73 및
REMARK   3                         : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                         : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                         : 명칭 OD1)) 또는 resid 74 내지 98
REMARK   3                         : 또는 (resid 99 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                         : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                         : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1
```

[1961]

```
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resid
REMARK   3                     : 100 내지 102 또는 (resid 103 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resid 104 내지
REMARK   3                     : 106 또는 (resid 107 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resid 108 내지 113 또는 (resid
REMARK   3                     : 114 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD1)) 또는 resid 115 내지
REMARK   3                     : 134 또는 resid 136 내지 153 또는
REMARK   3                     : (resid 154 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                     : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                     : 명칭 CG 또는 명칭 OD1)) 또는 resid 155
REMARK   3                     : 내지 163 또는 resid 165 내지
REMARK   3                     : 168 또는 (resid 169 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resid 170 내지 185 또는 (resid
REMARK   3                     : 186 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 187 내지
REMARK   3                     : 206 또는 (resid 207 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 (resid 208 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ )) 또는 resid 209 내지
REMARK   3                     : 222 또는 (resid 223 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resid 224 내지 228 또는 (resid
REMARK   3                     : 229 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 230 내지
REMARK   3                     : 241 또는 resid 243))
REMARK   3     선택            : (사슬 'B' 및 (resid 1 내지 61
REMARK   3                     : 또는 (resid 62 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2)) 또는 resid
REMARK   3                     : 63 내지 72 또는 (resid 73 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 OD1)) 또는 resid 74 내지 98
REMARK   3                     : 또는 (resid 99 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1
REMARK   3                     : 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resid
REMARK   3                     : 100 내지 102 또는 (resid 103 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
```

[1962]

```
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resid 104 내지
REMARK   3                     : 106 또는 (resid 107 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD2))
REMARK   3                     : 또는 resid 108 내지 113 또는 (resid
REMARK   3                     : 114 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD1)) 또는 resid 115 내지
REMARK   3                     : 153 또는 (resid 154 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 OD1))
REMARK   3                     : 또는 resid 155 내지 163 또는 resid
REMARK   3                     : 165 내지 168 또는 (resid 169 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는
REMARK   3                     : 명칭 OH )) 또는 resid 170 내지
REMARK   3                     : 185 또는 (resid 186 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE1 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resid 187 내지 206 또는 (resid
REMARK   3                     : 207 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 OD2)) 또는 (resid 208 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resid 209 내지 222 또는 (resid
REMARK   3                     : 223 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD1 또는 명칭 CE1 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 224 내지
REMARK   3                     : 228 또는 (resid 229 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는
REMARK   3                     : 명칭 CE2 또는 명칭 CZ 또는 명칭 OH ))
REMARK   3                     : 또는 resid 230 내지 241 또는 resid
REMARK   3                     : 243))
REMARK   3      제한된 비틀림          : 2077
REMARK   3      한계 미만 RMSD         : 1.050
REMARK   3      모든 제한 RMSD         : 8.581
REMARK   3     한계 미만 차이의 히스토그램:
REMARK   3        0.000 -    1.500: 1812
REMARK   3        1.500 -    3.000: 206
REMARK   3        3.000 -    4.500: 28
REMARK   3        4.500 -    6.000: 2
REMARK   3        6.000 -    7.500: 4
REMARK   3        7.500 -    9.000: 0
REMARK   3        9.000 -   10.500: 0
REMARK   3       10.500 -   12.000: 0
REMARK   3       12.000 -   13.500: 0
REMARK   3       13.500 -   15.000: 0
REMARK   3     한계 초과 차이의 히스토그램:
REMARK   3       15.000 -   28.300: 2
REMARK   3       28.300 -   41.600: 0
REMARK   3       41.600 -   54.900: 4
REMARK   3       54.900 -   68.200: 4
REMARK   3       68.200 -   81.500: 0
REMARK   3       81.500 -   94.800: 14
```

[1963]

```
REMARK   3      94.800 -  108.100: 0
REMARK   3     108.100 -  121.400: 0
REMARK   3     121.400 -  134.700: 0
REMARK   3     134.700 -  148.000: 1
REMARK   3
CRYST1   37.940   50.740   63.200  76.35  89.20  69.16 P 1
SCALE1      0.026357 -0.010032  0.002181        0.00000
SCALE2      0.000000  0.021088 -0.005381        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.016331        0.00000
ATOM      1  N   GLU A   1      54.363  -8.774  21.559  1.00 52.70           N
ATOM      2  CA  GLU A   1      53.425  -8.854  22.673  1.00 47.78           C
ATOM      3  C   GLU A   1      53.299 -10.281  23.213  1.00 45.28           C
ATOM      4  O   GLU A   1      53.056 -11.232  22.457  1.00 38.19           O
ATOM      5  CB  GLU A   1      52.040  -8.337  22.249  1.00 45.93           C
ATOM      6  N   VAL A   2      53.500 -10.430  24.522  1.00 38.06           N
ATOM      7  CA  VAL A   2      53.083 -11.649  25.194  1.00 37.89           C
ATOM      8  C   VAL A   2      51.564 -11.730  25.129  1.00 39.00           C
ATOM      9  O   VAL A   2      50.863 -10.746  25.392  1.00 38.77           O
ATOM     10  CB  VAL A   2      53.578 -11.674  26.648  1.00 36.12           C
ATOM     11  CG1 VAL A   2      52.968 -12.864  27.392  1.00 36.04           C
ATOM     12  CG2 VAL A   2      55.088 -11.736  26.698  1.00 34.68           C
ATOM     13  N   GLN A   3      51.041 -12.896  24.767  1.00 36.51           N
ATOM     14  CA  GLN A   3      49.601 -13.086  24.704  1.00 36.69           C
ATOM     15  C   GLN A   3      49.249 -14.393  25.383  1.00 36.28           C
ATOM     16  O   GLN A   3      49.896 -15.417  25.150  1.00 31.29           O
ATOM     17  CB  GLN A   3      49.100 -13.113  23.261  1.00 39.86           C
ATOM     18  CG  GLN A   3      49.494 -11.905  22.447  1.00 44.96           C
ATOM     19  CD  GLN A   3      48.346 -10.938  22.262  1.00 57.19           C
ATOM     20  OE1 GLN A   3      47.193 -11.350  22.102  1.00 60.57           O
ATOM     21  NE2 GLN A   3      48.652  -9.640  22.286  1.00 58.77           N
ATOM     22  N   LEU A   4      48.224 -14.350  26.223  1.00 32.09           N
ATOM     23  CA  LEU A   4      47.652 -15.535  26.842  1.00 31.08           C
ATOM     24  C   LEU A   4      46.144 -15.439  26.649  1.00 34.43           C
ATOM     25  O   LEU A   4      45.530 -14.451  27.066  1.00 32.78           O
ATOM     26  CB  LEU A   4      48.021 -15.608  28.327  1.00 28.47           C
ATOM     27  CG  LEU A   4      49.519 -15.688  28.620  1.00 28.30           C
ATOM     28  CD1 LEU A   4      49.791 -15.451  30.093  1.00 30.83           C
ATOM     29  CD2 LEU A   4      50.070 -17.042  28.201  1.00 27.86           C
ATOM     30  N   LEU A   5      45.557 -16.445  26.007  1.00 32.37           N
ATOM     31  CA  LEU A   5      44.141 -16.435  25.646  1.00 36.34           C
ATOM     32  C   LEU A   5      43.482 -17.704  26.174  1.00 33.32           C
ATOM     33  O   LEU A   5      43.778 -18.801  25.692  1.00 35.47           O
ATOM     34  CB  LEU A   5      43.972 -16.328  24.133  1.00 40.35           C
ATOM     35  CG  LEU A   5      42.812 -15.486  23.596  1.00 42.72           C
ATOM     36  CD1 LEU A   5      42.554 -15.883  22.143  1.00 51.40           C
ATOM     37  CD2 LEU A   5      41.542 -15.625  24.439  1.00 37.63           C
ATOM     38  N   GLU A   6      42.596 -17.552  27.157  1.00 33.63           N
ATOM     39  CA  GLU A   6      41.859 -18.665  27.748  1.00 34.32           C
ATOM     40  C   GLU A   6      40.612 -19.013  26.932  1.00 34.95           C
ATOM     41  O   GLU A   6      40.021 -18.161  26.263  1.00 33.90           O
ATOM     42  CB  GLU A   6      41.417 -18.330  29.177  1.00 35.12           C
ATOM     43  CG  GLU A   6      42.522 -18.068  30.188  1.00 35.04           C
ATOM     44  CD  GLU A   6      42.786 -16.589  30.405  1.00 33.57           C
ATOM     45  OE1 GLU A   6      42.415 -15.763  29.536  1.00 35.83           O
ATOM     46  OE2 GLU A   6      43.395 -16.249  31.438  1.00 31.39           O
ATOM     47  N   SER A   7      40.181 -20.270  27.045  1.00 35.05           N
ATOM     48  CA  SER A   7      38.937 -20.738  26.438  1.00 35.36           C
ATOM     49  C   SER A   7      38.356 -21.850  27.291  1.00 32.23           C
ATOM     50  O   SER A   7      39.089 -22.587  27.953  1.00 29.20           O
ATOM     51  CB  SER A   7      39.130 -21.303  25.023  1.00 33.19           C
ATOM     52  OG  SER A   7      39.748 -20.375  24.159  1.00 45.42           O
ATOM     53  N   GLY A   8      37.035 -21.990  27.241  1.00 31.11           N
ATOM     54  CA  GLY A   8      36.378 -23.150  27.805  1.00 28.86           C
ATOM     55  C   GLY A   8      35.399 -22.887  28.925  1.00 31.45           C
ATOM     56  O   GLY A   8      34.738 -23.835  29.376  1.00 34.96           O
ATOM     57  N   GLY A   9      35.263 -21.672  29.426  1.00 27.57           N
ATOM     58  CA  GLY A   9      34.252 -21.465  30.450  1.00 31.80           C
ATOM     59  C   GLY A   9      32.826 -21.738  29.988  1.00 36.78           C
```

[1964]

```
ATOM     60  O   GLY A   9      32.600 -22.147  28.843  1.00 37.81           O
ATOM     61  N   GLY A  10      31.860 -21.571  30.883  1.00 33.39           N
ATOM     62  CA  GLY A  10      30.459 -21.718  30.561  1.00 29.51           C
ATOM     63  C   GLY A  10      29.735 -22.331  31.731  1.00 30.48           C
ATOM     64  O   GLY A  10      30.309 -22.511  32.805  1.00 28.28           O
ATOM     65  N   LEU A  11      28.476 -22.714  31.501  1.00 29.49           N
ATOM     66  CA  LEU A  11      27.640 -23.308  32.540  1.00 28.91           C
ATOM     67  C   LEU A  11      27.857 -24.811  32.602  1.00 29.00           C
ATOM     68  O   LEU A  11      27.844 -25.489  31.577  1.00 25.64           O
ATOM     69  CB  LEU A  11      26.157 -23.009  32.295  1.00 29.25           C
ATOM     70  CG  LEU A  11      25.198 -23.643  33.305  1.00 27.41           C
ATOM     71  CD1 LEU A  11      25.244 -22.958  34.688  1.00 26.48           C
ATOM     72  CD2 LEU A  11      23.777 -23.653  32.743  1.00 29.39           C
ATOM     73  N   VAL A  12      28.046 -25.331  33.811  1.00 27.30           N
ATOM     74  CA  VAL A  12      28.293 -26.752  34.006  1.00 25.33           C
ATOM     75  C   VAL A  12      27.502 -27.186  35.227  1.00 29.43           C
ATOM     76  O   VAL A  12      27.241 -26.392  36.134  1.00 26.74           O
ATOM     77  CB  VAL A  12      29.806 -27.071  34.146  1.00 29.57           C
ATOM     78  CG1 VAL A  12      30.418 -26.356  35.310  1.00 27.97           C
ATOM     79  CG2 VAL A  12      30.039 -28.561  34.274  1.00 33.09           C
ATOM     80  N   GLN A  13      27.065 -28.414  35.210  1.00 27.03           N
ATOM     81  CA  GLN A  13      26.273 -28.959  36.294  1.00 31.49           C
ATOM     82  C   GLN A  13      27.183 -29.535  37.367  1.00 29.60           C
ATOM     83  O   GLN A  13      28.267 -30.038  37.058  1.00 31.26           O
ATOM     84  CB  GLN A  13      25.346 -30.044  35.765  1.00 32.45           C
ATOM     85  CG  GLN A  13      24.576 -29.577  34.546  1.00 38.10           C
ATOM     86  CD  GLN A  13      23.548 -28.516  34.908  1.00 35.08           C
ATOM     87  OE1 GLN A  13      22.838 -28.661  35.897  1.00 36.41           O
ATOM     88  NE2 GLN A  13      23.471 -27.442  34.114  1.00 31.45           N
ATOM     89  N   PRO A  14      26.792 -29.433  38.635  1.00 32.27           N
ATOM     90  CA  PRO A  14      27.608 -30.026  39.696  1.00 26.92           C
ATOM     91  C   PRO A  14      27.836 -31.501  39.409  1.00 33.42           C
ATOM     92  O   PRO A  14      26.914 -32.231  39.027  1.00 29.45           O
ATOM     93  CB  PRO A  14      26.765 -29.810  40.958  1.00 32.66           C
ATOM     94  CG  PRO A  14      25.905 -28.632  40.637  1.00 30.05           C
ATOM     95  CD  PRO A  14      25.589 -28.768  39.171  1.00 32.23           C
ATOM     96  N   GLY A  15      29.084 -31.935  39.581  1.00 27.94           N
ATOM     97  CA  GLY A  15      29.485 -33.274  39.219  1.00 29.44           C
ATOM     98  C   GLY A  15      29.988 -33.412  37.803  1.00 28.38           C
ATOM     99  O   GLY A  15      30.609 -34.430  37.480  1.00 30.86           O
ATOM    100  N   GLY A  16      29.778 -32.403  36.964  1.00 29.49           N
ATOM    101  CA  GLY A  16      30.237 -32.437  35.593  1.00 30.19           C
ATOM    102  C   GLY A  16      31.710 -32.092  35.438  1.00 32.82           C
ATOM    103  O   GLY A  16      32.443 -31.846  36.402  1.00 26.09           O
ATOM    104  N   SER A  17      32.140 -32.064  34.174  1.00 25.00           N
ATOM    105  CA  SER A  17      33.537 -31.860  33.815  1.00 29.57           C
ATOM    106  C   SER A  17      33.693 -30.675  32.874  1.00 30.23           C
ATOM    107  O   SER A  17      32.794 -30.369  32.082  1.00 28.06           O
ATOM    108  CB  SER A  17      34.125 -33.104  33.139  1.00 28.26           C
ATOM    109  OG  SER A  17      34.122 -34.189  34.040  1.00 35.69           O
ATOM    110  N   LEU A  18      34.859 -30.031  32.953  1.00 21.66           N
ATOM    111  CA  LEU A  18      35.237 -28.948  32.058  1.00 26.26           C
ATOM    112  C   LEU A  18      36.735 -29.017  31.777  1.00 29.34           C
ATOM    113  O   LEU A  18      37.523 -29.387  32.651  1.00 32.34           O
ATOM    114  CB  LEU A  18      34.888 -27.595  32.677  1.00 30.01           C
ATOM    115  CG  LEU A  18      34.107 -26.612  31.826  1.00 30.56           C
ATOM    116  CD1 LEU A  18      32.829 -27.276  31.312  1.00 30.18           C
ATOM    117  CD2 LEU A  18      33.789 -25.394  32.679  1.00 32.36           C
ATOM    118  N   ARG A  19      37.140 -28.624  30.568  1.00 25.99           N
ATOM    119  CA  ARG A  19      38.562 -28.572  30.230  1.00 26.90           C
ATOM    120  C   ARG A  19      38.905 -27.184  29.719  1.00 26.37           C
ATOM    121  O   ARG A  19      38.525 -26.827  28.602  1.00 26.81           O
ATOM    122  CB  ARG A  19      38.939 -29.625  29.182  1.00 27.95           C
ATOM    123  CG  ARG A  19      40.452 -29.759  29.022  1.00 31.41           C
ATOM    124  CD  ARG A  19      40.864 -30.218  27.631  1.00 32.69           C
ATOM    125  NE  ARG A  19      40.384 -29.280  26.615  1.00 40.22           N
ATOM    126  CZ  ARG A  19      40.729 -29.307  25.329  1.00 36.57           C
ATOM    127  NH1 ARG A  19      41.579 -30.225  24.867  1.00 35.37           N
```

[1965]

```
ATOM    128  NH2 ARG A  19      40.222 -28.401  24.505  1.00 35.29           N
ATOM    129  N   LEU A  20      39.626 -26.402  30.519  1.00 20.82           N
ATOM    130  CA  LEU A  20      40.066 -25.088  30.074  1.00 23.80           C
ATOM    131  C   LEU A  20      41.368 -25.201  29.287  1.00 24.63           C
ATOM    132  O   LEU A  20      42.184 -26.089  29.531  1.00 21.71           O
ATOM    133  CB  LEU A  20      40.278 -24.137  31.260  1.00 21.76           C
ATOM    134  CG  LEU A  20      39.078 -23.931  32.183  1.00 24.60           C
ATOM    135  CD1 LEU A  20      39.433 -22.939  33.305  1.00 24.45           C
ATOM    136  CD2 LEU A  20      37.839 -23.482  31.409  1.00 25.17           C
ATOM    137  N   SER A  21      41.562 -24.280  28.349  1.00 21.70           N
ATOM    138  CA  SER A  21      42.819 -24.185  27.629  1.00 26.35           C
ATOM    139  C   SER A  21      43.286 -22.738  27.625  1.00 29.71           C
ATOM    140  O   SER A  21      42.508 -21.806  27.828  1.00 27.33           O
ATOM    141  CB  SER A  21      42.699 -24.747  26.196  1.00 26.43           C
ATOM    142  OG  SER A  21      41.573 -24.207  25.548  1.00 36.11           O
ATOM    143  N   CYS A  22      44.586 -22.560  27.426  1.00 30.87           N
ATOM    144  CA  CYS A  22      45.189 -21.237  27.384  1.00 28.47           C
ATOM    145  C   CYS A  22      46.253 -21.269  26.304  1.00 30.38           C
ATOM    146  O   CYS A  22      47.212 -22.038  26.407  1.00 29.54           O
ATOM    147  CB  CYS A  22      45.775 -20.862  28.754  1.00 30.72           C
ATOM    148  SG  CYS A  22      46.824 -19.377  28.840  1.00 40.87           S
ATOM    149  N   ALA A  23      46.056 -20.487  25.247  1.00 31.45           N
ATOM    150  CA  ALA A  23      46.974 -20.473  24.115  1.00 30.45           C
ATOM    151  C   ALA A  23      47.997 -19.369  24.318  1.00 31.24           C
ATOM    152  O   ALA A  23      47.629 -18.199  24.470  1.00 35.97           O
ATOM    153  CB  ALA A  23      46.221 -20.263  22.804  1.00 31.98           C
ATOM    154  N   ALA A  24      49.272 -19.735  24.327  1.00 31.23           N
ATOM    155  CA  ALA A  24      50.336 -18.781  24.598  1.00 28.99           C
ATOM    156  C   ALA A  24      51.005 -18.345  23.305  1.00 30.69           C
ATOM    157  O   ALA A  24      51.153 -19.132  22.365  1.00 28.25           O
ATOM    158  CB  ALA A  24      51.383 -19.390  25.528  1.00 24.87           C
ATOM    159  N   SER A  25      51.437 -17.088  23.269  1.00 30.22           N
ATOM    160  CA  SER A  25      52.253 -16.639  22.149  1.00 31.52           C
ATOM    161  C   SER A  25      53.118 -15.466  22.580  1.00 34.12           C
ATOM    162  O   SER A  25      52.811 -14.764  23.548  1.00 32.49           O
ATOM    163  CB  SER A  25      51.381 -16.262  20.939  1.00 36.39           C
ATOM    164  OG  SER A  25      50.647 -15.076  21.179  1.00 41.96           O
ATOM    165  N   GLY A  26      54.208 -15.265  21.835  1.00 34.98           N
ATOM    166  CA  GLY A  26      55.081 -14.121  22.024  1.00 36.47           C
ATOM    167  C   GLY A  26      56.189 -14.315  23.030  1.00 36.33           C
ATOM    168  O   GLY A  26      56.788 -13.330  23.468  1.00 38.90           O
ATOM    169  N   PHE A  27      56.482 -15.553  23.404  1.00 32.43           N
ATOM    170  CA  PHE A  27      57.567 -15.892  24.312  1.00 33.64           C
ATOM    171  C   PHE A  27      57.778 -17.388  24.174  1.00 32.53           C
ATOM    172  O   PHE A  27      56.931 -18.099  23.631  1.00 33.22           O
ATOM    173  CB  PHE A  27      57.279 -15.482  25.779  1.00 33.07           C
ATOM    174  CG  PHE A  27      56.106 -16.211  26.410  1.00 35.38           C
ATOM    175  CD1 PHE A  27      54.805 -15.770  26.200  1.00 29.56           C
ATOM    176  CD2 PHE A  27      56.310 -17.341  27.193  1.00 32.14           C
ATOM    177  CE1 PHE A  27      53.727 -16.433  26.756  1.00 30.94           C
ATOM    178  CE2 PHE A  27      55.237 -18.013  27.758  1.00 30.27           C
ATOM    179  CZ  PHE A  27      53.941 -17.559  27.538  1.00 31.18           C
ATOM    180  N   THR A  28      58.939 -17.847  24.614  1.00 32.58           N
ATOM    181  CA  THR A  28      59.298 -19.254  24.485  1.00 31.78           C
ATOM    182  C   THR A  28      58.548 -20.021  25.554  1.00 32.09           C
ATOM    183  O   THR A  28      58.931 -19.999  26.724  1.00 31.53           O
ATOM    184  CB  THR A  28      60.799 -19.435  24.641  1.00 34.00           C
ATOM    185  OG1 THR A  28      61.463 -18.404  23.908  1.00 34.39           O
ATOM    186  CG2 THR A  28      61.204 -20.784  24.126  1.00 30.57           C
ATOM    187  N   PHE A  29      57.492 -20.732  25.141  1.00 33.85           N
ATOM    188  CA  PHE A  29      56.548 -21.314  26.093  1.00 28.86           C
ATOM    189  C   PHE A  29      57.251 -22.259  27.062  1.00 30.87           C
ATOM    190  O   PHE A  29      57.104 -22.130  28.286  1.00 25.71           O
ATOM    191  CB  PHE A  29      55.429 -22.036  25.327  1.00 25.36           C
ATOM    192  CG  PHE A  29      54.302 -22.535  26.194  1.00 24.72           C
ATOM    193  CD1 PHE A  29      53.569 -21.667  26.979  1.00 25.03           C
ATOM    194  CD2 PHE A  29      53.963 -23.874  26.200  1.00 26.08           C
ATOM    195  CE1 PHE A  29      52.542 -22.125  27.769  1.00 27.11           C
```

[1966]

```
ATOM    196  CE2 PHE A  29      52.923 -24.342  26.978  1.00 26.18           C
ATOM    197  CZ  PHE A  29      52.211 -23.463  27.770  1.00 25.20           C
ATOM    198  N   SER A  30      58.067 -23.184  26.538  1.00 24.59           N
ATOM    199  CA  SER A  30      58.663 -24.209  27.392  1.00 28.25           C
ATOM    200  C   SER A  30      59.703 -23.657  28.370  1.00 29.50           C
ATOM    201  O   SER A  30      60.206 -24.422  29.208  1.00 28.82           O
ATOM    202  CB  SER A  30      59.311 -25.293  26.531  1.00 26.50           C
ATOM    203  OG  SER A  30      60.297 -24.714  25.688  1.00 37.15           O
ATOM    204  N   SER A  31      60.025 -22.366  28.314  1.00 27.07           N
ATOM    205  CA  SER A  31      60.982 -21.774  29.243  1.00 29.57           C
ATOM    206  C   SER A  31      60.339 -21.202  30.498  1.00 29.53           C
ATOM    207  O   SER A  31      61.032 -20.536  31.272  1.00 32.46           O
ATOM    208  CB  SER A  31      61.791 -20.670  28.554  1.00 30.47           C
ATOM    209  OG  SER A  31      62.636 -21.211  27.552  1.00 33.39           O
ATOM    210  N   TYR A  32      59.048 -21.447  30.731  1.00 28.40           N
ATOM    211  CA  TYR A  32      58.354 -20.860  31.873  1.00 26.04           C
ATOM    212  C   TYR A  32      57.359 -21.839  32.464  1.00 25.75           C
ATOM    213  O   TYR A  32      56.618 -22.509  31.737  1.00 25.94           O
ATOM    214  CB  TYR A  32      57.608 -19.584  31.485  1.00 26.79           C
ATOM    215  CG  TYR A  32      58.508 -18.496  30.973  1.00 31.77           C
ATOM    216  CD1 TYR A  32      59.111 -17.612  31.850  1.00 33.91           C
ATOM    217  CD2 TYR A  32      58.773 -18.362  29.613  1.00 37.15           C
ATOM    218  CE1 TYR A  32      59.948 -16.621  31.405  1.00 38.20           C
ATOM    219  CE2 TYR A  32      59.624 -17.359  29.151  1.00 40.30           C
ATOM    220  CZ  TYR A  32      60.205 -16.493  30.062  1.00 38.94           C
ATOM    221  OH  TYR A  32      61.038 -15.486  29.641  1.00 42.42           O
ATOM    222  N   ALA A  33      57.337 -21.899  33.787  1.00 25.91           N
ATOM    223  CA  ALA A  33      56.216 -22.497  34.483  1.00 24.88           C
ATOM    224  C   ALA A  33      54.968 -21.634  34.286  1.00 24.83           C
ATOM    225  O   ALA A  33      55.041 -20.436  33.998  1.00 26.80           O
ATOM    226  CB  ALA A  33      56.531 -22.653  35.971  1.00 26.12           C
ATOM    227  N   MET A  34      53.809 -22.259  34.423  1.00 24.98           N
ATOM    228  CA  MET A  34      52.540 -21.560  34.280  1.00 24.14           C
ATOM    229  C   MET A  34      51.654 -21.873  35.471  1.00 21.60           C
ATOM    230  O   MET A  34      51.761 -22.949  36.064  1.00 22.22           O
ATOM    231  CB  MET A  34      51.814 -21.964  32.992  1.00 21.03           C
ATOM    232  CG  MET A  34      52.594 -21.749  31.690  1.00 20.98           C
ATOM    233  SD  MET A  34      52.643 -20.015  31.157  1.00 30.01           S
ATOM    234  CE  MET A  34      50.905 -19.614  31.065  1.00 27.40           C
ATOM    235  N   SER A  35      50.745 -20.942  35.788  1.00 24.21           N
ATOM    236  CA  SER A  35      49.802 -21.101  36.885  1.00 23.88           C
ATOM    237  C   SER A  35      48.373 -20.873  36.402  1.00 22.20           C
ATOM    238  O   SER A  35      48.133 -20.116  35.460  1.00 22.63           O
ATOM    239  CB  SER A  35      50.082 -20.107  38.043  1.00 25.70           C
ATOM    240  OG  SER A  35      50.951 -20.654  39.024  1.00 33.62           O
ATOM    241  N   TRP A  36      47.425 -21.530  37.067  1.00 18.28           N
ATOM    242  CA  TRP A  36      46.024 -21.149  36.999  1.00 22.03           C
ATOM    243  C   TRP A  36      45.644 -20.482  38.315  1.00 20.21           C
ATOM    244  O   TRP A  36      46.005 -20.961  39.395  1.00 19.04           O
ATOM    245  CB  TRP A  36      45.103 -22.346  36.736  1.00 20.96           C
ATOM    246  CG  TRP A  36      45.157 -22.918  35.336  1.00 22.79           C
ATOM    247  CD1 TRP A  36      45.863 -24.022  34.927  1.00 25.79           C
ATOM    248  CD2 TRP A  36      44.462 -22.440  34.169  1.00 23.11           C
ATOM    249  NE1 TRP A  36      45.644 -24.259  33.589  1.00 18.45           N
ATOM    250  CE2 TRP A  36      44.792 -23.305  33.101  1.00 20.51           C
ATOM    251  CE3 TRP A  36      43.583 -21.379  33.926  1.00 21.06           C
ATOM    252  CZ2 TRP A  36      44.292 -23.124  31.812  1.00 24.50           C
ATOM    253  CZ3 TRP A  36      43.089 -21.204  32.642  1.00 25.91           C
ATOM    254  CH2 TRP A  36      43.441 -22.066  31.605  1.00 24.56           C
ATOM    255  N   VAL A  37      44.929 -19.371  38.209  1.00 20.61           N
ATOM    256  CA  VAL A  37      44.460 -18.582  39.344  1.00 22.05           C
ATOM    257  C   VAL A  37      42.990 -18.251  39.099  1.00 23.67           C
ATOM    258  O   VAL A  37      42.629 -17.825  38.000  1.00 24.94           O
ATOM    259  CB  VAL A  37      45.280 -17.286  39.485  1.00 20.70           C
ATOM    260  CG1 VAL A  37      44.684 -16.362  40.561  1.00 22.37           C
ATOM    261  CG2 VAL A  37      46.782 -17.594  39.740  1.00 20.92           C
ATOM    262  N   ARG A  38      42.150 -18.407  40.114  1.00 22.72           N
ATOM    263  CA  ARG A  38      40.731 -18.144  39.936  1.00 23.02           C
```

[1967]

```
ATOM    264  C   ARG A  38      40.247 -17.075  40.916  1.00 23.43           C
ATOM    265  O   ARG A  38      40.869 -16.808  41.941  1.00 25.98           O
ATOM    266  CB  ARG A  38      39.895 -19.428  40.096  1.00 20.25           C
ATOM    267  CG  ARG A  38      39.831 -19.997  41.508  1.00 22.14           C
ATOM    268  CD  ARG A  38      38.974 -21.252  41.552  1.00 23.75           C
ATOM    269  NE  ARG A  38      38.959 -21.859  42.885  1.00 25.68           N
ATOM    270  CZ  ARG A  38      38.513 -23.087  43.142  1.00 23.79           C
ATOM    271  NH1 ARG A  38      38.023 -23.863  42.168  1.00 22.89           N
ATOM    272  NH2 ARG A  38      38.567 -23.550  44.377  1.00 27.03           N
ATOM    273  N   GLN A  39      39.113 -16.464  40.586  1.00 21.99           N
ATOM    274  CA  GLN A  39      38.520 -15.415  41.410  1.00 24.33           C
ATOM    275  C   GLN A  39      37.011 -15.581  41.369  1.00 24.96           C
ATOM    276  O   GLN A  39      36.380 -15.277  40.354  1.00 25.81           O
ATOM    277  CB  GLN A  39      38.921 -14.030  40.917  1.00 27.13           C
ATOM    278  CG  GLN A  39      38.397 -12.912  41.795  1.00 27.33           C
ATOM    279  CD  GLN A  39      39.007 -11.582  41.439  1.00 29.89           C
ATOM    280  OE1 GLN A  39      39.222 -11.283  40.268  1.00 30.83           O
ATOM    281  NE2 GLN A  39      39.314 -10.777  42.455  1.00 31.45           N
ATOM    282  N   ALA A  40      36.442 -16.089  42.454  1.00 26.88           N
ATOM    283  CA  ALA A  40      35.002 -16.232  42.549  1.00 26.01           C
ATOM    284  C   ALA A  40      34.341 -14.851  42.488  1.00 34.97           C
ATOM    285  O   ALA A  40      34.970 -13.833  42.800  1.00 29.00           O
ATOM    286  CB  ALA A  40      34.643 -16.967  43.840  1.00 27.93           C
ATOM    287  N   PRO A  41      33.062 -14.793  42.073  1.00 36.95           N
ATOM    288  CA  PRO A  41      32.377 -13.495  41.923  1.00 39.13           C
ATOM    289  C   PRO A  41      32.521 -12.570  43.124  1.00 36.67           C
ATOM    290  O   PRO A  41      32.168 -12.952  44.239  1.00 38.12           O
ATOM    291  CB  PRO A  41      30.912 -13.906  41.720  1.00 42.03           C
ATOM    292  CG  PRO A  41      31.015 -15.262  41.028  1.00 39.78           C
ATOM    293  CD  PRO A  41      32.238 -15.924  41.603  1.00 34.69           C
ATOM    294  N   GLY A  42      33.043 -11.361  42.901  1.00 37.63           N
ATOM    295  CA  GLY A  42      33.226 -10.373  43.957  1.00 38.95           C
ATOM    296  C   GLY A  42      34.176 -10.770  45.073  1.00 44.47           C
ATOM    297  O   GLY A  42      34.109 -10.191  46.165  1.00 36.46           O
ATOM    298  N   CYS A  43      35.080 -11.722  44.829  1.00 35.66           N
ATOM    299  CA  CYS A  43      35.994 -12.208  45.852  1.00 31.99           C
ATOM    300  C   CYS A  43      37.428 -11.903  45.429  1.00 31.58           C
ATOM    301  O   CYS A  43      37.675 -11.223  44.431  1.00 26.92           O
ATOM    302  CB  CYS A  43      35.789 -13.700  46.100  1.00 32.72           C
ATOM    303  SG  CYS A  43      34.075 -14.137  46.508  1.00 49.52           S
ATOM    304  N   GLY A  44      38.378 -12.412  46.206  1.00 29.14           N
ATOM    305  CA  GLY A  44      39.783 -12.213  45.930  1.00 32.60           C
ATOM    306  C   GLY A  44      40.379 -13.315  45.082  1.00 28.75           C
ATOM    307  O   GLY A  44      39.699 -14.223  44.603  1.00 31.46           O
ATOM    308  N   LEU A  45      41.687 -13.225  44.906  1.00 29.48           N
ATOM    309  CA  LEU A  45      42.416 -14.157  44.072  1.00 25.68           C
ATOM    310  C   LEU A  45      42.785 -15.403  44.862  1.00 28.18           C
ATOM    311  O   LEU A  45      43.225 -15.319  46.013  1.00 26.02           O
ATOM    312  CB  LEU A  45      43.662 -13.472  43.526  1.00 26.81           C
ATOM    313  CG  LEU A  45      43.281 -12.205  42.770  1.00 27.43           C
ATOM    314  CD1 LEU A  45      44.510 -11.370  42.497  1.00 27.55           C
ATOM    315  CD2 LEU A  45      42.596 -12.602  41.453  1.00 28.18           C
ATOM    316  N   GLU A  46      42.593 -16.568  44.243  1.00 20.75           N
ATOM    317  CA  GLU A  46      42.937 -17.840  44.865  1.00 24.92           C
ATOM    318  C   GLU A  46      43.749 -18.652  43.869  1.00 29.00           C
ATOM    319  O   GLU A  46      43.264 -18.952  42.770  1.00 22.73           O
ATOM    320  CB  GLU A  46      41.686 -18.617  45.291  1.00 28.32           C
ATOM    321  CG  GLU A  46      42.013 -19.955  45.965  1.00 31.75           C
ATOM    322  CD  GLU A  46      40.769 -20.765  46.348  1.00 43.42           C
ATOM    323  OE1 GLU A  46      40.784 -21.436  47.413  1.00 50.42           O
ATOM    324  OE2 GLU A  46      39.771 -20.728  45.591  1.00 39.43           O
ATOM    325  N   TRP A  47      44.970 -19.009  44.256  1.00 25.79           N
ATOM    326  CA  TRP A  47      45.828 -19.833  43.410  1.00 24.45           C
ATOM    327  C   TRP A  47      45.271 -21.255  43.321  1.00 26.18           C
ATOM    328  O   TRP A  47      44.879 -21.843  44.334  1.00 24.60           O
ATOM    329  CB  TRP A  47      47.241 -19.833  43.982  1.00 23.49           C
ATOM    330  CG  TRP A  47      48.223 -20.690  43.255  1.00 26.47           C
ATOM    331  CD1 TRP A  47      48.979 -20.335  42.178  1.00 25.62           C
```

[1968]

```
ATOM    332  CD2 TRP A  47      48.573 -22.034  43.567  1.00 23.21           C
ATOM    333  NE1 TRP A  47      49.783 -21.380  41.795  1.00 31.38           N
ATOM    334  CE2 TRP A  47      49.545 -22.443  42.624  1.00 29.78           C
ATOM    335  CE3 TRP A  47      48.149 -22.945  44.539  1.00 25.37           C
ATOM    336  CZ2 TRP A  47      50.112 -23.718  42.636  1.00 24.30           C
ATOM    337  CZ3 TRP A  47      48.701 -24.209  44.544  1.00 23.82           C
ATOM    338  CH2 TRP A  47      49.674 -24.587  43.600  1.00 24.69           C
ATOM    339  N   VAL A  48      45.230 -21.806  42.108  1.00 23.95           N
ATOM    340  CA  VAL A  48      44.621 -23.106  41.840  1.00 23.22           C
ATOM    341  C   VAL A  48      45.670 -24.184  41.607  1.00 23.72           C
ATOM    342  O   VAL A  48      45.625 -25.247  42.228  1.00 22.21           O
ATOM    343  CB  VAL A  48      43.659 -23.029  40.638  1.00 22.15           C
ATOM    344  CG1 VAL A  48      43.130 -24.417  40.315  1.00 23.75           C
ATOM    345  CG2 VAL A  48      42.532 -22.108  40.959  1.00 25.04           C
ATOM    346  N   SER A  49      46.594 -23.946  40.678  1.00 22.52           N
ATOM    347  CA  SER A  49      47.500 -24.999  40.241  1.00 22.25           C
ATOM    348  C   SER A  49      48.686 -24.398  39.488  1.00 21.67           C
ATOM    349  O   SER A  49      48.593 -23.313  38.914  1.00 22.57           O
ATOM    350  CB  SER A  49      46.763 -26.017  39.356  1.00 23.23           C
ATOM    351  OG  SER A  49      47.658 -27.025  38.921  1.00 24.64           O
ATOM    352  N   ALA A  50      49.791 -25.138  39.462  1.00 19.52           N
ATOM    353  CA  ALA A  50      50.976 -24.736  38.706  1.00 22.87           C
ATOM    354  C   ALA A  50      51.590 -25.937  38.003  1.00 19.05           C
ATOM    355  O   ALA A  50      51.497 -27.072  38.482  1.00 19.81           O
ATOM    356  CB  ALA A  50      52.060 -24.117  39.602  1.00 20.06           C
ATOM    357  N   ILE A  51      52.265 -25.681  36.884  1.00 22.21           N
ATOM    358  CA  ILE A  51      52.988 -26.734  36.180  1.00 21.98           C
ATOM    359  C   ILE A  51      54.360 -26.213  35.738  1.00 20.75           C
ATOM    360  O   ILE A  51      54.484 -25.097  35.226  1.00 22.36           O
ATOM    361  CB  ILE A  51      52.163 -27.274  34.993  1.00 17.60           C
ATOM    362  CG1 ILE A  51      52.908 -28.416  34.306  1.00 21.32           C
ATOM    363  CG2 ILE A  51      51.847 -26.176  34.001  1.00 17.85           C
ATOM    364  CD1 ILE A  51      52.050 -29.231  33.299  1.00 21.26           C
ATOM    365  N   SER A  52      55.389 -27.044  35.913  1.00 27.28           N
ATOM    366  CA  SER A  52      56.758 -26.698  35.530  1.00 25.61           C
ATOM    367  C   SER A  52      56.878 -26.518  34.017  1.00 28.45           C
ATOM    368  O   SER A  52      56.037 -26.982  33.241  1.00 25.24           O
ATOM    369  CB  SER A  52      57.723 -27.799  35.957  1.00 26.24           C
ATOM    370  OG  SER A  52      57.497 -28.961  35.177  1.00 26.44           O
ATOM    371  N   GLY A  53      57.966 -25.857  33.598  1.00 26.49           N
ATOM    372  CA  GLY A  53      58.174 -25.602  32.181  1.00 22.60           C
ATOM    373  C   GLY A  53      58.199 -26.867  31.345  1.00 29.03           C
ATOM    374  O   GLY A  53      57.749 -26.868  30.197  1.00 28.08           O
ATOM    375  N   SER A  54      58.718 -27.960  31.903  1.00 29.65           N
ATOM    376  CA  SER A  54      58.765 -29.225  31.185  1.00 29.62           C
ATOM    377  C   SER A  54      57.445 -29.975  31.256  1.00 32.32           C
ATOM    378  O   SER A  54      57.177 -30.826  30.396  1.00 32.54           O
ATOM    379  CB  SER A  54      59.868 -30.120  31.752  1.00 34.07           C
ATOM    380  OG  SER A  54      59.502 -30.634  33.025  1.00 32.39           O
ATOM    381  N   GLY A  55      56.636 -29.699  32.280  1.00 26.28           N
ATOM    382  CA  GLY A  55      55.430 -30.447  32.539  1.00 26.88           C
ATOM    383  C   GLY A  55      55.624 -31.568  33.525  1.00 28.52           C
ATOM    384  O   GLY A  55      54.640 -32.214  33.903  1.00 28.19           O
ATOM    385  N   GLY A  56      56.868 -31.810  33.955  1.00 28.59           N
ATOM    386  CA  GLY A  56      57.187 -32.911  34.849  1.00 26.10           C
ATOM    387  C   GLY A  56      56.760 -32.706  36.292  1.00 31.31           C
ATOM    388  O   GLY A  56      56.640 -33.689  37.030  1.00 32.76           O
ATOM    389  N   SER A  57      56.554 -31.461  36.724  1.00 23.46           N
ATOM    390  CA  SER A  57      56.126 -31.198  38.094  1.00 28.28           C
ATOM    391  C   SER A  57      54.806 -30.453  38.072  1.00 22.58           C
ATOM    392  O   SER A  57      54.627 -29.532  37.273  1.00 22.40           O
ATOM    393  CB  SER A  57      57.173 -30.391  38.864  1.00 26.81           C
ATOM    394  OG  SER A  57      58.347 -31.172  38.990  1.00 31.42           O
ATOM    395  N   THR A  58      53.873 -30.872  38.926  1.00 23.14           N
ATOM    396  CA  THR A  58      52.573 -30.233  39.007  1.00 21.99           C
ATOM    397  C   THR A  58      52.229 -29.980  40.470  1.00 25.51           C
ATOM    398  O   THR A  58      52.591 -30.760  41.353  1.00 28.11           O
ATOM    399  CB  THR A  58      51.456 -31.070  38.367  1.00 20.93           C
```

[1969]

```
ATOM    400  OG1 THR A  58      51.352 -32.343  39.022  1.00 25.30           O
ATOM    401  CG2 THR A  58      51.721 -31.288  36.871  1.00 22.48           C
ATOM    402  N   TYR A  59      51.498 -28.899  40.714  1.00 19.62           N
ATOM    403  CA  TYR A  59      51.112 -28.521  42.071  1.00 24.59           C
ATOM    404  C   TYR A  59      49.660 -28.083  42.077  1.00 25.18           C
ATOM    405  O   TYR A  59      49.179 -27.471  41.120  1.00 25.83           O
ATOM    406  CB  TYR A  59      51.948 -27.375  42.615  1.00 20.47           C
ATOM    407  CG  TYR A  59      53.425 -27.595  42.513  1.00 23.24           C
ATOM    408  CD1 TYR A  59      54.113 -28.253  43.523  1.00 27.46           C
ATOM    409  CD2 TYR A  59      54.139 -27.127  41.422  1.00 25.50           C
ATOM    410  CE1 TYR A  59      55.477 -28.464  43.440  1.00 29.58           C
ATOM    411  CE2 TYR A  59      55.510 -27.333  41.325  1.00 28.48           C
ATOM    412  CZ  TYR A  59      56.166 -28.005  42.337  1.00 28.27           C
ATOM    413  OH  TYR A  59      57.518 -28.205  42.252  1.00 40.66           O
ATOM    414  N   TYR A  60      48.984 -28.351  43.186  1.00 24.81           N
ATOM    415  CA  TYR A  60      47.560 -28.091  43.280  1.00 24.35           C
ATOM    416  C   TYR A  60      47.218 -27.564  44.658  1.00 21.79           C
ATOM    417  O   TYR A  60      47.775 -28.024  45.654  1.00 25.31           O
ATOM    418  CB  TYR A  60      46.747 -29.358  43.045  1.00 21.76           C
ATOM    419  CG  TYR A  60      46.976 -30.029  41.713  1.00 25.91           C
ATOM    420  CD1 TYR A  60      46.253 -29.652  40.597  1.00 24.52           C
ATOM    421  CD2 TYR A  60      47.899 -31.053  41.576  1.00 27.03           C
ATOM    422  CE1 TYR A  60      46.445 -30.266  39.375  1.00 19.31           C
ATOM    423  CE2 TYR A  60      48.096 -31.681  40.356  1.00 26.28           C
ATOM    424  CZ  TYR A  60      47.359 -31.282  39.260  1.00 25.74           C
ATOM    425  OH  TYR A  60      47.539 -31.903  38.044  1.00 23.67           O
ATOM    426  N   ALA A  61      46.286 -26.623  44.714  1.00 22.93           N
ATOM    427  CA  ALA A  61      45.647 -26.320  45.988  1.00 24.79           C
ATOM    428  C   ALA A  61      44.863 -27.537  46.474  1.00 28.86           C
ATOM    429  O   ALA A  61      44.255 -28.271  45.683  1.00 24.00           O
ATOM    430  CB  ALA A  61      44.721 -25.114  45.845  1.00 24.81           C
ATOM    431  N   ASP A  62      44.816 -27.705  47.801  1.00 28.31           N
ATOM    432  CA  ASP A  62      44.242 -28.922  48.380  1.00 31.42           C
ATOM    433  C   ASP A  62      42.768 -29.105  48.027  1.00 30.40           C
ATOM    434  O   ASP A  62      42.282 -30.242  47.973  1.00 28.76           O
ATOM    435  CB  ASP A  62      44.399 -28.915  49.902  1.00 36.24           C
ATOM    436  CG  ASP A  62      45.847 -29.147  50.357  1.00 46.25           C
ATOM    437  OD1 ASP A  62      46.627 -29.811  49.632  1.00 48.80           O
ATOM    438  OD2 ASP A  62      46.203 -28.658  51.455  1.00 54.25           O
ATOM    439  N   SER A  63      42.047 -28.017  47.759  1.00 26.55           N
ATOM    440  CA  SER A  63      40.623 -28.147  47.483  1.00 29.50           C
ATOM    441  C   SER A  63      40.333 -28.709  46.089  1.00 34.10           C
ATOM    442  O   SER A  63      39.190 -29.104  45.823  1.00 32.71           O
ATOM    443  CB  SER A  63      39.944 -26.803  47.659  1.00 28.36           C
ATOM    444  OG  SER A  63      40.492 -25.860  46.757  1.00 36.89           O
ATOM    445  N   VAL A  64      41.326 -28.760  45.201  1.00 30.40           N
ATOM    446  CA  VAL A  64      41.134 -29.284  43.854  1.00 27.92           C
ATOM    447  C   VAL A  64      42.021 -30.485  43.572  1.00 30.94           C
ATOM    448  O   VAL A  64      42.027 -30.986  42.438  1.00 30.81           O
ATOM    449  CB  VAL A  64      41.348 -28.194  42.781  1.00 26.46           C
ATOM    450  CG1 VAL A  64      40.507 -26.957  43.103  1.00 25.47           C
ATOM    451  CG2 VAL A  64      42.829 -27.852  42.608  1.00 21.45           C
ATOM    452  N   LYS A  65      42.789 -30.949  44.558  1.00 28.21           N
ATOM    453  CA  LYS A  65      43.589 -32.152  44.376  1.00 32.11           C
ATOM    454  C   LYS A  65      42.698 -33.322  43.988  1.00 32.62           C
ATOM    455  O   LYS A  65      41.605 -33.496  44.535  1.00 30.85           O
ATOM    456  CB  LYS A  65      44.337 -32.490  45.662  1.00 34.68           C
ATOM    457  CG  LYS A  65      45.547 -31.640  45.953  1.00 35.09           C
ATOM    458  CD  LYS A  65      46.227 -32.140  47.241  1.00 43.03           C
ATOM    459  CE  LYS A  65      47.681 -31.685  47.354  1.00 41.03           C
ATOM    460  NZ  LYS A  65      48.498 -32.356  46.279  1.00 51.46           N
ATOM    461  N   GLY A  66      43.167 -34.128  43.037  1.00 30.67           N
ATOM    462  CA  GLY A  66      42.446 -35.307  42.616  1.00 29.30           C
ATOM    463  C   GLY A  66      41.264 -35.046  41.713  1.00 32.98           C
ATOM    464  O   GLY A  66      40.832 -35.958  41.004  1.00 41.81           O
ATOM    465  N   ARG A  67      40.735 -33.831  41.691  1.00 33.90           N
ATOM    466  CA  ARG A  67      39.682 -33.476  40.749  1.00 32.91           C
ATOM    467  C   ARG A  67      40.224 -32.752  39.528  1.00 28.46           C
```

[1970]

```
ATOM    468  O   ARG A  67      39.734 -32.965  38.418  1.00 26.95           O
ATOM    469  CB  ARG A  67      38.630 -32.581  41.427  1.00 27.84           C
ATOM    470  CG  ARG A  67      38.086 -33.100  42.731  1.00 30.19           C
ATOM    471  CD  ARG A  67      36.876 -32.286  43.177  1.00 34.52           C
ATOM    472  NE  ARG A  67      37.210 -30.975  43.754  1.00 31.08           N
ATOM    473  CZ  ARG A  67      36.824 -29.809  43.241  1.00 27.41           C
ATOM    474  NH1 ARG A  67      36.093 -29.776  42.140  1.00 32.31           N
ATOM    475  NH2 ARG A  67      37.151 -28.669  43.828  1.00 33.43           N
ATOM    476  N   PHE A  68      41.218 -31.889  39.717  1.00 26.90           N
ATOM    477  CA  PHE A  68      41.776 -31.087  38.644  1.00 24.90           C
ATOM    478  C   PHE A  68      43.104 -31.688  38.197  1.00 25.62           C
ATOM    479  O   PHE A  68      43.847 -32.281  38.991  1.00 22.34           O
ATOM    480  CB  PHE A  68      42.004 -29.630  39.069  1.00 24.80           C
ATOM    481  CG  PHE A  68      40.747 -28.834  39.330  1.00 29.20           C
ATOM    482  CD1 PHE A  68      39.510 -29.450  39.495  1.00 25.23           C
ATOM    483  CD2 PHE A  68      40.812 -27.444  39.379  1.00 22.99           C
ATOM    484  CE1 PHE A  68      38.376 -28.700  39.730  1.00 29.56           C
ATOM    485  CE2 PHE A  68      39.683 -26.689  39.610  1.00 22.94           C
ATOM    486  CZ  PHE A  68      38.459 -27.314  39.792  1.00 26.69           C
ATOM    487  N   THR A  69      43.388 -31.542  36.908  1.00 22.29           N
ATOM    488  CA  THR A  69      44.666 -31.959  36.337  1.00 24.74           C
ATOM    489  C   THR A  69      45.191 -30.817  35.491  1.00 24.89           C
ATOM    490  O   THR A  69      44.534 -30.407  34.532  1.00 27.85           O
ATOM    491  CB  THR A  69      44.510 -33.217  35.478  1.00 24.60           C
ATOM    492  OG1 THR A  69      43.990 -34.280  36.282  1.00 28.24           O
ATOM    493  CG2 THR A  69      45.856 -33.642  34.875  1.00 24.54           C
ATOM    494  N   ILE A  70      46.326 -30.295  35.841  1.00 22.37           N
ATOM    495  CA  ILE A  70      46.960 -29.293  35.002  1.00 21.83           C
ATOM    496  C   ILE A  70      47.915 -30.027  34.082  1.00 23.69           C
ATOM    497  O   ILE A  70      48.524 -31.022  34.476  1.00 22.52           O
ATOM    498  CB  ILE A  70      47.680 -28.228  35.849  1.00 19.51           C
ATOM    499  CG1 ILE A  70      48.139 -27.065  34.980  1.00 17.80           C
ATOM    500  CG2 ILE A  70      48.857 -28.816  36.601  1.00 21.16           C
ATOM    501  CD1 ILE A  70      48.811 -25.947  35.809  1.00 19.89           C
ATOM    502  N   SER A  71      48.002 -29.571  32.838  1.00 21.78           N
ATOM    503  CA  SER A  71      48.944 -30.126  31.886  1.00 24.51           C
ATOM    504  C   SER A  71      49.272 -29.050  30.865  1.00 23.81           C
ATOM    505  O   SER A  71      48.663 -27.968  30.848  1.00 21.73           O
ATOM    506  CB  SER A  71      48.395 -31.387  31.220  1.00 27.84           C
ATOM    507  OG  SER A  71      47.243 -31.079  30.469  1.00 28.81           O
ATOM    508  N   ARG A  72      50.268 -29.354  30.028  1.00 20.32           N
ATOM    509  CA  ARG A  72      50.702 -28.448  28.978  1.00 21.49           C
ATOM    510  C   ARG A  72      51.191 -29.261  27.789  1.00 24.07           C
ATOM    511  O   ARG A  72      51.657 -30.390  27.936  1.00 22.59           O
ATOM    512  CB  ARG A  72      51.812 -27.512  29.454  1.00 22.48           C
ATOM    513  CG  ARG A  72      53.095 -28.224  29.862  1.00 22.25           C
ATOM    514  CD  ARG A  72      54.047 -27.291  30.596  1.00 23.33           C
ATOM    515  NE  ARG A  72      54.458 -26.172  29.762  1.00 23.30           N
ATOM    516  CZ  ARG A  72      54.840 -24.992  30.229  1.00 23.84           C
ATOM    517  NH1 ARG A  72      54.868 -24.771  31.536  1.00 20.09           N
ATOM    518  NH2 ARG A  72      55.192 -24.029  29.388  1.00 21.59           N
ATOM    519  N   ASP A  73      51.082 -28.664  26.616  1.00 23.60           N
ATOM    520  CA  ASP A  73      51.588 -29.227  25.370  1.00 26.17           C
ATOM    521  C   ASP A  73      52.615 -28.226  24.864  1.00 25.55           C
ATOM    522  O   ASP A  73      52.255 -27.194  24.290  1.00 25.38           O
ATOM    523  CB  ASP A  73      50.449 -29.442  24.382  1.00 28.22           C
ATOM    524  CG  ASP A  73      50.873 -30.209  23.154  1.00 40.88           C
ATOM    525  OD1 ASP A  73      52.087 -30.209  22.822  1.00 41.71           O
ATOM    526  OD2 ASP A  73      49.982 -30.819  22.516  1.00 42.79           O
ATOM    527  N   ASN A  74      53.894 -28.512  25.089  1.00 23.03           N
ATOM    528  CA  ASN A  74      54.912 -27.565  24.657  1.00 27.64           C
ATOM    529  C   ASN A  74      55.053 -27.509  23.138  1.00 31.02           C
ATOM    530  O   ASN A  74      55.479 -26.477  22.615  1.00 35.43           O
ATOM    531  CB  ASN A  74      56.250 -27.904  25.324  1.00 28.84           C
ATOM    532  CG  ASN A  74      56.242 -27.570  26.816  1.00 28.50           C
ATOM    533  OD1 ASN A  74      55.487 -26.717  27.242  1.00 28.23           O
ATOM    534  ND2 ASN A  74      57.076 -28.238  27.599  1.00 33.62           N
ATOM    535  N   SER A  75      54.661 -28.558  22.410  1.00 27.76           N
```

[1971]

```
ATOM    536  CA  SER A  75      54.726 -28.462  20.955  1.00 31.20           C
ATOM    537  C   SER A  75      53.621 -27.573  20.416  1.00 30.08           C
ATOM    538  O   SER A  75      53.807 -26.906  19.397  1.00 32.94           O
ATOM    539  CB  SER A  75      54.627 -29.844  20.302  1.00 32.27           C
ATOM    540  OG  SER A  75      53.331 -30.390  20.447  1.00 38.46           O
ATOM    541  N   LYS A  76      52.482 -27.532  21.097  1.00 31.64           N
ATOM    542  CA  LYS A  76      51.353 -26.714  20.686  1.00 32.87           C
ATOM    543  C   LYS A  76      51.270 -25.388  21.436  1.00 32.40           C
ATOM    544  O   LYS A  76      50.392 -24.581  21.135  1.00 30.14           O
ATOM    545  CB  LYS A  76      50.042 -27.498  20.881  1.00 35.48           C
ATOM    546  CG  LYS A  76      49.704 -28.494  19.767  1.00 36.79           C
ATOM    547  CD  LYS A  76      48.425 -29.293  20.095  1.00 42.35           C
ATOM    548  CE  LYS A  76      48.433 -30.664  19.393  1.00 47.49           C
ATOM    549  NZ  LYS A  76      47.579 -31.711  20.058  1.00 46.84           N
ATOM    550  N   ASN A  77      52.151 -25.140  22.403  1.00 29.71           N
ATOM    551  CA  ASN A  77      52.138 -23.878  23.143  1.00 24.74           C
ATOM    552  C   ASN A  77      50.778 -23.660  23.809  1.00 24.98           C
ATOM    553  O   ASN A  77      50.176 -22.592  23.713  1.00 27.60           O
ATOM    554  CB  ASN A  77      52.505 -22.700  22.233  1.00 25.74           C
ATOM    555  CG  ASN A  77      54.006 -22.577  22.017  1.00 30.58           C
ATOM    556  OD1 ASN A  77      54.772 -23.430  22.455  1.00 35.56           O
ATOM    557  ND2 ASN A  77      54.429 -21.519  21.341  1.00 36.85           N
ATOM    558  N   THR A  78      50.289 -24.696  24.480  1.00 22.22           N
ATOM    559  CA  THR A  78      48.972 -24.666  25.084  1.00 22.60           C
ATOM    560  C   THR A  78      49.046 -25.235  26.488  1.00 22.64           C
ATOM    561  O   THR A  78      49.739 -26.226  26.729  1.00 20.71           O
ATOM    562  CB  THR A  78      47.958 -25.451  24.240  1.00 27.40           C
ATOM    563  OG1 THR A  78      47.845 -24.824  22.962  1.00 30.40           O
ATOM    564  CG2 THR A  78      46.593 -25.445  24.896  1.00 26.15           C
ATOM    565  N   LEU A  79      48.322 -24.588  27.399  1.00 23.65           N
ATOM    566  CA  LEU A  79      48.160 -24.987  28.788  1.00 21.79           C
ATOM    567  C   LEU A  79      46.725 -25.443  29.017  1.00 21.64           C
ATOM    568  O   LEU A  79      45.794 -24.821  28.508  1.00 23.57           O
ATOM    569  CB  LEU A  79      48.479 -23.797  29.699  1.00 22.05           C
ATOM    570  CG  LEU A  79      48.261 -23.935  31.199  1.00 26.02           C
ATOM    571  CD1 LEU A  79      49.287 -24.845  31.844  1.00 20.91           C
ATOM    572  CD2 LEU A  79      48.258 -22.540  31.851  1.00 25.66           C
ATOM    573  N   TYR A  80      46.541 -26.513  29.794  1.00 20.24           N
ATOM    574  CA  TYR A  80      45.218 -27.068  30.058  1.00 20.94           C
ATOM    575  C   TYR A  80      44.933 -27.161  31.548  1.00 25.01           C
ATOM    576  O   TYR A  80      45.843 -27.332  32.369  1.00 23.28           O
ATOM    577  CB  TYR A  80      45.043 -28.476  29.466  1.00 24.90           C
ATOM    578  CG  TYR A  80      45.305 -28.534  27.990  1.00 22.25           C
ATOM    579  CD1 TYR A  80      44.324 -28.180  27.078  1.00 21.35           C
ATOM    580  CD2 TYR A  80      46.557 -28.892  27.513  1.00 25.18           C
ATOM    581  CE1 TYR A  80      44.565 -28.228  25.706  1.00 23.96           C
ATOM    582  CE2 TYR A  80      46.810 -28.955  26.152  1.00 29.62           C
ATOM    583  CZ  TYR A  80      45.814 -28.623  25.253  1.00 30.76           C
ATOM    584  OH  TYR A  80      46.100 -28.672  23.908  1.00 31.85           O
ATOM    585  N   LEU A  81      43.648 -27.058  31.880  1.00 21.44           N
ATOM    586  CA  LEU A  81      43.133 -27.424  33.196  1.00 23.89           C
ATOM    587  C   LEU A  81      41.915 -28.313  33.004  1.00 23.37           C
ATOM    588  O   LEU A  81      40.846 -27.832  32.617  1.00 22.36           O
ATOM    589  CB  LEU A  81      42.763 -26.192  34.012  1.00 19.86           C
ATOM    590  CG  LEU A  81      42.463 -26.464  35.486  1.00 24.12           C
ATOM    591  CD1 LEU A  81      43.664 -27.137  36.163  1.00 24.97           C
ATOM    592  CD2 LEU A  81      42.159 -25.154  36.160  1.00 24.46           C
ATOM    593  N   GLN A  82      42.071 -29.594  33.301  1.00 24.11           N
ATOM    594  CA  GLN A  82      40.969 -30.547  33.288  1.00 25.72           C
ATOM    595  C   GLN A  82      40.306 -30.517  34.664  1.00 26.30           C
ATOM    596  O   GLN A  82      40.979 -30.705  35.679  1.00 24.44           O
ATOM    597  CB  GLN A  82      41.494 -31.941  32.943  1.00 25.15           C
ATOM    598  CG  GLN A  82      40.446 -33.040  32.891  1.00 24.41           C
ATOM    599  CD  GLN A  82      39.416 -32.773  31.832  1.00 28.33           C
ATOM    600  OE1 GLN A  82      39.750 -32.402  30.707  1.00 27.61           O
ATOM    601  NE2 GLN A  82      38.142 -32.900  32.201  1.00 28.70           N
ATOM    602  N   MET A  83      39.011 -30.210  34.707  1.00 23.09           N
ATOM    603  CA  MET A  83      38.283 -30.063  35.968  1.00 26.61           C
```

[1972]

```
ATOM    604  C   MET A  83      37.141 -31.071  36.018  1.00 30.35           C
ATOM    605  O   MET A  83      36.164 -30.942  35.273  1.00 26.24           O
ATOM    606  CB  MET A  83      37.741 -28.644  36.129  1.00 25.23           C
ATOM    607  CG  MET A  83      38.748 -27.515  35.894  1.00 29.44           C
ATOM    608  SD  MET A  83      37.922 -25.937  35.531  1.00 40.05           S
ATOM    609  CE  MET A  83      37.568 -25.390  37.171  1.00 33.01           C
ATOM    610  N   ASN A  84      37.260 -32.072  36.881  1.00 29.37           N
ATOM    611  CA  ASN A  84      36.212 -33.059  37.096  1.00 27.08           C
ATOM    612  C   ASN A  84      35.516 -32.817  38.427  1.00 29.86           C
ATOM    613  O   ASN A  84      36.009 -32.077  39.290  1.00 25.77           O
ATOM    614  CB  ASN A  84      36.778 -34.477  37.059  1.00 28.23           C
ATOM    615  CG  ASN A  84      37.402 -34.793  35.753  1.00 29.42           C
ATOM    616  OD1 ASN A  84      36.946 -34.319  34.713  1.00 30.80           O
ATOM    617  ND2 ASN A  84      38.477 -35.572  35.781  1.00 35.70           N
ATOM    618  N   SER A  85      34.355 -33.470  38.568  1.00 28.95           N
ATOM    619  CA  SER A  85      33.525 -33.426  39.778  1.00 30.77           C
ATOM    620  C   SER A  85      33.355 -32.004  40.294  1.00 25.07           C
ATOM    621  O   SER A  85      33.542 -31.718  41.476  1.00 27.40           O
ATOM    622  CB  SER A  85      34.108 -34.319  40.867  1.00 31.40           C
ATOM    623  OG  SER A  85      34.098 -35.664  40.456  1.00 30.85           O
ATOM    624  N   LEU A  86      32.966 -31.115  39.390  1.00 26.85           N
ATOM    625  CA  LEU A  86      32.875 -29.703  39.724  1.00 26.94           C
ATOM    626  C   LEU A  86      31.806 -29.448  40.787  1.00 29.63           C
ATOM    627  O   LEU A  86      30.763 -30.115  40.832  1.00 26.68           O
ATOM    628  CB  LEU A  86      32.595 -28.899  38.453  1.00 26.41           C
ATOM    629  CG  LEU A  86      33.830 -28.654  37.580  1.00 26.28           C
ATOM    630  CD1 LEU A  86      33.476 -28.120  36.210  1.00 24.64           C
ATOM    631  CD2 LEU A  86      34.768 -27.672  38.287  1.00 29.24           C
ATOM    632  N   ARG A  87      32.088 -28.480  41.655  1.00 25.31           N
ATOM    633  CA  ARG A  87      31.235 -28.087  42.765  1.00 28.15           C
ATOM    634  C   ARG A  87      30.801 -26.643  42.577  1.00 28.92           C
ATOM    635  O   ARG A  87      31.487 -25.853  41.918  1.00 26.00           O
ATOM    636  CB  ARG A  87      31.974 -28.191  44.121  1.00 35.09           C
ATOM    637  CG  ARG A  87      32.562 -29.548  44.465  1.00 34.20           C
ATOM    638  CD  ARG A  87      33.515 -29.478  45.673  1.00 38.41           C
ATOM    639  NE  ARG A  87      34.279 -30.725  45.763  1.00 42.51           N
ATOM    640  CZ  ARG A  87      35.421 -30.884  46.438  1.00 41.89           C
ATOM    641  NH1 ARG A  87      35.969 -29.876  47.104  1.00 46.17           N
ATOM    642  NH2 ARG A  87      36.043 -32.055  46.436  1.00 44.31           N
ATOM    643  N   ALA A  88      29.669 -26.285  43.196  1.00 24.82           N
ATOM    644  CA  ALA A  88      29.244 -24.894  43.137  1.00 28.05           C
ATOM    645  C   ALA A  88      30.372 -23.974  43.584  1.00 25.82           C
ATOM    646  O   ALA A  88      30.599 -22.923  42.976  1.00 23.70           O
ATOM    647  CB  ALA A  88      27.989 -24.665  43.993  1.00 27.44           C
ATOM    648  N   GLU A  89      31.148 -24.392  44.589  1.00 25.07           N
ATOM    649  CA  GLU A  89      32.195 -23.492  45.062  1.00 32.09           C
ATOM    650  C   GLU A  89      33.342 -23.335  44.074  1.00 27.46           C
ATOM    651  O   GLU A  89      34.248 -22.539  44.360  1.00 26.32           O
ATOM    652  CB  GLU A  89      32.762 -23.929  46.425  1.00 32.38           C
ATOM    653  CG  GLU A  89      33.361 -25.320  46.481  1.00 35.39           C
ATOM    654  CD  GLU A  89      32.499 -26.309  47.239  1.00 43.70           C
ATOM    655  OE1 GLU A  89      33.063 -27.019  48.108  1.00 44.67           O
ATOM    656  OE2 GLU A  89      31.268 -26.369  46.971  1.00 41.25           O
ATOM    657  N   ASP A  90      33.340 -24.052  42.943  1.00 25.32           N
ATOM    658  CA  ASP A  90      34.332 -23.833  41.891  1.00 22.95           C
ATOM    659  C   ASP A  90      33.936 -22.709  40.946  1.00 23.33           C
ATOM    660  O   ASP A  90      34.692 -22.398  40.020  1.00 23.85           O
ATOM    661  CB  ASP A  90      34.555 -25.110  41.067  1.00 23.22           C
ATOM    662  CG  ASP A  90      35.113 -26.258  41.892  1.00 31.30           C
ATOM    663  OD1 ASP A  90      36.088 -26.042  42.661  1.00 27.36           O
ATOM    664  OD2 ASP A  90      34.574 -27.381  41.766  1.00 29.10           O
ATOM    665  N   THR A  91      32.759 -22.123  41.131  1.00 21.52           N
ATOM    666  CA  THR A  91      32.339 -21.013  40.293  1.00 21.68           C
ATOM    667  C   THR A  91      33.315 -19.853  40.439  1.00 25.69           C
ATOM    668  O   THR A  91      33.602 -19.401  41.556  1.00 24.99           O
ATOM    669  CB  THR A  91      30.912 -20.590  40.679  1.00 24.74           C
ATOM    670  OG1 THR A  91      29.998 -21.644  40.337  1.00 23.34           O
ATOM    671  CG2 THR A  91      30.507 -19.322  39.959  1.00 22.38           C
```

[1973]

```
ATOM    672  N   ALA A  92      33.825 -19.368  39.309  1.00 23.88           N
ATOM    673  CA  ALA A  92      34.886 -18.367  39.335  1.00 26.22           C
ATOM    674  C   ALA A  92      35.265 -17.993  37.908  1.00 25.62           C
ATOM    675  O   ALA A  92      34.889 -18.660  36.936  1.00 22.33           O
ATOM    676  CB  ALA A  92      36.130 -18.863  40.079  1.00 21.42           C
ATOM    677  N   VAL A  93      35.996 -16.893  37.799  1.00 20.37           N
ATOM    678  CA  VAL A  93      36.757 -16.585  36.605  1.00 21.41           C
ATOM    679  C   VAL A  93      38.118 -17.239  36.766  1.00 21.37           C
ATOM    680  O   VAL A  93      38.732 -17.125  37.833  1.00 19.77           O
ATOM    681  CB  VAL A  93      36.894 -15.068  36.420  1.00 24.94           C
ATOM    682  CG1 VAL A  93      37.916 -14.762  35.326  1.00 25.33           C
ATOM    683  CG2 VAL A  93      35.554 -14.457  36.111  1.00 27.47           C
ATOM    684  N   TYR A  94      38.588 -17.935  35.724  1.00 21.06           N
ATOM    685  CA  TYR A  94      39.865 -18.646  35.760  1.00 19.16           C
ATOM    686  C   TYR A  94      40.871 -17.949  34.849  1.00 22.31           C
ATOM    687  O   TYR A  94      40.598 -17.737  33.664  1.00 26.58           O
ATOM    688  CB  TYR A  94      39.689 -20.120  35.353  1.00 20.47           C
ATOM    689  CG  TYR A  94      39.045 -20.980  36.438  1.00 20.73           C
ATOM    690  CD1 TYR A  94      37.672 -20.903  36.700  1.00 21.29           C
ATOM    691  CD2 TYR A  94      39.812 -21.824  37.235  1.00 20.91           C
ATOM    692  CE1 TYR A  94      37.076 -21.666  37.709  1.00 17.46           C
ATOM    693  CE2 TYR A  94      39.226 -22.585  38.243  1.00 19.54           C
ATOM    694  CZ  TYR A  94      37.850 -22.488  38.481  1.00 20.66           C
ATOM    695  OH  TYR A  94      37.268 -23.253  39.478  1.00 18.45           O
ATOM    696  N   TYR A  95      42.036 -17.609  35.401  1.00 22.76           N
ATOM    697  CA  TYR A  95      43.124 -16.958  34.681  1.00 21.38           C
ATOM    698  C   TYR A  95      44.311 -17.902  34.589  1.00 24.43           C
ATOM    699  O   TYR A  95      44.653 -18.568  35.568  1.00 22.15           O
ATOM    700  CB  TYR A  95      43.608 -15.684  35.390  1.00 23.15           C
ATOM    701  CG  TYR A  95      42.565 -14.638  35.704  1.00 27.52           C
ATOM    702  CD1 TYR A  95      42.149 -13.732  34.738  1.00 25.76           C
ATOM    703  CD2 TYR A  95      42.031 -14.525  36.990  1.00 26.90           C
ATOM    704  CE1 TYR A  95      41.211 -12.761  35.027  1.00 27.02           C
ATOM    705  CE2 TYR A  95      41.082 -13.552  37.290  1.00 24.86           C
ATOM    706  CZ  TYR A  95      40.677 -12.677  36.301  1.00 28.60           C
ATOM    707  OH  TYR A  95      39.731 -11.716  36.585  1.00 33.50           O
ATOM    708  N   CYS A  96      44.930 -17.970  33.412  1.00 24.30           N
ATOM    709  CA  CYS A  96      46.253 -18.564  33.280  1.00 25.03           C
ATOM    710  C   CYS A  96      47.282 -17.445  33.362  1.00 20.40           C
ATOM    711  O   CYS A  96      47.026 -16.317  32.940  1.00 21.58           O
ATOM    712  CB  CYS A  96      46.430 -19.320  31.952  1.00 28.20           C
ATOM    713  SG  CYS A  96      46.150 -18.294  30.481  1.00 40.41           S
ATOM    714  N   ALA A  97      48.436 -17.754  33.941  1.00 23.36           N
ATOM    715  CA  ALA A  97      49.467 -16.748  34.147  1.00 23.30           C
ATOM    716  C   ALA A  97      50.844 -17.363  33.972  1.00 24.30           C
ATOM    717  O   ALA A  97      51.073 -18.506  34.378  1.00 24.12           O
ATOM    718  CB  ALA A  97      49.354 -16.107  35.543  1.00 19.24           C
ATOM    719  N   LYS A  98      51.752 -16.589  33.374  1.00 22.10           N
ATOM    720  CA  LYS A  98      53.144 -16.984  33.206  1.00 24.65           C
ATOM    721  C   LYS A  98      53.928 -16.719  34.483  1.00 25.74           C
ATOM    722  O   LYS A  98      53.852 -15.630  35.055  1.00 28.13           O
ATOM    723  CB  LYS A  98      53.771 -16.217  32.043  1.00 29.02           C
ATOM    724  CG  LYS A  98      55.206 -16.623  31.717  1.00 35.00           C
ATOM    725  CD  LYS A  98      55.682 -15.965  30.434  1.00 33.11           C
ATOM    726  CE  LYS A  98      56.164 -14.559  30.671  1.00 36.23           C
ATOM    727  NZ  LYS A  98      57.647 -14.571  30.785  1.00 43.80           N
ATOM    728  N   TYR A  99      54.715 -17.697  34.898  1.00 28.90           N
ATOM    729  CA  TYR A  99      55.480 -17.656  36.138  1.00 30.03           C
ATOM    730  C   TYR A  99      56.961 -17.513  35.810  1.00 32.71           C
ATOM    731  O   TYR A  99      57.483 -18.239  34.965  1.00 33.30           O
ATOM    732  CB  TYR A  99      55.205 -18.937  36.934  1.00 30.77           C
ATOM    733  CG  TYR A  99      56.041 -19.222  38.176  1.00 34.06           C
ATOM    734  CD1 TYR A  99      57.288 -19.844  38.060  1.00 34.37           C
ATOM    735  CD2 TYR A  99      55.549 -18.981  39.450  1.00 34.02           C
ATOM    736  CE1 TYR A  99      58.040 -20.163  39.162  1.00 34.05           C
ATOM    737  CE2 TYR A  99      56.299 -19.304  40.576  1.00 37.43           C
ATOM    738  CZ  TYR A  99      57.551 -19.892  40.418  1.00 40.78           C
ATOM    739  OH  TYR A  99      58.329 -20.217  41.513  1.00 42.27           O
```

[1974]

```
ATOM    740  N   ASP A 100      57.636 -16.594  36.491  1.00 32.71           N
ATOM    741  CA  ASP A 100      59.055 -16.335  36.285  1.00 35.14           C
ATOM    742  C   ASP A 100      59.881 -17.127  37.292  1.00 34.68           C
ATOM    743  O   ASP A 100      59.668 -17.011  38.505  1.00 31.15           O
ATOM    744  CB  ASP A 100      59.358 -14.842  36.431  1.00 36.10           C
ATOM    745  CG  ASP A 100      60.846 -14.567  36.661  1.00 44.98           C
ATOM    746  OD1 ASP A 100      61.638 -14.736  35.698  1.00 49.23           O
ATOM    747  OD2 ASP A 100      61.223 -14.178  37.802  1.00 37.70           O
ATOM    748  N   GLY A 101      60.860 -17.882  36.782  1.00 35.29           N
ATOM    749  CA  GLY A 101      61.591 -18.873  37.562  1.00 37.65           C
ATOM    750  C   GLY A 101      62.511 -18.314  38.635  1.00 33.86           C
ATOM    751  O   GLY A 101      62.881 -19.049  39.555  1.00 33.72           O
ATOM    752  N   ILE A 102      62.914 -17.051  38.526  1.00 29.85           N
ATOM    753  CA  ILE A 102      63.866 -16.491  39.488  1.00 36.07           C
ATOM    754  C   ILE A 102      63.147 -16.003  40.743  1.00 37.78           C
ATOM    755  O   ILE A 102      63.478 -16.391  41.870  1.00 36.43           O
ATOM    756  CB  ILE A 102      64.686 -15.356  38.843  1.00 32.94           C
ATOM    757  CG1 ILE A 102      65.558 -15.903  37.719  1.00 37.21           C
ATOM    758  CG2 ILE A 102      65.572 -14.703  39.876  1.00 37.02           C
ATOM    759  CD1 ILE A 102      66.612 -16.833  38.213  1.00 32.02           C
ATOM    760  N   TYR A 103      62.166 -15.123  40.568  1.00 32.68           N
ATOM    761  CA  TYR A 103      61.494 -14.497  41.692  1.00 35.10           C
ATOM    762  C   TYR A 103      60.072 -14.987  41.899  1.00 33.57           C
ATOM    763  O   TYR A 103      59.491 -14.724  42.960  1.00 32.23           O
ATOM    764  CB  TYR A 103      61.502 -12.976  41.515  1.00 36.78           C
ATOM    765  CG  TYR A 103      62.900 -12.400  41.469  1.00 46.13           C
ATOM    766  CD1 TYR A 103      63.701 -12.378  42.606  1.00 38.53           C
ATOM    767  CD2 TYR A 103      63.422 -11.890  40.286  1.00 75.27           C
ATOM    768  CE1 TYR A 103      64.980 -11.860  42.564  1.00 48.70           C
ATOM    769  CE2 TYR A 103      64.696 -11.366  40.236  1.00 59.54           C
ATOM    770  CZ  TYR A 103      65.471 -11.355  41.375  1.00 51.80           C
ATOM    771  OH  TYR A 103      66.744 -10.834  41.326  1.00 55.88           O
ATOM    772  N   GLY A 104      59.502 -15.694  40.935  1.00 30.40           N
ATOM    773  CA  GLY A 104      58.218 -16.328  41.133  1.00 31.31           C
ATOM    774  C   GLY A 104      57.011 -15.449  40.914  1.00 32.18           C
ATOM    775  O   GLY A 104      55.892 -15.892  41.199  1.00 35.08           O
ATOM    776  N   GLU A 105      57.187 -14.248  40.370  1.00 30.40           N
ATOM    777  CA  GLU A 105      56.054 -13.370  40.116  1.00 30.34           C
ATOM    778  C   GLU A 105      55.264 -13.879  38.913  1.00 31.42           C
ATOM    779  O   GLU A 105      55.795 -14.568  38.041  1.00 27.32           O
ATOM    780  CB  GLU A 105      56.516 -11.932  39.856  1.00 27.21           C
ATOM    781  CG  GLU A 105      57.074 -11.704  38.446  1.00 29.52           C
ATOM    782  CD  GLU A 105      58.581 -11.898  38.327  1.00 35.80           C
ATOM    783  OE1 GLU A 105      59.169 -12.593  39.190  1.00 35.19           O
ATOM    784  OE2 GLU A 105      59.175 -11.366  37.349  1.00 34.13           O
ATOM    785  N   LEU A 106      53.967 -13.584  38.901  1.00 29.18           N
ATOM    786  CA  LEU A 106      53.142 -13.890  37.735  1.00 26.62           C
ATOM    787  C   LEU A 106      53.128 -12.636  36.875  1.00 26.24           C
ATOM    788  O   LEU A 106      52.334 -11.723  37.088  1.00 27.99           O
ATOM    789  CB  LEU A 106      51.745 -14.316  38.162  1.00 27.90           C
ATOM    790  CG  LEU A 106      51.655 -15.579  39.023  1.00 29.39           C
ATOM    791  CD1 LEU A 106      50.191 -15.851  39.409  1.00 25.92           C
ATOM    792  CD2 LEU A 106      52.274 -16.797  38.349  1.00 25.92           C
ATOM    793  N   ASP A 107      54.035 -12.563  35.901  1.00 28.67           N
ATOM    794  CA  ASP A 107      54.235 -11.288  35.217  1.00 31.94           C
ATOM    795  C   ASP A 107      53.274 -11.033  34.054  1.00 30.32           C
ATOM    796  O   ASP A 107      53.144  -9.879  33.630  1.00 32.82           O
ATOM    797  CB  ASP A 107      55.686 -11.145  34.736  1.00 34.08           C
ATOM    798  CG  ASP A 107      56.115 -12.237  33.788  1.00 34.62           C
ATOM    799  OD1 ASP A 107      55.287 -13.086  33.418  1.00 35.91           O
ATOM    800  OD2 ASP A 107      57.306 -12.232  33.398  1.00 45.07           O
ATOM    801  N   PHE A 108      52.617 -12.056  33.512  1.00 28.20           N
ATOM    802  CA  PHE A 108      51.629 -11.836  32.456  1.00 29.81           C
ATOM    803  C   PHE A 108      50.423 -12.733  32.687  1.00 31.34           C
ATOM    804  O   PHE A 108      50.577 -13.932  32.942  1.00 30.57           O
ATOM    805  CB  PHE A 108      52.225 -12.099  31.065  1.00 31.82           C
ATOM    806  CG  PHE A 108      53.177 -11.023  30.608  1.00 39.14           C
ATOM    807  CD1 PHE A 108      52.706  -9.896  29.942  1.00 41.43           C
```

[1975]

```
ATOM    808  CD2 PHE A 108      54.545 -11.118  30.879  1.00 39.59           C
ATOM    809  CE1 PHE A 108      53.584  -8.887  29.538  1.00 38.34           C
ATOM    810  CE2 PHE A 108      55.426 -10.118  30.475  1.00 37.05           C
ATOM    811  CZ  PHE A 108      54.942  -9.002  29.805  1.00 40.86           C
ATOM    812  N   TRP A 109      49.229 -12.156  32.569  1.00 27.10           N
ATOM    813  CA  TRP A 109      47.984 -12.859  32.815  1.00 23.51           C
ATOM    814  C   TRP A 109      47.130 -12.858  31.556  1.00 28.19           C
ATOM    815  O   TRP A 109      47.128 -11.892  30.790  1.00 26.30           O
ATOM    816  CB  TRP A 109      47.178 -12.203  33.946  1.00 26.59           C
ATOM    817  CG  TRP A 109      47.832 -12.184  35.282  1.00 25.92           C
ATOM    818  CD1 TRP A 109      49.050 -11.637  35.604  1.00 27.49           C
ATOM    819  CD2 TRP A 109      47.288 -12.702  36.505  1.00 30.15           C
ATOM    820  NE1 TRP A 109      49.298 -11.804  36.948  1.00 26.81           N
ATOM    821  CE2 TRP A 109      48.231 -12.446  37.524  1.00 27.60           C
ATOM    822  CE3 TRP A 109      46.095 -13.352  36.838  1.00 24.55           C
ATOM    823  CZ2 TRP A 109      48.019 -12.835  38.845  1.00 24.99           C
ATOM    824  CZ3 TRP A 109      45.890 -13.736  38.144  1.00 22.37           C
ATOM    825  CH2 TRP A 109      46.843 -13.482  39.131  1.00 27.36           C
ATOM    826  N   GLY A 110      46.372 -13.932  31.372  1.00 27.62           N
ATOM    827  CA  GLY A 110      45.342 -13.930  30.365  1.00 29.22           C
ATOM    828  C   GLY A 110      44.196 -13.049  30.819  1.00 35.39           C
ATOM    829  O   GLY A 110      44.256 -12.363  31.842  1.00 29.90           O
ATOM    830  N   GLN A 111      43.119 -13.078  30.046  1.00 34.46           N
ATOM    831  CA  GLN A 111      41.992 -12.226  30.372  1.00 32.14           C
ATOM    832  C   GLN A 111      40.890 -12.952  31.125  1.00 32.05           C
ATOM    833  O   GLN A 111      39.914 -12.311  31.529  1.00 33.92           O
ATOM    834  CB  GLN A 111      41.459 -11.536  29.114  1.00 35.46           C
ATOM    835  CG  GLN A 111      42.471 -10.493  28.601  1.00 45.36           C
ATOM    836  CD  GLN A 111      42.885  -9.452  29.688  1.00 52.08           C
ATOM    837  OE1 GLN A 111      42.046  -8.743  30.271  1.00 50.27           O
ATOM    838  NE2 GLN A 111      44.188  -9.388  29.969  1.00 53.23           N
ATOM    839  N   GLY A 112      41.036 -14.247  31.353  1.00 24.56           N
ATOM    840  CA  GLY A 112      40.095 -14.966  32.198  1.00 29.26           C
ATOM    841  C   GLY A 112      38.923 -15.530  31.423  1.00 27.92           C
ATOM    842  O   GLY A 112      38.472 -14.978  30.425  1.00 30.65           O
ATOM    843  N   THR A 113      38.416 -16.656  31.902  1.00 25.57           N
ATOM    844  CA  THR A 113      37.187 -17.230  31.383  1.00 27.67           C
ATOM    845  C   THR A 113      36.288 -17.636  32.546  1.00 25.35           C
ATOM    846  O   THR A 113      36.770 -18.161  33.555  1.00 24.20           O
ATOM    847  CB  THR A 113      37.498 -18.416  30.456  1.00 29.53           C
ATOM    848  OG1 THR A 113      36.289 -18.889  29.871  1.00 37.08           O
ATOM    849  CG2 THR A 113      38.185 -19.555  31.198  1.00 29.47           C
ATOM    850  N   LEU A 114      34.977 -17.403  32.409  1.00 23.80           N
ATOM    851  CA  LEU A 114      34.051 -17.605  33.524  1.00 24.25           C
ATOM    852  C   LEU A 114      33.502 -19.022  33.533  1.00 23.99           C
ATOM    853  O   LEU A 114      32.967 -19.495  32.529  1.00 23.09           O
ATOM    854  CB  LEU A 114      32.894 -16.609  33.474  1.00 27.98           C
ATOM    855  CG  LEU A 114      31.809 -16.878  34.526  1.00 30.79           C
ATOM    856  CD1 LEU A 114      32.323 -16.661  35.965  1.00 22.96           C
ATOM    857  CD2 LEU A 114      30.555 -16.041  34.252  1.00 28.10           C
ATOM    858  N   VAL A 115      33.617 -19.687  34.683  1.00 23.19           N
ATOM    859  CA  VAL A 115      33.060 -21.019  34.898  1.00 24.90           C
ATOM    860  C   VAL A 115      31.936 -20.903  35.923  1.00 25.39           C
ATOM    861  O   VAL A 115      32.174 -20.507  37.072  1.00 20.71           O
ATOM    862  CB  VAL A 115      34.127 -22.012  35.380  1.00 23.89           C
ATOM    863  CG1 VAL A 115      33.471 -23.320  35.759  1.00 20.77           C
ATOM    864  CG2 VAL A 115      35.219 -22.214  34.306  1.00 23.49           C
ATOM    865  N   THR A 116      30.720 -21.269  35.520  1.00 24.41           N
ATOM    866  CA  THR A 116      29.540 -21.215  36.385  1.00 24.17           C
ATOM    867  C   THR A 116      29.103 -22.644  36.659  1.00 24.06           C
ATOM    868  O   THR A 116      28.662 -23.335  35.746  1.00 26.22           O
ATOM    869  CB  THR A 116      28.401 -20.436  35.732  1.00 24.96           C
ATOM    870  OG1 THR A 116      28.841 -19.114  35.396  1.00 32.24           O
ATOM    871  CG2 THR A 116      27.220 -20.321  36.710  1.00 27.22           C
ATOM    872  N   VAL A 117      29.232 -23.090  37.903  1.00 24.44           N
ATOM    873  CA  VAL A 117      28.796 -24.423  38.308  1.00 21.66           C
ATOM    874  C   VAL A 117      27.464 -24.258  39.029  1.00 28.51           C
ATOM    875  O   VAL A 117      27.420 -23.767  40.165  1.00 23.62           O
```

[1976]

```
ATOM    876  CB  VAL A 117      29.829 -25.108  39.209  1.00 22.38           C
ATOM    877  CG1 VAL A 117      29.374 -26.517  39.515  1.00 25.80           C
ATOM    878  CG2 VAL A 117      31.210 -25.105  38.558  1.00 23.52           C
ATOM    879  N   SER A 118      26.367 -24.644  38.376  1.00 23.22           N
ATOM    880  CA  SER A 118      25.051 -24.360  38.936  1.00 27.93           C
ATOM    881  C   SER A 118      24.021 -25.330  38.378  1.00 30.79           C
ATOM    882  O   SER A 118      24.088 -25.721  37.209  1.00 31.53           O
ATOM    883  CB  SER A 118      24.607 -22.921  38.636  1.00 30.34           C
ATOM    884  OG  SER A 118      23.220 -22.742  38.921  1.00 38.03           O
ATOM    885  N   SER A 119      23.089 -25.730  39.236  1.00 30.95           N
ATOM    886  CA  SER A 119      21.948 -26.530  38.830  1.00 31.01           C
ATOM    887  C   SER A 119      20.643 -25.770  39.000  1.00 29.85           C
ATOM    888  O   SER A 119      19.575 -26.365  38.871  1.00 26.82           O
ATOM    889  CB  SER A 119      21.915 -27.838  39.622  1.00 32.20           C
ATOM    890  OG  SER A 119      21.789 -27.588  41.004  1.00 33.28           O
ATOM    891  N   GLY A 120      20.705 -24.467  39.277  1.00 30.15           N
ATOM    892  CA  GLY A 120      19.519 -23.652  39.411  1.00 33.79           C
ATOM    893  C   GLY A 120      18.847 -23.692  40.765  1.00 34.36           C
ATOM    894  O   GLY A 120      17.771 -23.101  40.919  1.00 38.32           O
ATOM    895  N   GLY A 121      19.421 -24.380  41.744  1.00 35.00           N
ATOM    896  CA  GLY A 121      18.768 -24.498  43.031  1.00 34.65           C
ATOM    897  C   GLY A 121      19.267 -23.490  44.044  1.00 36.49           C
ATOM    898  O   GLY A 121      19.313 -23.772  45.245  1.00 35.94           O
ATOM    899  N   GLY A 122      19.641 -22.315  43.576  1.00 33.40           N
ATOM    900  CA  GLY A 122      20.112 -21.311  44.503  1.00 33.68           C
ATOM    901  C   GLY A 122      21.616 -21.156  44.471  1.00 33.55           C
ATOM    902  O   GLY A 122      22.369 -22.114  44.259  1.00 34.78           O
ATOM    903  N   SER A 123      22.066 -19.932  44.719  1.00 33.00           N
ATOM    904  CA  SER A 123      23.479 -19.600  44.649  1.00 38.25           C
ATOM    905  C   SER A 123      24.189 -19.783  45.974  1.00 37.32           C
ATOM    906  O   SER A 123      25.388 -19.506  46.056  1.00 38.68           O
ATOM    907  CB  SER A 123      23.665 -18.156  44.178  1.00 34.01           C
ATOM    908  OG  SER A 123      22.928 -17.902  42.999  1.00 40.48           O
ATOM    909  N   GLY A 124      23.504 -20.305  46.992  1.00 35.83           N
ATOM    910  CA  GLY A 124      24.152 -20.445  48.277  1.00 35.86           C
ATOM    911  C   GLY A 124      25.128 -21.593  48.335  1.00 42.67           C
ATOM    912  O   GLY A 124      26.043 -21.567  49.164  1.00 45.00           O
ATOM    913  N   GLY A 125      24.951 -22.603  47.476  1.00 32.87           N
ATOM    914  CA  GLY A 125      25.868 -23.729  47.474  1.00 39.88           C
ATOM    915  C   GLY A 125      27.309 -23.339  47.194  1.00 36.93           C
ATOM    916  O   GLY A 125      28.235 -24.035  47.617  1.00 41.08           O
ATOM    917  N   SER A 126      27.522 -22.221  46.487  1.00 39.68           N
ATOM    918  CA  SER A 126      28.878 -21.769  46.187  1.00 41.70           C
ATOM    919  C   SER A 126      29.647 -21.396  47.444  1.00 43.95           C
ATOM    920  O   SER A 126      30.868 -21.212  47.374  1.00 44.24           O
ATOM    921  CB  SER A 126      28.860 -20.571  45.229  1.00 41.80           C
ATOM    922  OG  SER A 126      28.415 -19.400  45.896  1.00 45.90           O
ATOM    923  N   GLY A 127      28.963 -21.251  48.579  1.00 46.10           N
ATOM    924  CA  GLY A 127      29.614 -20.867  49.812  1.00 50.54           C
ATOM    925  C   GLY A 127      30.088 -19.436  49.892  1.00 55.14           C
ATOM    926  O   GLY A 127      30.821 -19.103  50.832  1.00 55.81           O
ATOM    927  N   GLY A 128      29.688 -18.570  48.953  1.00 52.28           N
ATOM    928  CA  GLY A 128      30.170 -17.207  49.063  1.00 59.21           C
ATOM    929  C   GLY A 128      31.648 -17.149  48.712  1.00 61.52           C
ATOM    930  O   GLY A 128      32.162 -17.964  47.938  1.00 57.86           O
ATOM    931  N   CYS A 129      32.339 -16.158  49.272  1.00 63.62           N
ATOM    932  CA  CYS A 129      33.783 -16.089  49.093  1.00 55.72           C
ATOM    933  C   CYS A 129      34.490 -17.145  49.944  1.00 61.04           C
ATOM    934  O   CYS A 129      34.078 -17.417  51.077  1.00 62.63           O
ATOM    935  CB  CYS A 129      34.311 -14.695  49.455  1.00 53.52           C
ATOM    936  SG  CYS A 129      33.761 -13.349  48.361  1.00 58.91           S
ATOM    937  N   PRO A 130      35.537 -17.768  49.415  1.00 60.36           N
ATOM    938  CA  PRO A 130      36.404 -18.647  50.217  1.00 62.67           C
ATOM    939  C   PRO A 130      37.202 -17.869  51.250  1.00 67.28           C
ATOM    940  O   PRO A 130      37.261 -16.630  51.201  1.00 68.26           O
ATOM    941  CB  PRO A 130      37.335 -19.273  49.165  1.00 63.67           C
ATOM    942  CG  PRO A 130      37.233 -18.381  47.972  1.00 60.72           C
[1977]
ATOM    943  CD  PRO A 130      35.840 -17.857  47.979  1.00 59.54           C
```

```
ATOM    944  N   PRO A 131      37.837 -18.565  52.219  1.00 69.70           N
ATOM    945  CA  PRO A 131      38.800 -17.889  53.097  1.00 62.87           C
ATOM    946  C   PRO A 131      39.996 -17.372  52.313  1.00 64.24           C
ATOM    947  O   PRO A 131      40.795 -18.152  51.779  1.00 70.33           O
ATOM    948  CB  PRO A 131      39.226 -18.981  54.092  1.00 65.90           C
ATOM    949  CG  PRO A 131      38.319 -20.139  53.864  1.00 64.29           C
ATOM    950  CD  PRO A 131      37.770 -20.013  52.485  1.00 70.23           C
ATOM    951  N   CYS A 132      40.117 -16.056  52.220  1.00 61.92           N
ATOM    952  CA  CYS A 132      41.262 -15.433  51.578  1.00 59.07           C
ATOM    953  C   CYS A 132      42.472 -15.404  52.517  1.00 53.31           C
ATOM    954  O   CYS A 132      42.360 -15.535  53.740  1.00 52.44           O
ATOM    955  CB  CYS A 132      40.906 -14.019  51.108  1.00 54.05           C
ATOM    956  SG  CYS A 132      40.194 -12.930  52.392  1.00 61.95           S
ATOM    957  N   GLY A 133      43.649 -15.267  51.916  1.00 47.51           N
ATOM    958  CA  GLY A 133      44.889 -15.207  52.661  1.00 40.52           C
ATOM    959  C   GLY A 133      45.514 -16.544  52.980  1.00 38.55           C
ATOM    960  O   GLY A 133      46.550 -16.571  53.652  1.00 35.63           O
ATOM    961  N   GLY A 134      44.929 -17.651  52.514  1.00 39.91           N
ATOM    962  CA  GLY A 134      45.519 -18.963  52.703  1.00 39.15           C
ATOM    963  C   GLY A 134      44.714 -19.923  53.556  1.00 44.53           C
ATOM    964  O   GLY A 134      43.852 -19.502  54.336  1.00 45.06           O
ATOM    965  N   SER A 135      44.998 -21.222  53.411  1.00 46.18           N
ATOM    966  CA  SER A 135      44.313 -22.281  54.149  1.00 44.80           C
ATOM    967  C   SER A 135      45.310 -23.187  54.866  1.00 47.69           C
ATOM    968  O   SER A 135      46.498 -22.863  54.968  1.00 48.40           O
ATOM    969  CB  SER A 135      43.442 -23.123  53.208  1.00 45.46           C
ATOM    970  OG  SER A 135      42.942 -22.358  52.121  1.00 51.10           O
ATOM    971  N   GLY A 136      44.829 -24.328  55.353  1.00 45.22           N
ATOM    972  CA  GLY A 136      45.633 -25.304  56.065  1.00 41.68           C
ATOM    973  C   GLY A 136      47.021 -25.580  55.522  1.00 46.44           C
ATOM    974  O   GLY A 136      47.195 -26.016  54.376  1.00 49.11           O
ATOM    975  N   GLY A 137      48.025 -25.323  56.354  1.00 44.21           N
ATOM    976  CA  GLY A 137      49.406 -25.515  55.983  1.00 43.57           C
ATOM    977  C   GLY A 137      49.991 -24.464  55.065  1.00 44.34           C
ATOM    978  O   GLY A 137      51.204 -24.491  54.822  1.00 51.51           O
ATOM    979  N   ASP A 138      49.191 -23.525  54.566  1.00 44.50           N
ATOM    980  CA  ASP A 138      49.710 -22.507  53.664  1.00 41.30           C
ATOM    981  C   ASP A 138      50.440 -21.417  54.443  1.00 38.11           C
ATOM    982  O   ASP A 138      50.195 -21.186  55.629  1.00 40.59           O
ATOM    983  CB  ASP A 138      48.589 -21.870  52.842  1.00 39.14           C
ATOM    984  CG  ASP A 138      47.844 -22.879  51.966  1.00 52.16           C
ATOM    985  OD1 ASP A 138      48.334 -24.033  51.816  1.00 48.09           O
ATOM    986  OD2 ASP A 138      46.756 -22.512  51.442  1.00 46.32           O
ATOM    987  N   ILE A 139      51.346 -20.735  53.754  1.00 31.22           N
ATOM    988  CA  ILE A 139      51.807 -19.457  54.262  1.00 31.28           C
ATOM    989  C   ILE A 139      50.628 -18.492  54.256  1.00 28.81           C
ATOM    990  O   ILE A 139      50.013 -18.255  53.212  1.00 28.06           O
ATOM    991  CB  ILE A 139      52.972 -18.943  53.427  1.00 25.08           C
ATOM    992  CG1 ILE A 139      54.175 -19.863  53.608  1.00 29.82           C
ATOM    993  CG2 ILE A 139      53.320 -17.539  53.833  1.00 28.14           C
ATOM    994  CD1 ILE A 139      55.283 -19.563  52.667  1.00 24.70           C
ATOM    995  N   GLN A 140      50.283 -17.969  55.431  1.00 26.16           N
ATOM    996  CA  GLN A 140      49.180 -17.024  55.575  1.00 28.90           C
ATOM    997  C   GLN A 140      49.638 -15.613  55.236  1.00 28.77           C
ATOM    998  O   GLN A 140      50.684 -15.160  55.712  1.00 27.22           O
ATOM    999  CB  GLN A 140      48.640 -17.068  56.999  1.00 32.50           C
ATOM   1000  CG  GLN A 140      48.245 -18.457  57.392  1.00 37.13           C
ATOM   1001  CD  GLN A 140      46.993 -18.921  56.688  1.00 45.66           C
ATOM   1002  OE1 GLN A 140      46.058 -18.141  56.486  1.00 48.67           O
ATOM   1003  NE2 GLN A 140      46.990 -20.184  56.256  1.00 40.87           N
ATOM   1004  N   MET A 141      48.847 -14.906  54.442  1.00 25.54           N
ATOM   1005  CA  MET A 141      49.139 -13.532  54.050  1.00 23.80           C
ATOM   1006  C   MET A 141      48.061 -12.633  54.643  1.00 27.05           C
ATOM   1007  O   MET A 141      46.884 -12.791  54.322  1.00 25.57           O
ATOM   1008  CB  MET A 141      49.174 -13.404  52.527  1.00 23.50           C
ATOM   1009  CG  MET A 141      50.240 -14.283  51.846  1.00 26.29           C
ATOM   1010  SD  MET A 141      51.884 -14.068  52.580  1.00 26.77           S
ATOM   1011  CE  MET A 141      52.314 -12.492  51.873  1.00 23.50           C
```

[1978]

```
ATOM   1012  N   THR A 142      48.453 -11.745  55.552  1.00 26.16           N
ATOM   1013  CA  THR A 142      47.541 -10.800  56.190  1.00 26.20           C
ATOM   1014  C   THR A 142      47.765  -9.421  55.591  1.00 23.28           C
ATOM   1015  O   THR A 142      48.848  -8.845  55.738  1.00 24.82           O
ATOM   1016  CB  THR A 142      47.747 -10.760  57.699  1.00 28.60           C
ATOM   1017  OG1 THR A 142      47.569 -12.081  58.224  1.00 31.83           O
ATOM   1018  CG2 THR A 142      46.735  -9.796  58.349  1.00 30.01           C
ATOM   1019  N   GLN A 143      46.756  -8.910  54.903  1.00 21.54           N
ATOM   1020  CA  GLN A 143      46.859  -7.656  54.183  1.00 23.14           C
ATOM   1021  C   GLN A 143      46.056  -6.610  54.939  1.00 29.65           C
ATOM   1022  O   GLN A 143      44.940  -6.887  55.393  1.00 29.47           O
ATOM   1023  CB  GLN A 143      46.359  -7.824  52.750  1.00 24.05           C
ATOM   1024  CG  GLN A 143      47.089  -6.961  51.755  1.00 29.29           C
ATOM   1025  CD  GLN A 143      46.652  -7.188  50.326  1.00 27.07           C
ATOM   1026  OE1 GLN A 143      46.500  -8.331  49.882  1.00 25.60           O
ATOM   1027  NE2 GLN A 143      46.469  -6.099  49.584  1.00 27.47           N
ATOM   1028  N   SER A 144      46.631  -5.414  55.093  1.00 26.01           N
ATOM   1029  CA  SER A 144      45.994  -4.377  55.896  1.00 31.86           C
ATOM   1030  C   SER A 144      46.230  -2.984  55.332  1.00 34.95           C
ATOM   1031  O   SER A 144      47.338  -2.698  54.854  1.00 32.13           O
ATOM   1032  CB  SER A 144      46.514  -4.429  57.332  1.00 34.75           C
ATOM   1033  OG  SER A 144      45.724  -3.623  58.181  1.00 47.03           O
ATOM   1034  N   PRO A 145      45.212  -2.101  55.357  1.00 36.62           N
ATOM   1035  CA  PRO A 145      43.847  -2.379  55.823  1.00 36.57           C
ATOM   1036  C   PRO A 145      43.033  -3.063  54.743  1.00 38.64           C
ATOM   1037  O   PRO A 145      43.499  -3.114  53.607  1.00 39.55           O
ATOM   1038  CB  PRO A 145      43.290  -0.986  56.111  1.00 38.79           C
ATOM   1039  CG  PRO A 145      43.955  -0.133  55.088  1.00 36.42           C
ATOM   1040  CD  PRO A 145      45.350  -0.706  54.900  1.00 35.74           C
ATOM   1041  N   SER A 146      41.837  -3.563  55.063  1.00 37.51           N
ATOM   1042  CA  SER A 146      41.031  -4.193  54.020  1.00 37.41           C
ATOM   1043  C   SER A 146      40.492  -3.155  53.042  1.00 35.84           C
ATOM   1044  O   SER A 146      40.385  -3.420  51.837  1.00 34.87           O
ATOM   1045  CB  SER A 146      39.885  -5.006  54.637  1.00 40.41           C
ATOM   1046  OG  SER A 146      39.313  -4.343  55.752  1.00 44.68           O
ATOM   1047  N   SER A 147      40.147  -1.971  53.533  1.00 33.19           N
ATOM   1048  CA  SER A 147      39.763  -0.881  52.650  1.00 37.26           C
ATOM   1049  C   SER A 147      40.189   0.434  53.284  1.00 34.31           C
ATOM   1050  O   SER A 147      40.352   0.537  54.501  1.00 35.45           O
ATOM   1051  CB  SER A 147      38.255  -0.888  52.344  1.00 38.71           C
ATOM   1052  OG  SER A 147      37.481  -0.803  53.526  1.00 41.24           O
ATOM   1053  N   LEU A 148      40.364   1.440  52.433  1.00 32.54           N
ATOM   1054  CA  LEU A 148      40.773   2.758  52.875  1.00 34.39           C
ATOM   1055  C   LEU A 148      40.183   3.776  51.916  1.00 35.89           C
ATOM   1056  O   LEU A 148      39.980   3.494  50.734  1.00 36.19           O
ATOM   1057  CB  LEU A 148      42.305   2.896  52.944  1.00 31.81           C
ATOM   1058  CG  LEU A 148      43.106   2.794  51.647  1.00 35.53           C
ATOM   1059  CD1 LEU A 148      43.295   4.173  51.042  1.00 37.20           C
ATOM   1060  CD2 LEU A 148      44.458   2.130  51.886  1.00 36.31           C
ATOM   1061  N   SER A 149      39.899   4.963  52.438  1.00 39.28           N
ATOM   1062  CA  SER A 149      39.407   6.065  51.628  1.00 43.89           C
ATOM   1063  C   SER A 149      40.483   7.143  51.548  1.00 41.61           C
ATOM   1064  O   SER A 149      41.030   7.551  52.575  1.00 39.91           O
ATOM   1065  CB  SER A 149      38.115   6.618  52.226  1.00 45.75           C
ATOM   1066  OG  SER A 149      38.292   6.886  53.608  1.00 52.70           O
ATOM   1067  N   ALA A 150      40.821   7.561  50.327  1.00 44.29           N
ATOM   1068  CA  ALA A 150      41.810   8.614  50.121  1.00 45.41           C
ATOM   1069  C   ALA A 150      41.423   9.434  48.894  1.00 45.74           C
ATOM   1070  O   ALA A 150      40.481   9.103  48.170  1.00 44.60           O
ATOM   1071  CB  ALA A 150      43.224   8.035  49.961  1.00 43.66           C
ATOM   1072  N   SER A 151      42.174  10.510  48.660  1.00 41.73           N
ATOM   1073  CA  SER A 151      41.901  11.419  47.558  1.00 40.84           C
ATOM   1074  C   SER A 151      43.132  11.565  46.680  1.00 42.79           C
ATOM   1075  O   SER A 151      44.248  11.197  47.067  1.00 46.48           O
ATOM   1076  CB  SER A 151      41.434  12.803  48.041  1.00 44.60           C
ATOM   1077  OG  SER A 151      41.604  12.955  49.436  1.00 48.01           O
ATOM   1078  N   VAL A 152      42.892  12.115  45.484  1.00 38.69           N
ATOM   1079  CA  VAL A 152      43.943  12.363  44.505  1.00 41.47           C
```

[1979]

```
ATOM   1080  C   VAL A 152      45.059  13.175  45.140  1.00 42.02           C
ATOM   1081  O   VAL A 152      44.812  14.194  45.794  1.00 36.68           O
ATOM   1082  CB  VAL A 152      43.357  13.083  43.279  1.00 39.92           C
ATOM   1083  CG1 VAL A 152      44.451  13.374  42.249  1.00 38.43           C
ATOM   1084  CG2 VAL A 152      42.236  12.250  42.672  1.00 40.08           C
ATOM   1085  N   GLY A 153      46.298  12.739  44.938  1.00 43.40           N
ATOM   1086  CA  GLY A 153      47.438  13.453  45.460  1.00 40.18           C
ATOM   1087  C   GLY A 153      47.979  12.916  46.772  1.00 40.29           C
ATOM   1088  O   GLY A 153      49.117  13.245  47.130  1.00 40.27           O
ATOM   1089  N   ASP A 154      47.216  12.084  47.484  1.00 40.80           N
ATOM   1090  CA  ASP A 154      47.679  11.569  48.764  1.00 40.64           C
ATOM   1091  C   ASP A 154      48.743  10.489  48.569  1.00 42.51           C
ATOM   1092  O   ASP A 154      48.794   9.806  47.541  1.00 37.16           O
ATOM   1093  CB  ASP A 154      46.529  10.918  49.545  1.00 42.12           C
ATOM   1094  CG  ASP A 154      45.475  11.911  50.029  1.00 44.78           C
ATOM   1095  OD1 ASP A 154      45.569  13.119  49.713  1.00 44.57           O
ATOM   1096  OD2 ASP A 154      44.535  11.460  50.730  1.00 44.50           O
ATOM   1097  N   ARG A 155      49.586  10.323  49.593  1.00 36.61           N
ATOM   1098  CA  ARG A 155      50.506   9.194  49.676  1.00 40.13           C
ATOM   1099  C   ARG A 155      49.806   8.129  50.509  1.00 39.35           C
ATOM   1100  O   ARG A 155      49.370   8.413  51.630  1.00 41.56           O
ATOM   1101  CB  ARG A 155      51.853   9.562  50.315  1.00 37.93           C
ATOM   1102  CG  ARG A 155      52.635   8.296  50.720  1.00 41.61           C
ATOM   1103  CD  ARG A 155      53.878   8.523  51.582  1.00 41.37           C
ATOM   1104  NE  ARG A 155      54.954   9.211  50.867  1.00 46.06           N
ATOM   1105  CZ  ARG A 155      56.122   8.656  50.566  1.00 49.31           C
ATOM   1106  NH1 ARG A 155      56.380   7.413  50.943  1.00 48.25           N
ATOM   1107  NH2 ARG A 155      57.020   9.342  49.891  1.00 54.00           N
ATOM   1108  N   VAL A 156      49.672   6.924  49.970  1.00 41.55           N
ATOM   1109  CA  VAL A 156      49.027   5.828  50.683  1.00 40.70           C
ATOM   1110  C   VAL A 156      49.976   4.643  50.722  1.00 40.98           C
ATOM   1111  O   VAL A 156      50.693   4.373  49.750  1.00 32.59           O
ATOM   1112  CB  VAL A 156      47.678   5.423  50.064  1.00 38.17           C
ATOM   1113  CG1 VAL A 156      46.645   6.478  50.373  1.00 44.47           C
ATOM   1114  CG2 VAL A 156      47.815   5.256  48.593  1.00 38.22           C
ATOM   1115  N   THR A 157      49.998   3.960  51.865  1.00 37.82           N
ATOM   1116  CA  THR A 157      50.836   2.792  52.076  1.00 34.55           C
ATOM   1117  C   THR A 157      49.959   1.638  52.536  1.00 32.94           C
ATOM   1118  O   THR A 157      49.149   1.790  53.458  1.00 40.62           O
ATOM   1119  CB  THR A 157      51.935   3.079  53.098  1.00 35.70           C
ATOM   1120  OG1 THR A 157      51.320   3.550  54.298  1.00 48.71           O
ATOM   1121  CG2 THR A 157      52.864   4.153  52.582  1.00 32.79           C
ATOM   1122  N   ILE A 158      50.129   0.496  51.880  1.00 37.06           N
ATOM   1123  CA  ILE A 158      49.425  -0.753  52.147  1.00 30.06           C
ATOM   1124  C   ILE A 158      50.440  -1.698  52.756  1.00 30.93           C
ATOM   1125  O   ILE A 158      51.626  -1.643  52.408  1.00 32.17           O
ATOM   1126  CB  ILE A 158      48.845  -1.354  50.845  1.00 31.67           C
ATOM   1127  CG1 ILE A 158      47.787  -0.442  50.233  1.00 37.86           C
ATOM   1128  CG2 ILE A 158      48.256  -2.752  51.060  1.00 34.92           C
ATOM   1129  CD1 ILE A 158      47.329  -0.939  48.854  1.00 32.95           C
ATOM   1130  N   THR A 159      50.012  -2.516  53.706  1.00 28.25           N
ATOM   1131  CA  THR A 159      50.951  -3.443  54.309  1.00 30.86           C
ATOM   1132  C   THR A 159      50.472  -4.872  54.119  1.00 27.14           C
ATOM   1133  O   THR A 159      49.283  -5.144  53.903  1.00 23.97           O
ATOM   1134  CB  THR A 159      51.166  -3.172  55.806  1.00 30.22           C
ATOM   1135  OG1 THR A 159      49.978  -3.517  56.518  1.00 37.05           O
ATOM   1136  CG2 THR A 159      51.468  -1.704  56.039  1.00 32.22           C
ATOM   1137  N   CYS A 160      51.422  -5.786  54.256  1.00 27.06           N
ATOM   1138  CA  CYS A 160      51.205  -7.194  53.973  1.00 24.43           C
ATOM   1139  C   CYS A 160      52.136  -7.954  54.896  1.00 25.60           C
ATOM   1140  O   CYS A 160      53.324  -7.633  54.971  1.00 29.83           O
ATOM   1141  CB  CYS A 160      51.492  -7.502  52.499  1.00 26.06           C
ATOM   1142  SG  CYS A 160      51.394  -9.227  52.027  1.00 41.07           S
ATOM   1143  N   ARG A 161      51.598  -8.924  55.625  1.00 25.87           N
ATOM   1144  CA  ARG A 161      52.382  -9.696  56.581  1.00 30.02           C
ATOM   1145  C   ARG A 161      52.237 -11.175  56.292  1.00 26.91           C
ATOM   1146  O   ARG A 161      51.119 -11.691  56.258  1.00 27.42           O
ATOM   1147  CB  ARG A 161      51.924  -9.432  58.017  1.00 25.23           C
```

[1980]

```
ATOM   1148  CG  ARG A 161      52.562 -10.350  59.053  1.00 28.72           C
ATOM   1149  CD  ARG A 161      52.119  -9.976  60.464  1.00 32.16           C
ATOM   1150  NE  ARG A 161      52.350  -8.571  60.771  1.00 34.57           N
ATOM   1151  CZ  ARG A 161      51.705  -7.904  61.724  1.00 39.23           C
ATOM   1152  NH1 ARG A 161      50.768  -8.509  62.450  1.00 36.25           N
ATOM   1153  NH2 ARG A 161      51.999  -6.636  61.954  1.00 39.67           N
ATOM   1154  N   ALA A 162      53.363 -11.854  56.128  1.00 23.64           N
ATOM   1155  CA  ALA A 162      53.398 -13.296  55.955  1.00 25.97           C
ATOM   1156  C   ALA A 162      53.587 -13.982  57.300  1.00 28.79           C
ATOM   1157  O   ALA A 162      54.231 -13.443  58.209  1.00 27.06           O
ATOM   1158  CB  ALA A 162      54.528 -13.702  54.996  1.00 25.50           C
ATOM   1159  N   SER A 163      53.043 -15.198  57.410  1.00 25.58           N
ATOM   1160  CA  SER A 163      53.118 -15.968  58.644  1.00 25.22           C
ATOM   1161  C   SER A 163      54.488 -16.587  58.876  1.00 27.85           C
ATOM   1162  O   SER A 163      54.720 -17.166  59.944  1.00 28.70           O
ATOM   1163  CB  SER A 163      52.036 -17.056  58.651  1.00 30.55           C
ATOM   1164  OG  SER A 163      52.166 -17.973  57.573  1.00 28.29           O
ATOM   1165  N   GLN A 164      55.399 -16.470  57.920  1.00 27.76           N
ATOM   1166  CA  GLN A 164      56.771 -16.936  58.074  1.00 26.49           C
ATOM   1167  C   GLN A 164      57.668 -16.014  57.260  1.00 24.25           C
ATOM   1168  O   GLN A 164      57.192 -15.203  56.466  1.00 25.97           O
ATOM   1169  CB  GLN A 164      56.922 -18.388  57.607  1.00 33.99           C
ATOM   1170  CG  GLN A 164      56.595 -18.552  56.134  1.00 32.10           C
ATOM   1171  CD  GLN A 164      57.041 -19.874  55.570  1.00 39.03           C
ATOM   1172  OE1 GLN A 164      56.614 -20.939  56.031  1.00 44.67           O
ATOM   1173  NE2 GLN A 164      57.910 -19.818  54.552  1.00 37.46           N
ATOM   1174  N   SER A 165      58.976 -16.137  57.451  1.00 22.66           N
ATOM   1175  CA  SER A 165      59.887 -15.366  56.623  1.00 21.66           C
ATOM   1176  C   SER A 165      59.839 -15.887  55.190  1.00 25.85           C
ATOM   1177  O   SER A 165      59.917 -17.099  54.963  1.00 23.30           O
ATOM   1178  CB  SER A 165      61.305 -15.455  57.171  1.00 24.49           C
ATOM   1179  OG  SER A 165      62.179 -14.708  56.343  1.00 30.97           O
ATOM   1180  N   ILE A 166      59.721 -14.968  54.228  1.00 24.06           N
ATOM   1181  CA  ILE A 166      59.698 -15.293  52.806  1.00 24.25           C
ATOM   1182  C   ILE A 166      60.783 -14.541  52.035  1.00 27.39           C
ATOM   1183  O   ILE A 166      60.712 -14.426  50.818  1.00 29.11           O
ATOM   1184  CB  ILE A 166      58.306 -15.041  52.192  1.00 22.85           C
ATOM   1185  CG1 ILE A 166      57.894 -13.574  52.336  1.00 25.06           C
ATOM   1186  CG2 ILE A 166      57.268 -15.978  52.782  1.00 21.43           C
ATOM   1187  CD1 ILE A 166      56.513 -13.307  51.832  1.00 26.73           C
ATOM   1188  N   SER A 167      61.807 -14.060  52.734  1.00 26.77           N
ATOM   1189  CA  SER A 167      62.878 -13.244  52.155  1.00 28.44           C
ATOM   1190  C   SER A 167      62.199 -12.121  51.371  1.00 25.31           C
ATOM   1191  O   SER A 167      61.361 -11.412  51.930  1.00 32.50           O
ATOM   1192  CB  SER A 167      63.831 -14.112  51.361  1.00 28.51           C
ATOM   1193  OG  SER A 167      64.276 -15.178  52.169  1.00 39.82           O
ATOM   1194  N   SER A 168      62.516 -11.931  50.100  1.00 26.90           N
ATOM   1195  CA  SER A 168      61.896 -10.867  49.323  1.00 30.89           C
ATOM   1196  C   SER A 168      60.960 -11.392  48.237  1.00 28.04           C
ATOM   1197  O   SER A 168      60.592 -10.638  47.330  1.00 31.07           O
ATOM   1198  CB  SER A 168      62.977  -9.962  48.732  1.00 33.64           C
ATOM   1199  OG  SER A 168      63.530  -9.159  49.772  1.00 39.22           O
ATOM   1200  N   TYR A 169      60.555 -12.664  48.317  1.00 26.38           N
ATOM   1201  CA  TYR A 169      59.670 -13.264  47.311  1.00 27.29           C
ATOM   1202  C   TYR A 169      58.222 -12.854  47.580  1.00 23.54           C
ATOM   1203  O   TYR A 169      57.366 -13.648  47.975  1.00 22.40           O
ATOM   1204  CB  TYR A 169      59.815 -14.774  47.299  1.00 23.36           C
ATOM   1205  CG  TYR A 169      61.232 -15.236  47.055  1.00 27.68           C
ATOM   1206  CD1 TYR A 169      61.829 -15.062  45.817  1.00 29.46           C
ATOM   1207  CD2 TYR A 169      61.956 -15.863  48.048  1.00 26.87           C
ATOM   1208  CE1 TYR A 169      63.117 -15.496  45.580  1.00 35.03           C
ATOM   1209  CE2 TYR A 169      63.240 -16.297  47.825  1.00 34.87           C
ATOM   1210  CZ  TYR A 169      63.815 -16.117  46.588  1.00 36.48           C
ATOM   1211  OH  TYR A 169      65.097 -16.558  46.357  1.00 48.01           O
ATOM   1212  N   LEU A 170      57.956 -11.575  47.346  1.00 23.41           N
ATOM   1213  CA  LEU A 170      56.650 -10.991  47.602  1.00 25.08           C
ATOM   1214  C   LEU A 170      56.304 -10.121  46.406  1.00 24.65           C
ATOM   1215  O   LEU A 170      57.124  -9.313  45.968  1.00 24.13           O
```

[1981]

```
ATOM   1216  CB  LEU A 170      56.671 -10.178  48.918  1.00 22.18           C
ATOM   1217  CG  LEU A 170      55.417  -9.623  49.606  1.00 24.19           C
ATOM   1218  CD1 LEU A 170      54.961  -8.317  48.985  1.00 23.55           C
ATOM   1219  CD2 LEU A 170      54.283 -10.654  49.608  1.00 22.12           C
ATOM   1220  N   ASN A 171      55.102 -10.290  45.876  1.00 24.03           N
ATOM   1221  CA  ASN A 171      54.669  -9.552  44.702  1.00 25.88           C
ATOM   1222  C   ASN A 171      53.410  -8.758  45.020  1.00 23.52           C
ATOM   1223  O   ASN A 171      52.626  -9.137  45.890  1.00 23.71           O
ATOM   1224  CB  ASN A 171      54.420 -10.506  43.540  1.00 26.32           C
ATOM   1225  CG  ASN A 171      55.508 -11.553  43.432  1.00 29.19           C
ATOM   1226  OD1 ASN A 171      56.659 -11.227  43.163  1.00 26.25           O
ATOM   1227  ND2 ASN A 171      55.150 -12.817  43.654  1.00 30.44           N
ATOM   1228  N   TRP A 172      53.238  -7.640  44.318  1.00 23.69           N
ATOM   1229  CA  TRP A 172      52.052  -6.801  44.422  1.00 25.95           C
ATOM   1230  C   TRP A 172      51.387  -6.698  43.055  1.00 24.57           C
ATOM   1231  O   TRP A 172      52.069  -6.498  42.048  1.00 23.87           O
ATOM   1232  CB  TRP A 172      52.402  -5.392  44.920  1.00 22.59           C
ATOM   1233  CG  TRP A 172      52.897  -5.320  46.336  1.00 23.65           C
ATOM   1234  CD1 TRP A 172      54.197  -5.292  46.757  1.00 23.43           C
ATOM   1235  CD2 TRP A 172      52.088  -5.223  47.522  1.00 25.61           C
ATOM   1236  NE1 TRP A 172      54.248  -5.200  48.139  1.00 24.50           N
ATOM   1237  CE2 TRP A 172      52.966  -5.150  48.625  1.00 26.46           C
ATOM   1238  CE3 TRP A 172      50.710  -5.192  47.753  1.00 22.96           C
ATOM   1239  CZ2 TRP A 172      52.508  -5.053  49.929  1.00 29.68           C
ATOM   1240  CZ3 TRP A 172      50.256  -5.099  49.045  1.00 26.68           C
ATOM   1241  CH2 TRP A 172      51.148  -5.024  50.120  1.00 30.08           C
ATOM   1242  N   TYR A 173      50.052  -6.812  43.035  1.00 23.39           N
ATOM   1243  CA  TYR A 173      49.241  -6.700  41.829  1.00 27.94           C
ATOM   1244  C   TYR A 173      48.164  -5.637  42.016  1.00 29.48           C
ATOM   1245  O   TYR A 173      47.694  -5.397  43.133  1.00 28.56           O
ATOM   1246  CB  TYR A 173      48.561  -8.032  41.485  1.00 24.33           C
ATOM   1247  CG  TYR A 173      49.521  -9.191  41.388  1.00 25.54           C
ATOM   1248  CD1 TYR A 173      49.910  -9.880  42.524  1.00 24.01           C
ATOM   1249  CD2 TYR A 173      50.021  -9.611  40.153  1.00 22.11           C
ATOM   1250  CE1 TYR A 173      50.790 -10.938  42.447  1.00 30.16           C
ATOM   1251  CE2 TYR A 173      50.901 -10.684  40.058  1.00 25.78           C
ATOM   1252  CZ  TYR A 173      51.287 -11.339  41.211  1.00 26.91           C
ATOM   1253  OH  TYR A 173      52.167 -12.388  41.157  1.00 25.99           O
ATOM   1254  N   GLN A 174      47.786  -4.993  40.912  1.00 27.57           N
ATOM   1255  CA  GLN A 174      46.639  -4.096  40.852  1.00 26.54           C
ATOM   1256  C   GLN A 174      45.523  -4.787  40.080  1.00 29.11           C
ATOM   1257  O   GLN A 174      45.784  -5.422  39.049  1.00 28.56           O
ATOM   1258  CB  GLN A 174      47.028  -2.791  40.152  1.00 31.25           C
ATOM   1259  CG  GLN A 174      45.927  -1.766  39.952  1.00 29.05           C
ATOM   1260  CD  GLN A 174      46.408  -0.555  39.149  1.00 33.54           C
ATOM   1261  OE1 GLN A 174      46.747  -0.685  37.968  1.00 39.06           O
ATOM   1262  NE2 GLN A 174      46.440   0.619  39.783  1.00 33.19           N
ATOM   1263  N   GLN A 175      44.282  -4.683  40.564  1.00 26.51           N
ATOM   1264  CA  GLN A 175      43.143  -5.178  39.795  1.00 29.98           C
ATOM   1265  C   GLN A 175      42.058  -4.123  39.739  1.00 32.82           C
ATOM   1266  O   GLN A 175      41.533  -3.715  40.777  1.00 35.43           O
ATOM   1267  CB  GLN A 175      42.550  -6.472  40.347  1.00 30.07           C
ATOM   1268  CG  GLN A 175      41.473  -6.984  39.376  1.00 33.32           C
ATOM   1269  CD  GLN A 175      40.936  -8.355  39.702  1.00 31.42           C
ATOM   1270  OE1 GLN A 175      40.686  -8.675  40.859  1.00 26.54           O
ATOM   1271  NE2 GLN A 175      40.740  -9.175  38.669  1.00 28.34           N
ATOM   1272  N   LYS A 176      41.697  -3.720  38.537  1.00 36.42           N
ATOM   1273  CA  LYS A 176      40.568  -2.825  38.343  1.00 40.75           C
ATOM   1274  C   LYS A 176      39.293  -3.623  38.082  1.00 45.03           C
ATOM   1275  O   LYS A 176      39.348  -4.777  37.641  1.00 41.53           O
ATOM   1276  CB  LYS A 176      40.865  -1.870  37.189  1.00 42.57           C
ATOM   1277  CG  LYS A 176      41.970  -0.882  37.531  1.00 42.65           C
ATOM   1278  CD  LYS A 176      42.800  -0.465  36.331  1.00 47.05           C
ATOM   1279  CE  LYS A 176      43.578   0.810  36.647  1.00 48.53           C
ATOM   1280  NZ  LYS A 176      44.714   1.081  35.714  1.00 56.24           N
ATOM   1281  N   PRO A 177      38.124  -3.041  38.360  1.00 45.74           N
ATOM   1282  CA  PRO A 177      36.869  -3.803  38.250  1.00 43.85           C
ATOM   1283  C   PRO A 177      36.667  -4.387  36.859  1.00 47.29           C
```

[1982]

```
ATOM   1284  O   PRO A 177      36.779  -3.689  35.847  1.00 51.33           O
ATOM   1285  CB  PRO A 177      35.795  -2.757  38.576  1.00 46.65           C
ATOM   1286  CG  PRO A 177      36.484  -1.768  39.450  1.00 42.77           C
ATOM   1287  CD  PRO A 177      37.914  -1.708  38.956  1.00 46.80           C
ATOM   1288  N   GLY A 178      36.363  -5.684  36.818  1.00 41.84           N
ATOM   1289  CA  GLY A 178      36.139  -6.363  35.561  1.00 42.61           C
ATOM   1290  C   GLY A 178      37.380  -6.666  34.753  1.00 45.69           C
ATOM   1291  O   GLY A 178      37.255  -7.110  33.606  1.00 44.81           O
ATOM   1292  N   LYS A 179      38.572  -6.441  35.303  1.00 42.31           N
ATOM   1293  CA  LYS A 179      39.812  -6.635  34.568  1.00 39.76           C
ATOM   1294  C   LYS A 179      40.663  -7.703  35.235  1.00 34.72           C
ATOM   1295  O   LYS A 179      40.471  -8.040  36.403  1.00 34.18           O
ATOM   1296  CB  LYS A 179      40.607  -5.328  34.461  1.00 42.75           C
ATOM   1297  CG  LYS A 179      40.170  -4.436  33.311  1.00 43.95           C
ATOM   1298  CD  LYS A 179      40.322  -5.193  31.988  1.00 51.51           C
ATOM   1299  CE  LYS A 179      41.772  -5.603  31.761  1.00 52.64           C
ATOM   1300  NZ  LYS A 179      41.960  -6.625  30.686  1.00 53.05           N
ATOM   1301  N   ALA A 180      41.580  -8.265  34.458  1.00 34.81           N
ATOM   1302  CA  ALA A 180      42.532  -9.212  35.006  1.00 33.79           C
ATOM   1303  C   ALA A 180      43.583  -8.474  35.834  1.00 32.74           C
ATOM   1304  O   ALA A 180      43.912  -7.324  35.542  1.00 31.92           O
ATOM   1305  CB  ALA A 180      43.219  -9.987  33.891  1.00 32.04           C
ATOM   1306  N   PRO A 181      44.136  -9.119  36.860  1.00 30.27           N
ATOM   1307  CA  PRO A 181      45.212  -8.488  37.625  1.00 27.53           C
ATOM   1308  C   PRO A 181      46.409  -8.172  36.747  1.00 28.92           C
ATOM   1309  O   PRO A 181      46.581  -8.703  35.646  1.00 31.06           O
ATOM   1310  CB  PRO A 181      45.568  -9.541  38.683  1.00 25.98           C
ATOM   1311  CG  PRO A 181      44.374 -10.378  38.799  1.00 28.53           C
ATOM   1312  CD  PRO A 181      43.773 -10.430  37.419  1.00 30.28           C
ATOM   1313  N   LYS A 182      47.227  -7.258  37.249  1.00 28.82           N
ATOM   1314  CA  LYS A 182      48.409  -6.783  36.555  1.00 29.59           C
ATOM   1315  C   LYS A 182      49.539  -6.685  37.575  1.00 27.26           C
ATOM   1316  O   LYS A 182      49.347  -6.140  38.666  1.00 28.51           O
ATOM   1317  CB  LYS A 182      48.122  -5.431  35.881  1.00 35.44           C
ATOM   1318  CG  LYS A 182      49.308  -4.759  35.221  1.00 38.78           C
ATOM   1319  CD  LYS A 182      48.934  -3.380  34.689  1.00 45.51           C
ATOM   1320  CE  LYS A 182      48.625  -2.418  35.835  1.00 45.72           C
ATOM   1321  NZ  LYS A 182      48.292  -1.018  35.389  1.00 52.33           N
ATOM   1322  N   LEU A 183      50.696  -7.242  37.236  1.00 28.59           N
ATOM   1323  CA  LEU A 183      51.848  -7.204  38.131  1.00 27.18           C
ATOM   1324  C   LEU A 183      52.401  -5.791  38.249  1.00 25.90           C
ATOM   1325  O   LEU A 183      52.675  -5.129  37.246  1.00 29.08           O
ATOM   1326  CB  LEU A 183      52.937  -8.137  37.619  1.00 25.86           C
ATOM   1327  CG  LEU A 183      54.275  -8.037  38.350  1.00 29.44           C
ATOM   1328  CD1 LEU A 183      54.191  -8.622  39.755  1.00 24.89           C
ATOM   1329  CD2 LEU A 183      55.333  -8.742  37.532  1.00 29.36           C
ATOM   1330  N   LEU A 184      52.555  -5.326  39.483  1.00 27.29           N
ATOM   1331  CA  LEU A 184      53.179  -4.047  39.775  1.00 25.74           C
ATOM   1332  C   LEU A 184      54.611  -4.200  40.267  1.00 27.25           C
ATOM   1333  O   LEU A 184      55.529  -3.585  39.720  1.00 28.12           O
ATOM   1334  CB  LEU A 184      52.353  -3.300  40.822  1.00 29.61           C
ATOM   1335  CG  LEU A 184      50.998  -2.771  40.371  1.00 26.95           C
ATOM   1336  CD1 LEU A 184      50.357  -2.081  41.551  1.00 32.24           C
ATOM   1337  CD2 LEU A 184      51.153  -1.806  39.213  1.00 30.32           C
ATOM   1338  N   ILE A 185      54.817  -5.004  41.304  1.00 24.83           N
ATOM   1339  CA  ILE A 185      56.095  -5.099  41.997  1.00 27.17           C
ATOM   1340  C   ILE A 185      56.426  -6.568  42.183  1.00 24.75           C
ATOM   1341  O   ILE A 185      55.571  -7.350  42.609  1.00 25.58           O
ATOM   1342  CB  ILE A 185      56.051  -4.410  43.382  1.00 26.61           C
ATOM   1343  CG1 ILE A 185      55.631  -2.936  43.281  1.00 34.14           C
ATOM   1344  CG2 ILE A 185      57.384  -4.581  44.108  1.00 28.13           C
ATOM   1345  CD1 ILE A 185      56.677  -2.049  42.669  1.00 38.08           C
ATOM   1346  N   TYR A 186      57.666  -6.937  41.912  1.00 20.05           N
ATOM   1347  CA  TYR A 186      58.134  -8.272  42.217  1.00 21.89           C
ATOM   1348  C   TYR A 186      59.403  -8.144  43.035  1.00 24.21           C
ATOM   1349  O   TYR A 186      60.029  -7.083  43.068  1.00 27.58           O
ATOM   1350  CB  TYR A 186      58.377  -9.113  40.932  1.00 23.48           C
ATOM   1351  CG  TYR A 186      59.512  -8.614  40.050  1.00 31.04           C
```

[1983]

```
ATOM   1352  CD1 TYR A 186      59.288  -7.631  39.085  1.00 34.44           C
ATOM   1353  CD2 TYR A 186      60.807  -9.106  40.192  1.00 31.34           C
ATOM   1354  CE1 TYR A 186      60.315  -7.160  38.270  1.00 29.25           C
ATOM   1355  CE2 TYR A 186      61.846  -8.632  39.388  1.00 32.71           C
ATOM   1356  CZ  TYR A 186      61.588  -7.657  38.431  1.00 34.30           C
ATOM   1357  OH  TYR A 186      62.606  -7.176  37.630  1.00 34.67           O
ATOM   1358  N   ALA A 187      59.761  -9.236  43.713  1.00 25.83           N
ATOM   1359  CA  ALA A 187      60.953  -9.283  44.564  1.00 27.36           C
ATOM   1360  C   ALA A 187      60.919  -8.161  45.596  1.00 27.47           C
ATOM   1361  O   ALA A 187      61.923  -7.496  45.853  1.00 25.89           O
ATOM   1362  CB  ALA A 187      62.242  -9.228  43.736  1.00 26.32           C
ATOM   1363  N   ALA A 188      59.727  -7.919  46.143  1.00 25.61           N
ATOM   1364  CA  ALA A 188      59.481  -6.958  47.220  1.00 27.29           C
ATOM   1365  C   ALA A 188      59.608  -5.500  46.780  1.00 24.66           C
ATOM   1366  O   ALA A 188      58.809  -4.663  47.207  1.00 24.79           O
ATOM   1367  CB  ALA A 188      60.408  -7.232  48.407  1.00 26.14           C
ATOM   1368  N   SER A 189      60.577  -5.178  45.913  1.00 29.33           N
ATOM   1369  CA  SER A 189      60.852  -3.783  45.582  1.00 30.03           C
ATOM   1370  C   SER A 189      61.144  -3.482  44.112  1.00 28.82           C
ATOM   1371  O   SER A 189      61.314  -2.306  43.776  1.00 31.38           O
ATOM   1372  CB  SER A 189      62.037  -3.273  46.424  1.00 29.34           C
ATOM   1373  OG  SER A 189      63.204  -4.036  46.144  1.00 33.71           O
ATOM   1374  N   SER A 190      61.213  -4.472  43.226  1.00 25.81           N
ATOM   1375  CA  SER A 190      61.528  -4.201  41.830  1.00 27.52           C
ATOM   1376  C   SER A 190      60.265  -3.840  41.057  1.00 31.02           C
ATOM   1377  O   SER A 190      59.277  -4.577  41.092  1.00 29.77           O
ATOM   1378  CB  SER A 190      62.204  -5.410  41.182  1.00 32.37           C
ATOM   1379  OG  SER A 190      63.419  -5.706  41.842  1.00 36.13           O
ATOM   1380  N   LEU A 191      60.313  -2.731  40.329  1.00 32.32           N
ATOM   1381  CA  LEU A 191      59.193  -2.355  39.484  1.00 33.43           C
ATOM   1382  C   LEU A 191      59.164  -3.183  38.211  1.00 38.00           C
ATOM   1383  O   LEU A 191      60.185  -3.367  37.547  1.00 36.37           O
ATOM   1384  CB  LEU A 191      59.262  -0.885  39.102  1.00 33.79           C
ATOM   1385  CG  LEU A 191      58.374   0.005  39.958  1.00 37.80           C
ATOM   1386  CD1 LEU A 191      59.039   0.194  41.316  1.00 36.70           C
ATOM   1387  CD2 LEU A 191      58.145   1.325  39.269  1.00 33.60           C
ATOM   1388  N   GLN A 192      57.975  -3.658  37.863  1.00 32.79           N
ATOM   1389  CA  GLN A 192      57.780  -4.307  36.580  1.00 33.59           C
ATOM   1390  C   GLN A 192      57.871  -3.268  35.463  1.00 34.39           C
ATOM   1391  O   GLN A 192      57.506  -2.097  35.634  1.00 35.16           O
ATOM   1392  CB  GLN A 192      56.422  -5.022  36.561  1.00 33.82           C
ATOM   1393  CG  GLN A 192      56.012  -5.657  35.225  1.00 34.33           C
ATOM   1394  CD  GLN A 192      56.928  -6.779  34.812  1.00 38.84           C
ATOM   1395  OE1 GLN A 192      57.692  -7.307  35.623  1.00 41.47           O
ATOM   1396  NE2 GLN A 192      56.847  -7.170  33.547  1.00 44.45           N
ATOM   1397  N   SER A 193      58.387  -3.704  34.319  1.00 33.01           N
ATOM   1398  CA  SER A 193      58.528  -2.836  33.157  1.00 34.70           C
ATOM   1399  C   SER A 193      57.200  -2.180  32.807  1.00 33.53           C
ATOM   1400  O   SER A 193      56.164  -2.844  32.730  1.00 38.67           O
ATOM   1401  CB  SER A 193      59.052  -3.657  31.967  1.00 45.89           C
ATOM   1402  OG  SER A 193      58.574  -3.163  30.719  1.00 47.18           O
ATOM   1403  N   GLY A 194      57.229  -0.862  32.623  1.00 37.55           N
ATOM   1404  CA  GLY A 194      56.040  -0.120  32.282  1.00 35.59           C
ATOM   1405  C   GLY A 194      55.253   0.414  33.463  1.00 35.00           C
ATOM   1406  O   GLY A 194      54.300   1.170  33.258  1.00 37.40           O
ATOM   1407  N   VAL A 195      55.622   0.060  34.688  1.00 32.80           N
ATOM   1408  CA  VAL A 195      54.856   0.476  35.861  1.00 35.18           C
ATOM   1409  C   VAL A 195      55.313   1.862  36.301  1.00 33.83           C
ATOM   1410  O   VAL A 195      56.523   2.105  36.426  1.00 36.13           O
ATOM   1411  CB  VAL A 195      54.984  -0.560  36.990  1.00 34.35           C
ATOM   1412  CG1 VAL A 195      54.342  -0.053  38.270  1.00 38.02           C
ATOM   1413  CG2 VAL A 195      54.307  -1.860  36.562  1.00 32.63           C
ATOM   1414  N   PRO A 196      54.389   2.796  36.537  1.00 35.66           N
ATOM   1415  CA  PRO A 196      54.784   4.168  36.893  1.00 36.22           C
ATOM   1416  C   PRO A 196      55.675   4.226  38.123  1.00 29.13           C
ATOM   1417  O   PRO A 196      55.584   3.397  39.028  1.00 33.31           O
ATOM   1418  CB  PRO A 196      53.443   4.865  37.150  1.00 33.89           C
ATOM   1419  CG  PRO A 196      52.465   4.085  36.338  1.00 36.79           C
```

[1984]

```
ATOM   1420  CD  PRO A 196      52.930   2.663  36.371  1.00 35.95           C
ATOM   1421  N   SER A 197      56.539   5.235  38.156  1.00 32.78           N
ATOM   1422  CA  SER A 197      57.475   5.367  39.266  1.00 35.88           C
ATOM   1423  C   SER A 197      56.821   5.828  40.567  1.00 35.60           C
ATOM   1424  O   SER A 197      57.494   5.817  41.603  1.00 34.10           O
ATOM   1425  CB  SER A 197      58.605   6.329  38.885  1.00 38.48           C
ATOM   1426  OG  SER A 197      58.535   7.523  39.644  1.00 47.40           O
ATOM   1427  N   ARG A 198      55.532   6.200  40.561  1.00 34.84           N
ATOM   1428  CA  ARG A 198      54.879   6.559  41.818  1.00 32.74           C
ATOM   1429  C   ARG A 198      54.572   5.350  42.700  1.00 35.35           C
ATOM   1430  O   ARG A 198      54.208   5.540  43.870  1.00 32.19           O
ATOM   1431  CB  ARG A 198      53.592   7.346  41.547  1.00 34.84           C
ATOM   1432  CG  ARG A 198      52.516   6.584  40.810  1.00 33.19           C
ATOM   1433  CD  ARG A 198      51.228   7.420  40.687  1.00 34.01           C
ATOM   1434  NE  ARG A 198      50.189   6.659  40.001  1.00 36.59           N
ATOM   1435  CZ  ARG A 198      50.138   6.531  38.676  1.00 38.07           C
ATOM   1436  NH1 ARG A 198      51.062   7.120  37.928  1.00 33.21           N
ATOM   1437  NH2 ARG A 198      49.181   5.814  38.099  1.00 37.65           N
ATOM   1438  N   PHE A 199      54.709   4.129  42.169  1.00 29.09           N
ATOM   1439  CA  PHE A 199      54.600   2.895  42.939  1.00 26.56           C
ATOM   1440  C   PHE A 199      55.960   2.496  43.486  1.00 30.89           C
ATOM   1441  O   PHE A 199      56.968   2.566  42.781  1.00 32.93           O
ATOM   1442  CB  PHE A 199      54.065   1.745  42.073  1.00 30.99           C
ATOM   1443  CG  PHE A 199      52.654   1.932  41.622  1.00 29.76           C
ATOM   1444  CD1 PHE A 199      51.594   1.503  42.413  1.00 27.38           C
ATOM   1445  CD2 PHE A 199      52.378   2.538  40.403  1.00 33.80           C
ATOM   1446  CE1 PHE A 199      50.296   1.682  42.005  1.00 26.33           C
ATOM   1447  CE2 PHE A 199      51.053   2.719  39.984  1.00 33.31           C
ATOM   1448  CZ  PHE A 199      50.024   2.293  40.790  1.00 30.10           C
ATOM   1449  N   SER A 200      55.989   2.083  44.747  1.00 29.05           N
ATOM   1450  CA  SER A 200      57.196   1.508  45.316  1.00 30.47           C
ATOM   1451  C   SER A 200      56.810   0.481  46.367  1.00 29.16           C
ATOM   1452  O   SER A 200      55.718   0.522  46.939  1.00 28.93           O
ATOM   1453  CB  SER A 200      58.102   2.582  45.929  1.00 34.30           C
ATOM   1454  OG  SER A 200      57.465   3.207  47.031  1.00 37.37           O
ATOM   1455  N   GLY A 201      57.734  -0.435  46.629  1.00 26.64           N
ATOM   1456  CA  GLY A 201      57.546  -1.409  47.678  1.00 27.03           C
ATOM   1457  C   GLY A 201      58.832  -1.583  48.455  1.00 21.29           C
ATOM   1458  O   GLY A 201      59.914  -1.250  47.978  1.00 31.19           O
ATOM   1459  N   SER A 202      58.698  -2.110  49.665  1.00 22.48           N
ATOM   1460  CA  SER A 202      59.877  -2.395  50.467  1.00 28.07           C
ATOM   1461  C   SER A 202      59.554  -3.495  51.468  1.00 30.26           C
ATOM   1462  O   SER A 202      58.387  -3.827  51.705  1.00 28.43           O
ATOM   1463  CB  SER A 202      60.373  -1.140  51.194  1.00 32.55           C
ATOM   1464  OG  SER A 202      59.409  -0.718  52.142  1.00 35.41           O
ATOM   1465  N   GLY A 203      60.611  -4.060  52.046  1.00 26.71           N
ATOM   1466  CA  GLY A 203      60.475  -5.018  53.122  1.00 27.20           C
ATOM   1467  C   GLY A 203      61.192  -6.325  52.860  1.00 33.64           C
ATOM   1468  O   GLY A 203      61.480  -6.676  51.714  1.00 33.22           O
ATOM   1469  N   SER A 204      61.470  -7.074  53.918  1.00 30.59           N
ATOM   1470  CA  SER A 204      61.942  -8.437  53.751  1.00 33.55           C
ATOM   1471  C   SER A 204      61.624  -9.186  55.034  1.00 32.53           C
ATOM   1472  O   SER A 204      61.472  -8.589  56.104  1.00 38.64           O
ATOM   1473  CB  SER A 204      63.441  -8.498  53.427  1.00 35.17           C
ATOM   1474  OG  SER A 204      64.207  -8.195  54.581  1.00 51.25           O
ATOM   1475  N   GLY A 205      61.530 -10.501  54.913  1.00 29.18           N
ATOM   1476  CA  GLY A 205      61.168 -11.339  56.035  1.00 30.19           C
ATOM   1477  C   GLY A 205      59.669 -11.538  56.104  1.00 30.63           C
ATOM   1478  O   GLY A 205      59.122 -12.308  55.315  1.00 29.84           O
ATOM   1479  N   THR A 206      58.987 -10.858  57.022  1.00 26.64           N
ATOM   1480  CA  THR A 206      57.562 -11.072  57.193  1.00 28.08           C
ATOM   1481  C   THR A 206      56.718  -9.855  56.851  1.00 29.75           C
ATOM   1482  O   THR A 206      55.525 -10.016  56.581  1.00 30.94           O
ATOM   1483  CB  THR A 206      57.237 -11.489  58.641  1.00 29.82           C
ATOM   1484  OG1 THR A 206      57.716 -10.494  59.549  1.00 32.45           O
ATOM   1485  CG2 THR A 206      57.858 -12.829  58.989  1.00 28.70           C
ATOM   1486  N   ASP A 207      57.298  -8.659  56.814  1.00 28.67           N
ATOM   1487  CA  ASP A 207      56.526  -7.424  56.723  1.00 27.94           C
```

[1985]

```
ATOM   1488  C   ASP A 207      56.926  -6.616  55.498  1.00 27.66           C
ATOM   1489  O   ASP A 207      58.111  -6.387  55.253  1.00 30.65           O
ATOM   1490  CB  ASP A 207      56.687  -6.608  58.004  1.00 33.16           C
ATOM   1491  CG  ASP A 207      56.074  -7.315  59.209  1.00 38.03           C
ATOM   1492  OD1 ASP A 207      54.855  -7.156  59.433  1.00 40.05           O
ATOM   1493  OD2 ASP A 207      56.790  -8.077  59.899  1.00 43.67           O
ATOM   1494  N   PHE A 208      55.928  -6.182  54.737  1.00 23.12           N
ATOM   1495  CA  PHE A 208      56.131  -5.558  53.442  1.00 22.70           C
ATOM   1496  C   PHE A 208      55.163  -4.402  53.289  1.00 23.62           C
ATOM   1497  O   PHE A 208      54.081  -4.400  53.876  1.00 23.29           O
ATOM   1498  CB  PHE A 208      55.927  -6.575  52.294  1.00 24.25           C
ATOM   1499  CG  PHE A 208      56.802  -7.775  52.409  1.00 24.18           C
ATOM   1500  CD1 PHE A 208      56.420  -8.858  53.186  1.00 28.46           C
ATOM   1501  CD2 PHE A 208      58.028  -7.809  51.769  1.00 25.60           C
ATOM   1502  CE1 PHE A 208      57.251  -9.957  53.314  1.00 27.91           C
ATOM   1503  CE2 PHE A 208      58.863  -8.906  51.883  1.00 24.63           C
ATOM   1504  CZ  PHE A 208      58.475  -9.981  52.656  1.00 23.09           C
ATOM   1505  N   THR A 209      55.556  -3.423  52.488  1.00 24.18           N
ATOM   1506  CA  THR A 209      54.729  -2.253  52.258  1.00 24.53           C
ATOM   1507  C   THR A 209      54.684  -1.953  50.776  1.00 23.30           C
ATOM   1508  O   THR A 209      55.661  -2.166  50.056  1.00 22.89           O
ATOM   1509  CB  THR A 209      55.271  -1.016  52.976  1.00 28.42           C
ATOM   1510  OG1 THR A 209      56.600  -0.755  52.489  1.00 29.88           O
ATOM   1511  CG2 THR A 209      55.293  -1.243  54.473  1.00 23.75           C
ATOM   1512  N   LEU A 210      53.537  -1.486  50.327  1.00 25.18           N
ATOM   1513  CA  LEU A 210      53.381  -0.932  48.996  1.00 28.57           C
ATOM   1514  C   LEU A 210      52.975   0.515  49.190  1.00 29.87           C
ATOM   1515  O   LEU A 210      52.088   0.801  50.002  1.00 28.84           O
ATOM   1516  CB  LEU A 210      52.330  -1.695  48.186  1.00 23.37           C
ATOM   1517  CG  LEU A 210      51.946  -1.179  46.796  1.00 29.41           C
ATOM   1518  CD1 LEU A 210      53.075  -1.458  45.845  1.00 24.82           C
ATOM   1519  CD2 LEU A 210      50.674  -1.849  46.265  1.00 26.50           C
ATOM   1520  N   THR A 211      53.649   1.424  48.495  1.00 28.52           N
ATOM   1521  CA  THR A 211      53.348   2.843  48.596  1.00 29.92           C
ATOM   1522  C   THR A 211      53.058   3.408  47.219  1.00 30.22           C
ATOM   1523  O   THR A 211      53.763   3.102  46.254  1.00 31.40           O
ATOM   1524  CB  THR A 211      54.505   3.620  49.243  1.00 33.53           C
ATOM   1525  OG1 THR A 211      54.833   3.031  50.511  1.00 31.95           O
ATOM   1526  CG2 THR A 211      54.160   5.098  49.394  1.00 32.54           C
ATOM   1527  N   ILE A 212      52.009   4.218  47.139  1.00 32.30           N
ATOM   1528  CA  ILE A 212      51.740   5.081  45.996  1.00 34.06           C
ATOM   1529  C   ILE A 212      52.028   6.515  46.430  1.00 37.34           C
ATOM   1530  O   ILE A 212      51.285   7.096  47.234  1.00 40.73           O
ATOM   1531  CB  ILE A 212      50.303   4.933  45.486  1.00 34.84           C
ATOM   1532  CG1 ILE A 212      49.936   3.454  45.369  1.00 34.15           C
ATOM   1533  CG2 ILE A 212      50.163   5.633  44.139  1.00 36.70           C
ATOM   1534  CD1 ILE A 212      48.456   3.207  45.079  1.00 34.61           C
ATOM   1535  N   SER A 213      53.122   7.079  45.914  1.00 37.35           N
ATOM   1536  CA  SER A 213      53.607   8.364  46.411  1.00 41.11           C
ATOM   1537  C   SER A 213      52.605   9.479  46.150  1.00 42.99           C
ATOM   1538  O   SER A 213      52.557  10.462  46.907  1.00 42.84           O
ATOM   1539  CB  SER A 213      54.959   8.701  45.777  1.00 38.33           C
ATOM   1540  OG  SER A 213      54.817   8.972  44.387  1.00 37.90           O
ATOM   1541  N   SER A 214      51.803   9.358  45.092  1.00 36.85           N
ATOM   1542  CA  SER A 214      50.782  10.366  44.822  1.00 40.71           C
ATOM   1543  C   SER A 214      49.617   9.695  44.116  1.00 38.57           C
ATOM   1544  O   SER A 214      49.727   9.337  42.941  1.00 39.59           O
ATOM   1545  CB  SER A 214      51.346  11.509  43.981  1.00 43.16           C
ATOM   1546  OG  SER A 214      52.339  12.244  44.693  1.00 50.47           O
ATOM   1547  N   LEU A 215      48.496   9.567  44.817  1.00 39.61           N
ATOM   1548  CA  LEU A 215      47.351   8.861  44.267  1.00 37.24           C
ATOM   1549  C   LEU A 215      46.803   9.638  43.081  1.00 41.53           C
ATOM   1550  O   LEU A 215      46.475  10.825  43.204  1.00 45.52           O
ATOM   1551  CB  LEU A 215      46.279   8.686  45.332  1.00 40.33           C
ATOM   1552  CG  LEU A 215      45.514   7.370  45.312  1.00 43.22           C
ATOM   1553  CD1 LEU A 215      46.480   6.199  45.383  1.00 43.03           C
ATOM   1554  CD2 LEU A 215      44.513   7.326  46.454  1.00 40.12           C
ATOM   1555  N   GLN A 216      46.754   8.990  41.930  1.00 39.21           N
```

[1986]

```
ATOM   1556  CA  GLN A 216      46.127   9.532  40.743  1.00 39.60           C
ATOM   1557  C   GLN A 216      44.775   8.870  40.526  1.00 43.54           C
ATOM   1558  O   GLN A 216      44.485   7.825  41.119  1.00 39.79           O
ATOM   1559  CB  GLN A 216      47.036   9.329  39.533  1.00 40.13           C
ATOM   1560  CG  GLN A 216      48.418   9.874  39.773  1.00 40.12           C
ATOM   1561  CD  GLN A 216      49.197  10.000  38.499  1.00 41.90           C
ATOM   1562  OE1 GLN A 216      48.662   9.770  37.408  1.00 38.68           O
ATOM   1563  NE2 GLN A 216      50.473  10.362  38.619  1.00 36.42           N
ATOM   1564  N   PRO A 217      43.904   9.464  39.700  1.00 43.44           N
ATOM   1565  CA  PRO A 217      42.543   8.915  39.582  1.00 46.14           C
ATOM   1566  C   PRO A 217      42.502   7.467  39.127  1.00 44.71           C
ATOM   1567  O   PRO A 217      41.656   6.703  39.604  1.00 47.60           O
ATOM   1568  CB  PRO A 217      41.885   9.858  38.567  1.00 42.54           C
ATOM   1569  CG  PRO A 217      42.602  11.144  38.749  1.00 43.76           C
ATOM   1570  CD  PRO A 217      44.027  10.760  39.006  1.00 41.98           C
ATOM   1571  N   GLU A 218      43.419   7.054  38.252  1.00 44.31           N
ATOM   1572  CA  GLU A 218      43.410   5.690  37.731  1.00 46.18           C
ATOM   1573  C   GLU A 218      43.899   4.656  38.742  1.00 45.70           C
ATOM   1574  O   GLU A 218      43.806   3.455  38.469  1.00 43.44           O
ATOM   1575  CB  GLU A 218      44.250   5.626  36.448  1.00 45.82           C
ATOM   1576  CG  GLU A 218      45.660   6.226  36.556  1.00 48.04           C
ATOM   1577  CD  GLU A 218      45.700   7.751  36.345  1.00 54.48           C
ATOM   1578  OE1 GLU A 218      44.761   8.459  36.790  1.00 49.52           O
ATOM   1579  OE2 GLU A 218      46.683   8.243  35.736  1.00 55.55           O
ATOM   1580  N   ASP A 219      44.411   5.087  39.893  1.00 43.67           N
ATOM   1581  CA  ASP A 219      44.965   4.179  40.889  1.00 40.71           C
ATOM   1582  C   ASP A 219      43.918   3.662  41.867  1.00 42.50           C
ATOM   1583  O   ASP A 219      44.230   2.774  42.672  1.00 39.99           O
ATOM   1584  CB  ASP A 219      46.081   4.873  41.683  1.00 37.54           C
ATOM   1585  CG  ASP A 219      47.246   5.281  40.817  1.00 38.89           C
ATOM   1586  OD1 ASP A 219      47.423   4.685  39.740  1.00 45.26           O
ATOM   1587  OD2 ASP A 219      47.989   6.209  41.206  1.00 43.65           O
ATOM   1588  N   PHE A 220      42.693   4.185  41.829  1.00 41.01           N
ATOM   1589  CA  PHE A 220      41.637   3.634  42.670  1.00 42.35           C
ATOM   1590  C   PHE A 220      41.276   2.262  42.123  1.00 39.61           C
ATOM   1591  O   PHE A 220      40.798   2.140  40.992  1.00 44.85           O
ATOM   1592  CB  PHE A 220      40.429   4.566  42.720  1.00 45.42           C
ATOM   1593  CG  PHE A 220      40.714   5.889  43.373  1.00 45.43           C
ATOM   1594  CD1 PHE A 220      40.602   6.033  44.752  1.00 49.03           C
ATOM   1595  CD2 PHE A 220      41.103   6.987  42.618  1.00 47.15           C
ATOM   1596  CE1 PHE A 220      40.871   7.252  45.371  1.00 47.16           C
ATOM   1597  CE2 PHE A 220      41.374   8.207  43.223  1.00 47.04           C
ATOM   1598  CZ  PHE A 220      41.254   8.342  44.601  1.00 48.64           C
ATOM   1599  N   ALA A 221      41.573   1.231  42.901  1.00 40.15           N
ATOM   1600  CA  ALA A 221      41.516  -0.161  42.464  1.00 36.90           C
ATOM   1601  C   ALA A 221      41.724  -1.027  43.702  1.00 36.16           C
ATOM   1602  O   ALA A 221      41.803  -0.516  44.827  1.00 36.94           O
ATOM   1603  CB  ALA A 221      42.558  -0.436  41.380  1.00 33.29           C
ATOM   1604  N   THR A 222      41.824  -2.336  43.502  1.00 30.76           N
ATOM   1605  CA  THR A 222      42.177  -3.275  44.558  1.00 31.92           C
ATOM   1606  C   THR A 222      43.601  -3.777  44.348  1.00 27.06           C
ATOM   1607  O   THR A 222      43.996  -4.105  43.226  1.00 24.98           O
ATOM   1608  CB  THR A 222      41.181  -4.446  44.600  1.00 33.37           C
ATOM   1609  OG1 THR A 222      39.864  -3.927  44.818  1.00 35.56           O
ATOM   1610  CG2 THR A 222      41.524  -5.457  45.699  1.00 31.36           C
ATOM   1611  N   TYR A 223      44.358  -3.846  45.438  1.00 24.73           N
ATOM   1612  CA  TYR A 223      45.757  -4.253  45.415  1.00 26.99           C
ATOM   1613  C   TYR A 223      45.920  -5.528  46.229  1.00 27.08           C
ATOM   1614  O   TYR A 223      45.430  -5.617  47.361  1.00 28.39           O
ATOM   1615  CB  TYR A 223      46.670  -3.126  45.950  1.00 27.44           C
ATOM   1616  CG  TYR A 223      46.616  -1.905  45.053  1.00 29.41           C
ATOM   1617  CD1 TYR A 223      47.459  -1.795  43.958  1.00 25.05           C
ATOM   1618  CD2 TYR A 223      45.674  -0.891  45.264  1.00 29.24           C
ATOM   1619  CE1 TYR A 223      47.395  -0.710  43.103  1.00 26.51           C
ATOM   1620  CE2 TYR A 223      45.595   0.201  44.404  1.00 31.43           C
ATOM   1621  CZ  TYR A 223      46.467   0.286  43.325  1.00 32.69           C
ATOM   1622  OH  TYR A 223      46.413   1.358  42.457  1.00 32.36           O
ATOM   1623  N   TYR A 224      46.629  -6.504  45.661  1.00 24.77           N
```

[1987]

```
ATOM   1624  CA  TYR A 224      46.864  -7.788  46.310  1.00 26.68           C
ATOM   1625  C   TYR A 224      48.356  -8.022  46.464  1.00 26.85           C
ATOM   1626  O   TYR A 224      49.117  -7.826  45.507  1.00 27.06           O
ATOM   1627  CB  TYR A 224      46.285  -8.951  45.509  1.00 24.07           C
ATOM   1628  CG  TYR A 224      44.795  -8.921  45.314  1.00 26.87           C
ATOM   1629  CD1 TYR A 224      43.953  -9.529  46.228  1.00 24.87           C
ATOM   1630  CD2 TYR A 224      44.233  -8.316  44.204  1.00 24.15           C
ATOM   1631  CE1 TYR A 224      42.591  -9.525  46.048  1.00 26.07           C
ATOM   1632  CE2 TYR A 224      42.877  -8.310  44.012  1.00 25.03           C
ATOM   1633  CZ  TYR A 224      42.056  -8.912  44.947  1.00 27.33           C
ATOM   1634  OH  TYR A 224      40.694  -8.914  44.774  1.00 27.47           O
ATOM   1635  N   CYS A 225      48.769  -8.469  47.648  1.00 22.19           N
ATOM   1636  CA  CYS A 225      50.109  -9.022  47.756  1.00 24.73           C
ATOM   1637  C   CYS A 225      50.057 -10.534  47.556  1.00 24.05           C
ATOM   1638  O   CYS A 225      48.999 -11.168  47.629  1.00 23.86           O
ATOM   1639  CB  CYS A 225      50.765  -8.692  49.097  1.00 23.26           C
ATOM   1640  SG  CYS A 225      49.976  -9.430  50.520  1.00 30.49           S
ATOM   1641  N   GLN A 226      51.223 -11.108  47.283  1.00 23.75           N
ATOM   1642  CA  GLN A 226      51.290 -12.530  46.992  1.00 22.26           C
ATOM   1643  C   GLN A 226      52.701 -13.017  47.285  1.00 22.12           C
ATOM   1644  O   GLN A 226      53.671 -12.441  46.785  1.00 20.26           O
ATOM   1645  CB  GLN A 226      50.899 -12.782  45.536  1.00 23.49           C
ATOM   1646  CG  GLN A 226      50.891 -14.262  45.122  1.00 25.22           C
ATOM   1647  CD  GLN A 226      52.042 -14.627  44.190  1.00 29.43           C
ATOM   1648  OE1 GLN A 226      52.472 -13.832  43.352  1.00 27.21           O
ATOM   1649  NE2 GLN A 226      52.572 -15.826  44.367  1.00 35.31           N
ATOM   1650  N   GLN A 227      52.816 -14.055  48.111  1.00 17.03           N
ATOM   1651  CA  GLN A 227      54.107 -14.682  48.343  1.00 19.15           C
ATOM   1652  C   GLN A 227      54.346 -15.717  47.247  1.00 24.51           C
ATOM   1653  O   GLN A 227      53.421 -16.419  46.809  1.00 24.89           O
ATOM   1654  CB  GLN A 227      54.178 -15.336  49.730  1.00 19.54           C
ATOM   1655  CG  GLN A 227      53.235 -16.514  49.968  1.00 24.15           C
ATOM   1656  CD  GLN A 227      53.824 -17.846  49.532  1.00 26.07           C
ATOM   1657  OE1 GLN A 227      54.991 -17.919  49.163  1.00 23.16           O
ATOM   1658  NE2 GLN A 227      53.012 -18.899  49.559  1.00 23.78           N
ATOM   1659  N   SER A 228      55.566 -15.736  46.744  1.00 24.08           N
ATOM   1660  CA  SER A 228      55.995 -16.736  45.787  1.00 28.34           C
ATOM   1661  C   SER A 228      57.181 -17.496  46.356  1.00 28.60           C
ATOM   1662  O   SER A 228      58.010 -18.029  45.624  1.00 27.58           O
ATOM   1663  CB  SER A 228      56.301 -16.100  44.432  1.00 28.13           C
ATOM   1664  OG  SER A 228      57.211 -15.030  44.568  1.00 33.92           O
ATOM   1665  N   TYR A 229      57.263 -17.542  47.687  1.00 25.46           N
ATOM   1666  CA  TYR A 229      58.289 -18.348  48.332  1.00 28.27           C
ATOM   1667  C   TYR A 229      58.003 -19.833  48.151  1.00 28.97           C
ATOM   1668  O   TYR A 229      58.895 -20.609  47.802  1.00 26.00           O
ATOM   1669  CB  TYR A 229      58.360 -17.996  49.813  1.00 26.99           C
ATOM   1670  CG  TYR A 229      59.483 -18.640  50.579  1.00 28.06           C
ATOM   1671  CD1 TYR A 229      60.722 -18.022  50.672  1.00 30.69           C
ATOM   1672  CD2 TYR A 229      59.302 -19.847  51.242  1.00 32.17           C
ATOM   1673  CE1 TYR A 229      61.760 -18.595  51.392  1.00 31.83           C
ATOM   1674  CE2 TYR A 229      60.336 -20.430  51.964  1.00 34.79           C
ATOM   1675  CZ  TYR A 229      61.558 -19.790  52.041  1.00 33.49           C
ATOM   1676  OH  TYR A 229      62.587 -20.359  52.757  1.00 44.65           O
ATOM   1677  N   SER A 230      56.759 -20.246  48.371  1.00 25.69           N
ATOM   1678  CA  SER A 230      56.459 -21.666  48.439  1.00 27.79           C
ATOM   1679  C   SER A 230      55.020 -21.953  48.029  1.00 36.07           C
ATOM   1680  O   SER A 230      54.095 -21.195  48.340  1.00 36.08           O
ATOM   1681  CB  SER A 230      56.705 -22.198  49.850  1.00 35.66           C
ATOM   1682  OG  SER A 230      56.462 -23.587  49.892  1.00 45.45           O
ATOM   1683  N   THR A 231      54.852 -23.078  47.358  1.00 29.43           N
ATOM   1684  CA  THR A 231      53.548 -23.569  46.961  1.00 32.95           C
ATOM   1685  C   THR A 231      52.764 -24.062  48.176  1.00 34.30           C
ATOM   1686  O   THR A 231      53.343 -24.672  49.083  1.00 38.56           O
ATOM   1687  CB  THR A 231      53.751 -24.697  45.937  1.00 33.73           C
ATOM   1688  OG1 THR A 231      53.240 -24.281  44.665  1.00 33.48           O
ATOM   1689  CG2 THR A 231      53.127 -26.014  46.395  1.00 28.81           C
ATOM   1690  N   PRO A 232      51.442 -23.792  48.246  1.00 35.99           N
ATOM   1691  CA  PRO A 232      50.565 -22.994  47.371  1.00 33.45           C
```

[1988]

```
ATOM   1692  C   PRO A 232      50.880 -21.502  47.413  1.00 32.24           C
ATOM   1693  O   PRO A 232      51.139 -20.985  48.497  1.00 30.34           O
ATOM   1694  CB  PRO A 232      49.161 -23.258  47.939  1.00 35.18           C
ATOM   1695  CG  PRO A 232      49.293 -24.510  48.728  1.00 40.09           C
ATOM   1696  CD  PRO A 232      50.669 -24.487  49.291  1.00 37.92           C
ATOM   1697  N   LEU A 233      50.877 -20.832  46.257  1.00 30.05           N
ATOM   1698  CA  LEU A 233      51.225 -19.413  46.191  1.00 29.54           C
ATOM   1699  C   LEU A 233      50.058 -18.586  46.724  1.00 30.14           C
ATOM   1700  O   LEU A 233      49.003 -18.498  46.089  1.00 37.23           O
ATOM   1701  CB  LEU A 233      51.583 -19.029  44.758  1.00 32.41           C
ATOM   1702  CG  LEU A 233      52.597 -19.954  44.063  1.00 33.85           C
ATOM   1703  CD1 LEU A 233      52.706 -19.631  42.590  1.00 37.35           C
ATOM   1704  CD2 LEU A 233      53.960 -19.879  44.698  1.00 30.54           C
ATOM   1705  N   THR A 234      50.249 -17.943  47.866  1.00 26.67           N
ATOM   1706  CA  THR A 234      49.149 -17.345  48.609  1.00 24.07           C
ATOM   1707  C   THR A 234      49.005 -15.874  48.267  1.00 25.33           C
ATOM   1708  O   THR A 234      49.999 -15.142  48.258  1.00 24.97           O
ATOM   1709  CB  THR A 234      49.383 -17.480  50.108  1.00 26.32           C
ATOM   1710  OG1 THR A 234      49.637 -18.847  50.423  1.00 33.72           O
ATOM   1711  CG2 THR A 234      48.142 -17.053  50.839  1.00 29.25           C
ATOM   1712  N   PHE A 235      47.767 -15.444  48.011  1.00 25.19           N
ATOM   1713  CA  PHE A 235      47.405 -14.038  47.872  1.00 23.54           C
ATOM   1714  C   PHE A 235      46.825 -13.500  49.177  1.00 26.47           C
ATOM   1715  O   PHE A 235      46.167 -14.222  49.927  1.00 27.21           O
ATOM   1716  CB  PHE A 235      46.364 -13.840  46.768  1.00 23.36           C
ATOM   1717  CG  PHE A 235      46.859 -14.177  45.390  1.00 23.41           C
ATOM   1718  CD1 PHE A 235      46.855 -15.486  44.948  1.00 29.89           C
ATOM   1719  CD2 PHE A 235      47.274 -13.181  44.522  1.00 24.94           C
ATOM   1720  CE1 PHE A 235      47.285 -15.809  43.679  1.00 24.03           C
ATOM   1721  CE2 PHE A 235      47.707 -13.493  43.252  1.00 27.19           C
ATOM   1722  CZ  PHE A 235      47.713 -14.811  42.831  1.00 26.02           C
ATOM   1723  N   GLY A 236      47.074 -12.219  49.450  1.00 24.28           N
ATOM   1724  CA  GLY A 236      46.364 -11.552  50.516  1.00 25.29           C
ATOM   1725  C   GLY A 236      44.911 -11.356  50.143  1.00 30.77           C
ATOM   1726  O   GLY A 236      44.496 -11.599  49.006  1.00 21.00           O
ATOM   1727  N   CYS A 237      44.125 -10.916  51.135  1.00 30.02           N
ATOM   1728  CA  CYS A 237      42.703 -10.641  50.934  1.00 33.58           C
ATOM   1729  C   CYS A 237      42.466  -9.396  50.091  1.00 32.04           C
ATOM   1730  O   CYS A 237      41.330  -9.168  49.654  1.00 29.96           O
ATOM   1731  CB  CYS A 237      41.988 -10.481  52.279  1.00 34.52           C
ATOM   1732  SG  CYS A 237      41.806 -12.016  53.247  1.00 54.41           S
ATOM   1733  N   GLY A 238      43.484  -8.576  49.891  1.00 24.78           N
ATOM   1734  CA  GLY A 238      43.282  -7.400  49.076  1.00 29.72           C
ATOM   1735  C   GLY A 238      42.987  -6.161  49.903  1.00 33.76           C
ATOM   1736  O   GLY A 238      42.379  -6.219  50.980  1.00 28.47           O
ATOM   1737  N   THR A 239      43.458  -5.021  49.406  1.00 27.98           N
ATOM   1738  CA  THR A 239      43.089  -3.718  49.930  1.00 33.22           C
ATOM   1739  C   THR A 239      42.363  -2.963  48.831  1.00 34.63           C
ATOM   1740  O   THR A 239      42.872  -2.851  47.710  1.00 35.45           O
ATOM   1741  CB  THR A 239      44.309  -2.918  50.404  1.00 34.21           C
ATOM   1742  OG1 THR A 239      44.950  -3.612  51.477  1.00 33.40           O
ATOM   1743  CG2 THR A 239      43.880  -1.540  50.904  1.00 33.57           C
ATOM   1744  N   LYS A 240      41.170  -2.462  49.135  1.00 36.13           N
ATOM   1745  CA  LYS A 240      40.465  -1.612  48.190  1.00 39.78           C
ATOM   1746  C   LYS A 240      40.763  -0.155  48.521  1.00 38.31           C
ATOM   1747  O   LYS A 240      40.595   0.281  49.666  1.00 35.80           O
ATOM   1748  CB  LYS A 240      38.961  -1.880  48.187  1.00 38.25           C
ATOM   1749  CG  LYS A 240      38.233  -1.048  47.142  1.00 45.67           C
ATOM   1750  CD  LYS A 240      36.833  -1.570  46.857  1.00 47.31           C
ATOM   1751  CE  LYS A 240      36.894  -2.608  45.732  1.00 49.43           C
ATOM   1752  NZ  LYS A 240      35.558  -2.923  45.148  1.00 48.36           N
ATOM   1753  N   VAL A 241      41.250   0.569  47.517  1.00 41.63           N
ATOM   1754  CA  VAL A 241      41.571   1.987  47.602  1.00 38.20           C
ATOM   1755  C   VAL A 241      40.451   2.717  46.876  1.00 43.03           C
ATOM   1756  O   VAL A 241      40.351   2.640  45.645  1.00 42.69           O
ATOM   1757  CB  VAL A 241      42.935   2.298  46.968  1.00 39.35           C
ATOM   1758  CG1 VAL A 241      43.260   3.769  47.094  1.00 39.31           C
ATOM   1759  CG2 VAL A 241      44.035   1.449  47.589  1.00 35.72           C
```

[1989]

```
ATOM   1760  N   GLU A 242      39.600   3.409  47.628  1.00 44.19           N
ATOM   1761  CA  GLU A 242      38.441   4.100  47.076  1.00 49.77           C
ATOM   1762  C   GLU A 242      38.482   5.578  47.447  1.00 48.97           C
ATOM   1763  O   GLU A 242      39.234   6.001  48.329  1.00 49.18           O
ATOM   1764  CB  GLU A 242      37.140   3.454  47.569  1.00 52.05           C
ATOM   1765  CG  GLU A 242      37.084   3.266  49.076  1.00 58.59           C
ATOM   1766  CD  GLU A 242      35.869   2.465  49.532  1.00 66.16           C
ATOM   1767  OE1 GLU A 242      35.963   1.217  49.590  1.00 63.91           O
ATOM   1768  OE2 GLU A 242      34.822   3.087  49.827  1.00 70.14           O
ATOM   1769  N   ILE A 243      37.660   6.374  46.748  1.00 52.36           N
ATOM   1770  CA  ILE A 243      37.630   7.820  46.960  1.00 55.15           C
ATOM   1771  C   ILE A 243      36.798   8.143  48.195  1.00 54.24           C
ATOM   1772  O   ILE A 243      35.819   7.455  48.509  1.00 53.24           O
ATOM   1773  CB  ILE A 243      37.090   8.567  45.722  1.00 56.08           C
ATOM   1774  CG1 ILE A 243      37.721   8.042  44.428  1.00 52.15           C
ATOM   1775  CG2 ILE A 243      37.377  10.070  45.851  1.00 55.31           C
ATOM   1776  CD1 ILE A 243      36.952   6.914  43.736  1.00 53.26           C
ATOM   1777  N   LYS A 244      37.192   9.205  48.905  1.00 53.73           N
ATOM   1778  CA  LYS A 244      36.480   9.637  50.104  1.00 54.08           C
ATOM   1779  C   LYS A 244      35.482  10.754  49.781  1.00 62.57           C
ATOM   1780  O   LYS A 244      35.573  11.407  48.736  1.00 61.17           O
ATOM   1781  CB  LYS A 244      37.465  10.102  51.190  1.00 53.57           C
ATOM   1782  CG  LYS A 244      38.105  11.472  50.961  1.00 56.19           C
ATOM   1783  CD  LYS A 244      38.252  12.251  52.282  1.00 53.27           C
ATOM   1784  CE  LYS A 244      36.877  12.538  52.922  1.00 57.99           C
ATOM   1785  NZ  LYS A 244      36.955  13.085  54.318  1.00 49.76           N
TER
ATOM   1786  N   GLU B   1      34.157 -32.092  88.570  1.00 52.35           N
ATOM   1787  CA  GLU B   1      35.315 -31.678  87.782  1.00 48.36           C
ATOM   1788  C   GLU B   1      35.028 -30.363  87.058  1.00 45.66           C
ATOM   1789  O   GLU B   1      34.583 -29.389  87.673  1.00 48.07           O
ATOM   1790  CB  GLU B   1      35.695 -32.773  86.781  1.00 48.63           C
ATOM   1791  N   VAL B   2      35.276 -30.336  85.747  1.00 46.25           N
ATOM   1792  CA  VAL B   2      34.800 -29.226  84.930  1.00 46.33           C
ATOM   1793  C   VAL B   2      33.278 -29.222  84.909  1.00 45.04           C
ATOM   1794  O   VAL B   2      32.636 -30.250  84.658  1.00 46.02           O
ATOM   1795  CB  VAL B   2      35.391 -29.320  83.516  1.00 45.46           C
ATOM   1796  CG1 VAL B   2      34.727 -28.302  82.585  1.00 41.38           C
ATOM   1797  CG2 VAL B   2      36.884 -29.085  83.583  1.00 42.54           C
ATOM   1798  N   GLN B   3      32.691 -28.058  85.184  1.00 43.54           N
ATOM   1799  CA  GLN B   3      31.247 -27.889  85.185  1.00 39.36           C
ATOM   1800  C   GLN B   3      30.892 -26.565  84.520  1.00 37.29           C
ATOM   1801  O   GLN B   3      31.563 -25.554  84.733  1.00 37.65           O
ATOM   1802  CB  GLN B   3      30.687 -27.944  86.610  1.00 44.32           C
ATOM   1803  CG  GLN B   3      29.238 -28.394  86.672  1.00 49.58           C
ATOM   1804  CD  GLN B   3      28.673 -28.368  88.075  1.00 51.93           C
ATOM   1805  OE1 GLN B   3      29.323 -28.797  89.031  1.00 52.50           O
ATOM   1806  NE2 GLN B   3      27.451 -27.856  88.208  1.00 52.60           N
ATOM   1807  N   LEU B   4      29.850 -26.583  83.698  1.00 34.00           N
ATOM   1808  CA  LEU B   4      29.306 -25.389  83.069  1.00 32.72           C
ATOM   1809  C   LEU B   4      27.796 -25.390  83.273  1.00 34.36           C
ATOM   1810  O   LEU B   4      27.125 -26.361  82.917  1.00 31.74           O
ATOM   1811  CB  LEU B   4      29.644 -25.347  81.571  1.00 33.82           C
ATOM   1812  CG  LEU B   4      31.128 -25.324  81.205  1.00 35.23           C
ATOM   1813  CD1 LEU B   4      31.328 -25.556  79.702  1.00 33.83           C
ATOM   1814  CD2 LEU B   4      31.780 -24.029  81.660  1.00 28.39           C
ATOM   1815  N   LEU B   5      27.259 -24.316  83.846  1.00 30.94           N
ATOM   1816  CA  LEU B   5      25.844 -24.271  84.201  1.00 35.99           C
ATOM   1817  C   LEU B   5      25.202 -23.062  83.532  1.00 32.04           C
ATOM   1818  O   LEU B   5      25.462 -21.922  83.927  1.00 34.35           O
ATOM   1819  CB  LEU B   5      25.687 -24.221  85.719  1.00 33.95           C
ATOM   1820  CG  LEU B   5      24.358 -24.615  86.366  1.00 48.53           C
ATOM   1821  CD1 LEU B   5      23.402 -25.314  85.383  1.00 43.01           C
ATOM   1822  CD2 LEU B   5      24.632 -25.496  87.589  1.00 50.07           C
ATOM   1823  N   GLU B   6      24.359 -23.317  82.526  1.00 33.22           N
ATOM   1824  CA  GLU B   6      23.631 -22.259  81.835  1.00 31.97           C
ATOM   1825  C   GLU B   6      22.370 -21.893  82.609  1.00 28.14           C
ATOM   1826  O   GLU B   6      21.788 -22.713  83.315  1.00 34.06           O
```

[1990]

```
ATOM   1827  CB  GLU B   6      23.209 -22.678  80.418  1.00 31.78           C
ATOM   1828  CG  GLU B   6      24.306 -22.976  79.395  1.00 32.70           C
ATOM   1829  CD  GLU B   6      24.591 -24.459  79.275  1.00 36.66           C
ATOM   1830  OE1 GLU B   6      24.263 -25.193  80.238  1.00 37.65           O
ATOM   1831  OE2 GLU B   6      25.141 -24.894  78.226  1.00 35.91           O
ATOM   1832  N   SER B   7      21.949 -20.648  82.462  1.00 28.94           N
ATOM   1833  CA  SER B   7      20.690 -20.199  83.031  1.00 34.18           C
ATOM   1834  C   SER B   7      20.192 -19.016  82.218  1.00 31.16           C
ATOM   1835  O   SER B   7      20.976 -18.310  81.575  1.00 27.99           O
ATOM   1836  CB  SER B   7      20.834 -19.827  84.512  1.00 37.24           C
ATOM   1837  OG  SER B   7      21.486 -18.583  84.658  1.00 38.19           O
ATOM   1838  N   GLY B   8      18.881 -18.814  82.241  1.00 33.61           N
ATOM   1839  CA  GLY B   8      18.272 -17.620  81.693  1.00 30.21           C
ATOM   1840  C   GLY B   8      17.298 -17.864  80.563  1.00 34.95           C
ATOM   1841  O   GLY B   8      16.653 -16.907  80.114  1.00 32.21           O
ATOM   1842  N   GLY B   9      17.165 -19.093  80.062  1.00 31.28           N
ATOM   1843  CA  GLY B   9      16.197 -19.345  79.019  1.00 33.29           C
ATOM   1844  C   GLY B   9      14.767 -19.104  79.463  1.00 36.54           C
ATOM   1845  O   GLY B   9      14.492 -18.826  80.634  1.00 39.38           O
ATOM   1846  N   GLY B  10      13.840 -19.262  78.554  1.00 33.43           N
ATOM   1847  CA  GLY B  10      12.446 -19.088  78.876  1.00 31.99           C
ATOM   1848  C   GLY B  10      11.717 -18.553  77.669  1.00 34.03           C
ATOM   1849  O   GLY B  10      12.253 -18.527  76.561  1.00 32.61           O
ATOM   1850  N   LEU B  11      10.467 -18.158  77.908  1.00 30.01           N
ATOM   1851  CA  LEU B  11       9.609 -17.634  76.860  1.00 27.36           C
ATOM   1852  C   LEU B  11       9.787 -16.125  76.749  1.00 27.90           C
ATOM   1853  O   LEU B  11       9.755 -15.410  77.751  1.00 30.68           O
ATOM   1854  CB  LEU B  11       8.148 -17.978  77.142  1.00 30.24           C
ATOM   1855  CG  LEU B  11       7.173 -17.527  76.053  1.00 32.85           C
ATOM   1856  CD1 LEU B  11       7.287 -18.435  74.796  1.00 28.54           C
ATOM   1857  CD2 LEU B  11       5.736 -17.452  76.586  1.00 33.81           C
ATOM   1858  N   VAL B  12       9.961 -15.644  75.529  1.00 27.00           N
ATOM   1859  CA  VAL B  12      10.175 -14.229  75.273  1.00 28.51           C
ATOM   1860  C   VAL B  12       9.416 -13.884  74.003  1.00 31.47           C
ATOM   1861  O   VAL B  12       9.223 -14.732  73.131  1.00 28.05           O
ATOM   1862  CB  VAL B  12      11.683 -13.903  75.149  1.00 32.05           C
ATOM   1863  CG1 VAL B  12      12.337 -14.690  73.971  1.00 30.69           C
ATOM   1864  CG2 VAL B  12      11.904 -12.406  75.023  1.00 36.71           C
ATOM   1865  N   GLN B  13       8.970 -12.731  73.928  1.00 32.07           N
ATOM   1866  CA  GLN B  13       8.220 -12.264  72.777  1.00 29.86           C
ATOM   1867  C   GLN B  13       9.167 -11.715  71.712  1.00 31.73           C
ATOM   1868  O   GLN B  13      10.228 -11.171  72.043  1.00 28.95           O
ATOM   1869  CB  GLN B  13       7.238 -11.181  73.201  1.00 34.20           C
ATOM   1870  CG  GLN B  13       6.380 -11.580  74.399  1.00 41.80           C
ATOM   1871  CD  GLN B  13       5.346 -12.632  74.032  1.00 39.29           C
ATOM   1872  OE1 GLN B  13       4.686 -12.512  72.999  1.00 38.73           O
ATOM   1873  NE2 GLN B  13       5.196 -13.668  74.876  1.00 33.04           N
ATOM   1874  N   PRO B  14       8.811 -11.856  70.428  1.00 30.61           N
ATOM   1875  CA  PRO B  14       9.662 -11.312  69.364  1.00 26.84           C
ATOM   1876  C   PRO B  14       9.929  -9.841  69.610  1.00 33.62           C
ATOM   1877  O   PRO B  14       9.029  -9.077  69.962  1.00 29.78           O
ATOM   1878  CB  PRO B  14       8.828 -11.518  68.096  1.00 36.19           C
ATOM   1879  CG  PRO B  14       7.905 -12.649  68.429  1.00 33.33           C
ATOM   1880  CD  PRO B  14       7.584 -12.466  69.888  1.00 31.18           C
ATOM   1881  N   GLY B  15      11.179  -9.449  69.436  1.00 29.81           N
ATOM   1882  CA  GLY B  15      11.585  -8.108  69.757  1.00 32.27           C
ATOM   1883  C   GLY B  15      12.044  -7.918  71.182  1.00 29.85           C
ATOM   1884  O   GLY B  15      12.606  -6.867  71.489  1.00 33.31           O
ATOM   1885  N   GLY B  16      11.812  -8.895  72.061  1.00 31.28           N
ATOM   1886  CA  GLY B  16      12.244  -8.803  73.440  1.00 35.51           C
ATOM   1887  C   GLY B  16      13.715  -9.157  73.626  1.00 33.98           C
ATOM   1888  O   GLY B  16      14.440  -9.481  72.687  1.00 27.38           O
ATOM   1889  N   SER B  17      14.152  -9.103  74.884  1.00 35.59           N
ATOM   1890  CA  SER B  17      15.550  -9.293  75.245  1.00 34.59           C
ATOM   1891  C   SER B  17      15.700 -10.408  76.270  1.00 30.17           C
ATOM   1892  O   SER B  17      14.831 -10.610  77.123  1.00 29.90           O
ATOM   1893  CB  SER B  17      16.158  -8.002  75.825  1.00 36.55           C
ATOM   1894  OG  SER B  17      16.163  -6.947  74.871  1.00 41.22           O
```

[1991]

```
ATOM   1895  N   LEU B  18      16.839 -11.100  76.205  1.00 23.95           N
ATOM   1896  CA  LEU B  18      17.218 -12.112  77.181  1.00 27.70           C
ATOM   1897  C   LEU B  18      18.717 -12.013  77.395  1.00 29.02           C
ATOM   1898  O   LEU B  18      19.455 -11.624  76.494  1.00 30.59           O
ATOM   1899  CB  LEU B  18      16.878 -13.549  76.756  1.00 26.56           C
ATOM   1900  CG  LEU B  18      15.458 -14.122  76.887  1.00 35.16           C
ATOM   1901  CD1 LEU B  18      15.384 -15.499  76.248  1.00 34.71           C
ATOM   1902  CD2 LEU B  18      15.002 -14.207  78.332  1.00 35.69           C
ATOM   1903  N   ARG B  19      19.159 -12.346  78.602  1.00 27.17           N
ATOM   1904  CA  ARG B  19      20.583 -12.403  78.921  1.00 27.89           C
ATOM   1905  C   ARG B  19      20.872 -13.791  79.478  1.00 28.82           C
ATOM   1906  O   ARG B  19      20.462 -14.110  80.597  1.00 28.37           O
ATOM   1907  CB  ARG B  19      20.967 -11.306  79.916  1.00 30.64           C
ATOM   1908  CG  ARG B  19      22.465 -11.128  80.098  1.00 33.11           C
ATOM   1909  CD  ARG B  19      22.800 -10.605  81.489  1.00 37.34           C
ATOM   1910  NE  ARG B  19      22.316 -11.523  82.527  1.00 42.19           N
ATOM   1911  CZ  ARG B  19      22.623 -11.438  83.822  1.00 44.27           C
ATOM   1912  NH1 ARG B  19      23.429 -10.473  84.262  1.00 43.20           N
ATOM   1913  NH2 ARG B  19      22.136 -12.330  84.679  1.00 41.18           N
ATOM   1914  N   LEU B  20      21.556 -14.626  78.702  1.00 24.03           N
ATOM   1915  CA  LEU B  20      21.902 -15.950  79.187  1.00 21.29           C
ATOM   1916  C   LEU B  20      23.170 -15.869  80.024  1.00 23.59           C
ATOM   1917  O   LEU B  20      24.026 -15.018  79.793  1.00 21.10           O
ATOM   1918  CB  LEU B  20      22.108 -16.914  78.014  1.00 22.52           C
ATOM   1919  CG  LEU B  20      20.930 -17.063  77.041  1.00 25.30           C
ATOM   1920  CD1 LEU B  20      21.258 -18.056  75.913  1.00 25.88           C
ATOM   1921  CD2 LEU B  20      19.669 -17.483  77.780  1.00 23.59           C
ATOM   1922  N   SER B  21      23.300 -16.778  80.988  1.00 21.06           N
ATOM   1923  CA  SER B  21      24.508 -16.860  81.785  1.00 25.43           C
ATOM   1924  C   SER B  21      25.025 -18.277  81.790  1.00 26.10           C
ATOM   1925  O   SER B  21      24.273 -19.232  81.603  1.00 27.11           O
ATOM   1926  CB  SER B  21      24.280 -16.435  83.240  1.00 28.24           C
ATOM   1927  OG  SER B  21      23.933 -15.078  83.291  1.00 36.57           O
ATOM   1928  N   CYS B  22      26.326 -18.401  82.014  1.00 27.65           N
ATOM   1929  CA  CYS B  22      26.968 -19.703  82.114  1.00 26.59           C
ATOM   1930  C   CYS B  22      28.019 -19.561  83.197  1.00 30.65           C
ATOM   1931  O   CYS B  22      28.991 -18.820  83.017  1.00 30.74           O
ATOM   1932  CB  CYS B  22      27.585 -20.109  80.775  1.00 32.21           C
ATOM   1933  SG  CYS B  22      28.644 -21.588  80.726  1.00 45.88           S
ATOM   1934  N   ALA B  23      27.810 -20.237  84.320  1.00 32.53           N
ATOM   1935  CA  ALA B  23      28.734 -20.176  85.448  1.00 33.67           C
ATOM   1936  C   ALA B  23      29.715 -21.334  85.323  1.00 33.31           C
ATOM   1937  O   ALA B  23      29.298 -22.496  85.255  1.00 35.42           O
ATOM   1938  CB  ALA B  23      27.979 -20.250  86.773  1.00 29.41           C
ATOM   1939  N   ALA B  24      31.006 -21.022  85.265  1.00 29.83           N
ATOM   1940  CA  ALA B  24      32.036 -22.030  85.063  1.00 30.02           C
ATOM   1941  C   ALA B  24      32.721 -22.366  86.380  1.00 31.80           C
ATOM   1942  O   ALA B  24      32.880 -21.510  87.251  1.00 35.10           O
ATOM   1943  CB  ALA B  24      33.076 -21.550  84.047  1.00 31.68           C
ATOM   1944  N   SER B  25      33.135 -23.620  86.526  1.00 34.64           N
ATOM   1945  CA  SER B  25      33.944 -23.986  87.682  1.00 38.17           C
ATOM   1946  C   SER B  25      34.762 -25.217  87.334  1.00 38.04           C
ATOM   1947  O   SER B  25      34.443 -25.953  86.398  1.00 41.64           O
ATOM   1948  CB  SER B  25      33.085 -24.236  88.930  1.00 35.08           C
ATOM   1949  OG  SER B  25      32.355 -25.445  88.811  1.00 43.58           O
ATOM   1950  N   GLY B  26      35.830 -25.424  88.096  1.00 39.62           N
ATOM   1951  CA  GLY B  26      36.654 -26.603  87.943  1.00 38.32           C
ATOM   1952  C   GLY B  26      37.776 -26.484  86.940  1.00 40.39           C
ATOM   1953  O   GLY B  26      38.316 -27.516  86.526  1.00 41.23           O
ATOM   1954  N   PHE B  27      38.128 -25.267  86.521  1.00 38.39           N
ATOM   1955  CA  PHE B  27      39.237 -25.022  85.602  1.00 37.40           C
ATOM   1956  C   PHE B  27      39.496 -23.522  85.587  1.00 37.39           C
ATOM   1957  O   PHE B  27      38.655 -22.727  86.020  1.00 37.94           O
ATOM   1958  CB  PHE B  27      38.949 -25.543  84.186  1.00 34.28           C
ATOM   1959  CG  PHE B  27      37.852 -24.803  83.475  1.00 36.51           C
ATOM   1960  CD1 PHE B  27      36.517 -25.100  83.720  1.00 38.46           C
ATOM   1961  CD2 PHE B  27      38.153 -23.822  82.547  1.00 33.93           C
ATOM   1962  CE1 PHE B  27      35.500 -24.415  83.062  1.00 35.37           C
```

[1992]

```
ATOM   1963  CE2 PHE B  27      37.145 -23.138  81.882  1.00 34.18           C
ATOM   1964  CZ  PHE B  27      35.817 -23.429  82.141  1.00 29.48           C
ATOM   1965  N   THR B  28      40.671 -23.144  85.089  1.00 35.65           N
ATOM   1966  CA  THR B  28      41.095 -21.741  85.075  1.00 34.49           C
ATOM   1967  C   THR B  28      40.360 -21.013  83.953  1.00 35.39           C
ATOM   1968  O   THR B  28      40.694 -21.168  82.772  1.00 32.23           O
ATOM   1969  CB  THR B  28      42.605 -21.659  84.898  1.00 38.92           C
ATOM   1970  OG1 THR B  28      43.221 -22.648  85.731  1.00 40.25           O
ATOM   1971  CG2 THR B  28      43.115 -20.286  85.283  1.00 38.45           C
ATOM   1972  N   PHE B  29      39.355 -20.207  84.334  1.00 35.70           N
ATOM   1973  CA  PHE B  29      38.402 -19.637  83.377  1.00 32.84           C
ATOM   1974  C   PHE B  29      39.090 -18.758  82.335  1.00 32.37           C
ATOM   1975  O   PHE B  29      38.857 -18.898  81.125  1.00 32.42           O
ATOM   1976  CB  PHE B  29      37.333 -18.841  84.131  1.00 32.04           C
ATOM   1977  CG  PHE B  29      36.188 -18.379  83.265  1.00 29.87           C
ATOM   1978  CD1 PHE B  29      35.414 -19.295  82.567  1.00 30.95           C
ATOM   1979  CD2 PHE B  29      35.880 -17.033  83.162  1.00 30.42           C
ATOM   1980  CE1 PHE B  29      34.353 -18.872  81.773  1.00 32.35           C
ATOM   1981  CE2 PHE B  29      34.822 -16.600  82.379  1.00 30.67           C
ATOM   1982  CZ  PHE B  29      34.056 -17.522  81.677  1.00 26.71           C
ATOM   1983  N   SER B  30      39.932 -17.839  82.782  1.00 28.43           N
ATOM   1984  CA  SER B  30      40.532 -16.873  81.876  1.00 31.99           C
ATOM   1985  C   SER B  30      41.582 -17.478  80.955  1.00 29.62           C
ATOM   1986  O   SER B  30      42.111 -16.752  80.110  1.00 33.15           O
ATOM   1987  CB  SER B  30      41.155 -15.729  82.675  1.00 31.78           C
ATOM   1988  OG  SER B  30      42.110 -16.248  83.575  1.00 34.41           O
ATOM   1989  N   SER B  31      41.905 -18.757  81.083  1.00 29.18           N
ATOM   1990  CA  SER B  31      42.891 -19.385  80.210  1.00 32.53           C
ATOM   1991  C   SER B  31      42.275 -20.031  78.968  1.00 34.98           C
ATOM   1992  O   SER B  31      42.973 -20.768  78.263  1.00 31.63           O
ATOM   1993  CB  SER B  31      43.680 -20.437  80.989  1.00 29.59           C
ATOM   1994  OG  SER B  31      44.438 -19.825  82.006  1.00 37.02           O
ATOM   1995  N   TYR B  32      40.988 -19.792  78.692  1.00 34.20           N
ATOM   1996  CA  TYR B  32      40.301 -20.439  77.582  1.00 30.15           C
ATOM   1997  C   TYR B  32      39.308 -19.485  76.932  1.00 29.42           C
ATOM   1998  O   TYR B  32      38.568 -18.774  77.618  1.00 30.05           O
ATOM   1999  CB  TYR B  32      39.547 -21.697  78.035  1.00 32.38           C
ATOM   2000  CG  TYR B  32      40.414 -22.771  78.655  1.00 38.31           C
ATOM   2001  CD1 TYR B  32      41.071 -23.709  77.861  1.00 36.01           C
ATOM   2002  CD2 TYR B  32      40.550 -22.871  80.039  1.00 33.68           C
ATOM   2003  CE1 TYR B  32      41.864 -24.696  78.425  1.00 37.21           C
ATOM   2004  CE2 TYR B  32      41.334 -23.860  80.614  1.00 33.96           C
ATOM   2005  CZ  TYR B  32      41.994 -24.771  79.802  1.00 41.84           C
ATOM   2006  OH  TYR B  32      42.784 -25.759  80.371  1.00 40.46           O
ATOM   2007  N   ALA B  33      39.265 -19.500  75.607  1.00 32.20           N
ATOM   2008  CA  ALA B  33      38.135 -18.896  74.925  1.00 31.64           C
ATOM   2009  C   ALA B  33      36.863 -19.689  75.229  1.00 30.92           C
ATOM   2010  O   ALA B  33      36.902 -20.868  75.593  1.00 27.16           O
ATOM   2011  CB  ALA B  33      38.384 -18.842  73.417  1.00 30.37           C
ATOM   2012  N   MET B  34      35.719 -19.016  75.101  1.00 31.79           N
ATOM   2013  CA  MET B  34      34.426 -19.646  75.317  1.00 24.74           C
ATOM   2014  C   MET B  34      33.544 -19.371  74.106  1.00 27.47           C
ATOM   2015  O   MET B  34      33.708 -18.365  73.407  1.00 23.79           O
ATOM   2016  CB  MET B  34      33.749 -19.129  76.608  1.00 26.11           C
ATOM   2017  CG  MET B  34      34.577 -19.321  77.899  1.00 20.87           C
ATOM   2018  SD  MET B  34      34.567 -21.013  78.569  1.00 32.26           S
ATOM   2019  CE  MET B  34      32.810 -21.275  78.854  1.00 31.15           C
ATOM   2020  N   SER B  35      32.623 -20.291  73.848  1.00 24.16           N
ATOM   2021  CA  SER B  35      31.706 -20.174  72.730  1.00 23.11           C
ATOM   2022  C   SER B  35      30.267 -20.459  73.184  1.00 26.37           C
ATOM   2023  O   SER B  35      30.029 -21.196  74.154  1.00 24.44           O
ATOM   2024  CB  SER B  35      32.191 -21.121  71.603  1.00 24.96           C
ATOM   2025  OG  SER B  35      31.234 -21.237  70.574  1.00 34.71           O
ATOM   2026  N   TRP B  36      29.299 -19.861  72.489  1.00 22.53           N
ATOM   2027  CA  TRP B  36      27.909 -20.294  72.559  1.00 21.23           C
ATOM   2028  C   TRP B  36      27.535 -21.024  71.277  1.00 22.76           C
ATOM   2029  O   TRP B  36      27.871 -20.577  70.179  1.00 22.43           O
ATOM   2030  CB  TRP B  36      26.955 -19.123  72.749  1.00 20.95           C
```

[1993]

```
ATOM   2031  CG  TRP B  36      26.981 -18.477  74.117  1.00 20.41           C
ATOM   2032  CD1 TRP B  36      27.658 -17.347  74.478  1.00 22.87           C
ATOM   2033  CD2 TRP B  36      26.245 -18.890  75.267  1.00 21.88           C
ATOM   2034  NE1 TRP B  36      27.405 -17.040  75.805  1.00 24.86           N
ATOM   2035  CE2 TRP B  36      26.542 -17.973  76.310  1.00 25.29           C
ATOM   2036  CE3 TRP B  36      25.372 -19.951  75.529  1.00 20.53           C
ATOM   2037  CZ2 TRP B  36      25.996 -18.091  77.585  1.00 22.57           C
ATOM   2038  CZ3 TRP B  36      24.836 -20.068  76.798  1.00 24.58           C
ATOM   2039  CH2 TRP B  36      25.143 -19.136  77.809  1.00 22.14           C
ATOM   2040  N   VAL B  37      26.823 -22.138  71.427  1.00 21.38           N
ATOM   2041  CA  VAL B  37      26.352 -22.957  70.320  1.00 23.10           C
ATOM   2042  C   VAL B  37      24.894 -23.273  70.601  1.00 27.46           C
ATOM   2043  O   VAL B  37      24.540 -23.603  71.739  1.00 27.82           O
ATOM   2044  CB  VAL B  37      27.167 -24.258  70.179  1.00 25.27           C
ATOM   2045  CG1 VAL B  37      26.560 -25.185  69.089  1.00 26.53           C
ATOM   2046  CG2 VAL B  37      28.652 -23.957  69.932  1.00 20.38           C
ATOM   2047  N   ARG B  38      24.048 -23.170  69.577  1.00 24.91           N
ATOM   2048  CA  ARG B  38      22.619 -23.375  69.743  1.00 21.91           C
ATOM   2049  C   ARG B  38      22.109 -24.467  68.806  1.00 26.29           C
ATOM   2050  O   ARG B  38      22.759 -24.829  67.823  1.00 24.50           O
ATOM   2051  CB  ARG B  38      21.854 -22.069  69.517  1.00 19.39           C
ATOM   2052  CG  ARG B  38      21.871 -21.585  68.103  1.00 20.95           C
ATOM   2053  CD  ARG B  38      21.056 -20.327  67.981  1.00 21.15           C
ATOM   2054  NE  ARG B  38      21.027 -19.834  66.610  1.00 22.22           N
ATOM   2055  CZ  ARG B  38      20.565 -18.644  66.257  1.00 23.58           C
ATOM   2056  NH1 ARG B  38      20.089 -17.800  67.179  1.00 27.16           N
ATOM   2057  NH2 ARG B  38      20.564 -18.304  64.987  1.00 24.49           N
ATOM   2058  N   GLN B  39      20.926 -25.000  69.138  1.00 24.13           N
ATOM   2059  CA  GLN B  39      20.297 -26.082  68.380  1.00 25.49           C
ATOM   2060  C   GLN B  39      18.788 -25.861  68.367  1.00 27.36           C
ATOM   2061  O   GLN B  39      18.111 -26.107  69.372  1.00 23.49           O
ATOM   2062  CB  GLN B  39      20.629 -27.431  68.988  1.00 28.14           C
ATOM   2063  CG  GLN B  39      20.056 -28.598  68.211  1.00 27.56           C
ATOM   2064  CD  GLN B  39      20.586 -29.897  68.741  1.00 30.62           C
ATOM   2065  OE1 GLN B  39      20.744 -30.059  69.949  1.00 28.42           O
ATOM   2066  NE2 GLN B  39      20.914 -30.822  67.839  1.00 30.46           N
ATOM   2067  N   ALA B  40      18.277 -25.395  67.233  1.00 26.42           N
ATOM   2068  CA  ALA B  40      16.850 -25.204  67.047  1.00 29.70           C
ATOM   2069  C   ALA B  40      16.121 -26.547  67.101  1.00 35.08           C
ATOM   2070  O   ALA B  40      16.733 -27.605  66.909  1.00 35.35           O
ATOM   2071  CB  ALA B  40      16.592 -24.503  65.709  1.00 29.18           C
ATOM   2072  N   PRO B  41      14.805 -26.533  67.388  1.00 34.76           N
ATOM   2073  CA  PRO B  41      14.038 -27.792  67.439  1.00 37.14           C
ATOM   2074  C   PRO B  41      14.240 -28.697  66.223  1.00 39.78           C
ATOM   2075  O   PRO B  41      14.074 -28.287  65.065  1.00 33.56           O
ATOM   2076  CB  PRO B  41      12.586 -27.304  67.550  1.00 36.50           C
ATOM   2077  CG  PRO B  41      12.702 -26.020  68.299  1.00 38.57           C
ATOM   2078  CD  PRO B  41      14.007 -25.384  67.862  1.00 37.50           C
ATOM   2079  N   GLY B  42      14.657 -29.932  66.491  1.00 40.27           N
ATOM   2080  CA  GLY B  42      14.853 -30.900  65.430  1.00 42.27           C
ATOM   2081  C   GLY B  42      15.893 -30.535  64.398  1.00 45.86           C
ATOM   2082  O   GLY B  42      15.826 -31.041  63.272  1.00 42.88           O
ATOM   2083  N   CYS B  43      16.845 -29.659  64.728  1.00 37.12           N
ATOM   2084  CA  CYS B  43      17.888 -29.266  63.782  1.00 36.14           C
ATOM   2085  C   CYS B  43      19.260 -29.685  64.293  1.00 28.93           C
ATOM   2086  O   CYS B  43      19.397 -30.358  65.316  1.00 29.39           O
ATOM   2087  CB  CYS B  43      17.875 -27.760  63.509  1.00 35.31           C
ATOM   2088  SG  CYS B  43      16.341 -27.144  62.822  1.00 51.14           S
ATOM   2089  N   GLY B  44      20.280 -29.289  63.540  1.00 29.17           N
ATOM   2090  CA  GLY B  44      21.656 -29.528  63.911  1.00 33.96           C
ATOM   2091  C   GLY B  44      22.227 -28.361  64.694  1.00 28.94           C
ATOM   2092  O   GLY B  44      21.542 -27.394  65.027  1.00 31.89           O
ATOM   2093  N   LEU B  45      23.523 -28.449  64.956  1.00 30.80           N
ATOM   2094  CA  LEU B  45      24.216 -27.472  65.779  1.00 30.28           C
ATOM   2095  C   LEU B  45      24.634 -26.259  64.952  1.00 29.31           C
ATOM   2096  O   LEU B  45      25.124 -26.389  63.824  1.00 27.41           O
ATOM   2097  CB  LEU B  45      25.433 -28.139  66.414  1.00 28.41           C
ATOM   2098  CG  LEU B  45      25.025 -29.399  67.182  1.00 29.19           C
```

[1994]

```
ATOM   2099  CD1 LEU B  45      26.240 -30.246  67.510  1.00 29.47           C
ATOM   2100  CD2 LEU B  45      24.285 -29.010  68.469  1.00 31.87           C
ATOM   2101  N   GLU B  46      24.446 -25.070  65.521  1.00 25.72           N
ATOM   2102  CA  GLU B  46      24.810 -23.826  64.855  1.00 25.28           C
ATOM   2103  C   GLU B  46      25.653 -22.999  65.815  1.00 30.63           C
ATOM   2104  O   GLU B  46      25.198 -22.648  66.909  1.00 24.68           O
ATOM   2105  CB  GLU B  46      23.567 -23.043  64.402  1.00 27.22           C
ATOM   2106  CG  GLU B  46      23.896 -21.735  63.668  1.00 32.37           C
ATOM   2107  CD  GLU B  46      22.671 -20.899  63.251  1.00 36.05           C
ATOM   2108  OE1 GLU B  46      21.653 -20.864  63.992  1.00 34.93           O
ATOM   2109  OE2 GLU B  46      22.744 -20.245  62.181  1.00 34.05           O
ATOM   2110  N   TRP B  47      26.882 -22.698  65.408  1.00 27.60           N
ATOM   2111  CA  TRP B  47      27.745 -21.853  66.210  1.00 26.19           C
ATOM   2112  C   TRP B  47      27.201 -20.425  66.227  1.00 26.97           C
ATOM   2113  O   TRP B  47      26.790 -19.885  65.198  1.00 25.05           O
ATOM   2114  CB  TRP B  47      29.177 -21.912  65.658  1.00 26.45           C
ATOM   2115  CG  TRP B  47      30.137 -20.981  66.338  1.00 26.70           C
ATOM   2116  CD1 TRP B  47      30.852 -21.227  67.474  1.00 26.04           C
ATOM   2117  CD2 TRP B  47      30.481 -19.654  65.927  1.00 26.65           C
ATOM   2118  NE1 TRP B  47      31.611 -20.136  67.802  1.00 29.34           N
ATOM   2119  CE2 TRP B  47      31.407 -19.154  66.868  1.00 28.93           C
ATOM   2120  CE3 TRP B  47      30.100 -18.840  64.852  1.00 26.47           C
ATOM   2121  CZ2 TRP B  47      31.967 -17.872  66.770  1.00 22.77           C
ATOM   2122  CZ3 TRP B  47      30.652 -17.562  64.758  1.00 29.20           C
ATOM   2123  CH2 TRP B  47      31.580 -17.094  65.714  1.00 26.48           C
ATOM   2124  N   VAL B  48      27.167 -19.822  67.409  1.00 23.34           N
ATOM   2125  CA  VAL B  48      26.586 -18.501  67.606  1.00 22.48           C
ATOM   2126  C   VAL B  48      27.659 -17.438  67.809  1.00 26.92           C
ATOM   2127  O   VAL B  48      27.683 -16.420  67.112  1.00 23.21           O
ATOM   2128  CB  VAL B  48      25.607 -18.505  68.801  1.00 23.42           C
ATOM   2129  CG1 VAL B  48      25.064 -17.103  69.042  1.00 22.00           C
ATOM   2130  CG2 VAL B  48      24.507 -19.470  68.551  1.00 24.45           C
ATOM   2131  N   SER B  49      28.543 -17.646  68.782  1.00 24.63           N
ATOM   2132  CA  SER B  49      29.425 -16.567  69.179  1.00 23.17           C
ATOM   2133  C   SER B  49      30.612 -17.119  69.964  1.00 23.43           C
ATOM   2134  O   SER B  49      30.524 -18.188  70.573  1.00 22.68           O
ATOM   2135  CB  SER B  49      28.646 -15.540  70.007  1.00 24.76           C
ATOM   2136  OG  SER B  49      29.502 -14.510  70.450  1.00 28.03           O
ATOM   2137  N   ALA B  50      31.726 -16.377  69.947  1.00 22.33           N
ATOM   2138  CA  ALA B  50      32.909 -16.749  70.715  1.00 21.94           C
ATOM   2139  C   ALA B  50      33.575 -15.511  71.295  1.00 22.93           C
ATOM   2140  O   ALA B  50      33.483 -14.415  70.738  1.00 24.08           O
ATOM   2141  CB  ALA B  50      33.925 -17.516  69.873  1.00 20.99           C
ATOM   2142  N   ILE B  51      34.272 -15.698  72.408  1.00 22.64           N
ATOM   2143  CA  ILE B  51      35.003 -14.612  73.050  1.00 23.73           C
ATOM   2144  C   ILE B  51      36.361 -15.129  73.513  1.00 22.95           C
ATOM   2145  O   ILE B  51      36.471 -16.250  74.024  1.00 25.79           O
ATOM   2146  CB  ILE B  51      34.206 -14.024  74.232  1.00 21.72           C
ATOM   2147  CG1 ILE B  51      34.914 -12.811  74.812  1.00 23.70           C
ATOM   2148  CG2 ILE B  51      34.039 -15.041  75.320  1.00 23.51           C
ATOM   2149  CD1 ILE B  51      34.037 -12.043  75.786  1.00 27.00           C
ATOM   2150  N   SER B  52      37.394 -14.319  73.327  1.00 21.96           N
ATOM   2151  CA  SER B  52      38.737 -14.699  73.762  1.00 27.66           C
ATOM   2152  C   SER B  52      38.822 -14.831  75.284  1.00 28.36           C
ATOM   2153  O   SER B  52      37.971 -14.338  76.033  1.00 26.93           O
ATOM   2154  CB  SER B  52      39.763 -13.669  73.296  1.00 26.90           C
ATOM   2155  OG  SER B  52      39.572 -12.448  73.968  1.00 28.85           O
ATOM   2156  N   GLY B  53      39.880 -15.507  75.738  1.00 30.23           N
ATOM   2157  CA  GLY B  53      40.052 -15.731  77.165  1.00 28.47           C
ATOM   2158  C   GLY B  53      40.060 -14.447  77.972  1.00 31.89           C
ATOM   2159  O   GLY B  53      39.577 -14.414  79.108  1.00 31.85           O
ATOM   2160  N   SER B  54      40.595 -13.374  77.404  1.00 33.78           N
ATOM   2161  CA  SER B  54      40.622 -12.113  78.126  1.00 33.30           C
ATOM   2162  C   SER B  54      39.317 -11.348  77.982  1.00 38.63           C
ATOM   2163  O   SER B  54      38.987 -10.529  78.848  1.00 31.62           O
ATOM   2164  CB  SER B  54      41.766 -11.244  77.616  1.00 32.62           C
ATOM   2165  OG  SER B  54      41.444 -10.761  76.317  1.00 37.87           O
ATOM   2166  N   GLY B  55      38.573 -11.596  76.901  1.00 29.30           N
```

[1995]

```
ATOM   2167  CA  GLY B  55      37.420 -10.793  76.572  1.00 24.85           C
ATOM   2168  C   GLY B  55      37.671  -9.691  75.567  1.00 26.26           C
ATOM   2169  O   GLY B  55      36.708  -9.035  75.145  1.00 28.20           O
ATOM   2170  N   GLY B  56      38.921  -9.485  75.140  1.00 28.36           N
ATOM   2171  CA  GLY B  56      39.224  -8.392  74.226  1.00 29.21           C
ATOM   2172  C   GLY B  56      38.774  -8.608  72.790  1.00 32.41           C
ATOM   2173  O   GLY B  56      38.596  -7.629  72.058  1.00 37.55           O
ATOM   2174  N   SER B  57      38.584  -9.856  72.371  1.00 27.93           N
ATOM   2175  CA  SER B  57      38.144 -10.183  71.016  1.00 30.14           C
ATOM   2176  C   SER B  57      36.859 -10.998  71.064  1.00 25.59           C
ATOM   2177  O   SER B  57      36.749 -11.949  71.846  1.00 26.16           O
ATOM   2178  CB  SER B  57      39.215 -10.981  70.248  1.00 23.88           C
ATOM   2179  OG  SER B  57      40.378 -10.209  70.021  1.00 30.57           O
ATOM   2180  N   THR B  58      35.906 -10.650  70.197  1.00 24.32           N
ATOM   2181  CA  THR B  58      34.619 -11.326  70.123  1.00 22.16           C
ATOM   2182  C   THR B  58      34.282 -11.630  68.667  1.00 25.11           C
ATOM   2183  O   THR B  58      34.688 -10.900  67.762  1.00 24.70           O
ATOM   2184  CB  THR B  58      33.507 -10.477  70.738  1.00 20.82           C
ATOM   2185  OG1 THR B  58      33.461  -9.202  70.079  1.00 23.86           O
ATOM   2186  CG2 THR B  58      33.721 -10.273  72.220  1.00 25.36           C
ATOM   2187  N   TYR B  59      33.536 -12.715  68.445  1.00 20.71           N
ATOM   2188  CA  TYR B  59      33.133 -13.116  67.099  1.00 21.03           C
ATOM   2189  C   TYR B  59      31.679 -13.564  67.101  1.00 23.41           C
ATOM   2190  O   TYR B  59      31.182 -14.086  68.100  1.00 23.93           O
ATOM   2191  CB  TYR B  59      34.011 -14.236  66.561  1.00 23.45           C
ATOM   2192  CG  TYR B  59      35.481 -13.935  66.649  1.00 28.60           C
ATOM   2193  CD1 TYR B  59      36.209 -14.272  67.774  1.00 28.07           C
ATOM   2194  CD2 TYR B  59      36.135 -13.300  65.612  1.00 28.42           C
ATOM   2195  CE1 TYR B  59      37.560 -13.988  67.861  1.00 32.05           C
ATOM   2196  CE2 TYR B  59      37.475 -13.011  65.689  1.00 33.43           C
ATOM   2197  CZ  TYR B  59      38.186 -13.355  66.817  1.00 33.20           C
ATOM   2198  OH  TYR B  59      39.530 -13.064  66.892  1.00 41.73           O
ATOM   2199  N   TYR B  60      30.999 -13.354  65.975  1.00 21.84           N
ATOM   2200  CA  TYR B  60      29.571 -13.646  65.876  1.00 27.23           C
ATOM   2201  C   TYR B  60      29.219 -14.234  64.518  1.00 26.89           C
ATOM   2202  O   TYR B  60      29.714 -13.776  63.486  1.00 26.09           O
ATOM   2203  CB  TYR B  60      28.717 -12.391  66.072  1.00 26.89           C
ATOM   2204  CG  TYR B  60      28.951 -11.680  67.376  1.00 28.24           C
ATOM   2205  CD1 TYR B  60      28.253 -12.038  68.519  1.00 26.57           C
ATOM   2206  CD2 TYR B  60      29.862 -10.635  67.463  1.00 27.87           C
ATOM   2207  CE1 TYR B  60      28.469 -11.381  69.726  1.00 23.56           C
ATOM   2208  CE2 TYR B  60      30.069  -9.961  68.663  1.00 27.10           C
ATOM   2209  CZ  TYR B  60      29.368 -10.341  69.783  1.00 23.75           C
ATOM   2210  OH  TYR B  60      29.572  -9.678  70.965  1.00 25.86           O
ATOM   2211  N   ALA B  61      28.309 -15.200  64.520  1.00 27.86           N
ATOM   2212  CA  ALA B  61      27.695 -15.611  63.267  1.00 29.75           C
ATOM   2213  C   ALA B  61      26.922 -14.441  62.674  1.00 30.87           C
ATOM   2214  O   ALA B  61      26.448 -13.552  63.392  1.00 26.70           O
ATOM   2215  CB  ALA B  61      26.773 -16.812  63.489  1.00 29.48           C
ATOM   2216  N   ASP B  62      26.835 -14.422  61.343  1.00 30.73           N
ATOM   2217  CA  ASP B  62      26.174 -13.311  60.653  1.00 38.31           C
ATOM   2218  C   ASP B  62      24.693 -13.169  61.008  1.00 33.02           C
ATOM   2219  O   ASP B  62      24.141 -12.075  60.858  1.00 32.64           O
ATOM   2220  CB  ASP B  62      26.318 -13.463  59.135  1.00 37.14           C
ATOM   2221  CG  ASP B  62      27.707 -13.124  58.651  1.00 49.38           C
ATOM   2222  OD1 ASP B  62      28.007 -11.915  58.516  1.00 54.27           O
ATOM   2223  OD2 ASP B  62      28.510 -14.059  58.433  1.00 60.44           O
ATOM   2224  N   SER B  63      24.032 -14.240  61.439  1.00 29.07           N
ATOM   2225  CA  SER B  63      22.610 -14.157  61.735  1.00 32.21           C
ATOM   2226  C   SER B  63      22.307 -13.443  63.051  1.00 36.68           C
ATOM   2227  O   SER B  63      21.145 -13.089  63.289  1.00 32.78           O
ATOM   2228  CB  SER B  63      22.001 -15.556  61.770  1.00 33.78           C
ATOM   2229  OG  SER B  63      22.575 -16.319  62.813  1.00 33.04           O
ATOM   2230  N   VAL B  64      23.302 -13.235  63.914  1.00 31.86           N
ATOM   2231  CA  VAL B  64      23.085 -12.580  65.197  1.00 28.62           C
ATOM   2232  C   VAL B  64      23.918 -11.323  65.381  1.00 29.31           C
ATOM   2233  O   VAL B  64      23.800 -10.676  66.428  1.00 30.04           O
ATOM   2234  CB  VAL B  64      23.323 -13.549  66.373  1.00 24.86           C
```

[1996]

```
ATOM   2235  CG1 VAL B  64      22.475 -14.797  66.205  1.00 24.07           C
ATOM   2236  CG2 VAL B  64      24.816 -13.902  66.500  1.00 23.36           C
ATOM   2237  N   LYS B  65      24.716 -10.924  64.387  1.00 31.92           N
ATOM   2238  CA  LYS B  65      25.510  -9.704  64.512  1.00 34.28           C
ATOM   2239  C   LYS B  65      24.623  -8.506  64.804  1.00 36.35           C
ATOM   2240  O   LYS B  65      23.540  -8.362  64.233  1.00 36.03           O
ATOM   2241  CB  LYS B  65      26.308  -9.415  63.239  1.00 34.59           C
ATOM   2242  CG  LYS B  65      27.481 -10.323  63.006  1.00 43.00           C
ATOM   2243  CD  LYS B  65      28.282  -9.878  61.791  1.00 42.41           C
ATOM   2244  CE  LYS B  65      29.118 -11.029  61.215  1.00 47.69           C
ATOM   2245  NZ  LYS B  65      30.195 -11.541  62.100  1.00 45.55           N
ATOM   2246  N   GLY B  66      25.103  -7.632  65.693  1.00 31.60           N
ATOM   2247  CA  GLY B  66      24.399  -6.422  66.033  1.00 35.06           C
ATOM   2248  C   GLY B  66      23.226  -6.593  66.970  1.00 36.91           C
ATOM   2249  O   GLY B  66      22.767  -5.602  67.546  1.00 35.59           O
ATOM   2250  N   ARG B  67      22.696  -7.806  67.109  1.00 35.94           N
ATOM   2251  CA  ARG B  67      21.645  -8.109  68.072  1.00 30.88           C
ATOM   2252  C   ARG B  67      22.172  -8.781  69.325  1.00 28.64           C
ATOM   2253  O   ARG B  67      21.646  -8.546  70.412  1.00 28.98           O
ATOM   2254  CB  ARG B  67      20.586  -9.019  67.438  1.00 29.56           C
ATOM   2255  CG  ARG B  67      20.058  -8.540  66.118  1.00 28.25           C
ATOM   2256  CD  ARG B  67      18.857  -9.340  65.716  1.00 24.40           C
ATOM   2257  NE  ARG B  67      19.166 -10.669  65.190  1.00 27.08           N
ATOM   2258  CZ  ARG B  67      18.760 -11.811  65.740  1.00 29.02           C
ATOM   2259  NH1 ARG B  67      18.025 -11.793  66.846  1.00 29.20           N
ATOM   2260  NH2 ARG B  67      19.061 -12.974  65.166  1.00 28.38           N
ATOM   2261  N   PHE B  68      23.168  -9.652  69.193  1.00 26.75           N
ATOM   2262  CA  PHE B  68      23.706 -10.398  70.321  1.00 25.82           C
ATOM   2263  C   PHE B  68      25.045  -9.808  70.751  1.00 26.63           C
ATOM   2264  O   PHE B  68      25.827  -9.342  69.920  1.00 29.21           O
ATOM   2265  CB  PHE B  68      23.885 -11.880  69.977  1.00 25.79           C
ATOM   2266  CG  PHE B  68      22.587 -12.644  69.776  1.00 26.65           C
ATOM   2267  CD1 PHE B  68      21.365 -11.984  69.640  1.00 26.26           C
ATOM   2268  CD2 PHE B  68      22.602 -14.031  69.738  1.00 25.56           C
ATOM   2269  CE1 PHE B  68      20.189 -12.685  69.450  1.00 28.55           C
ATOM   2270  CE2 PHE B  68      21.422 -14.758  69.546  1.00 27.12           C
ATOM   2271  CZ  PHE B  68      20.211 -14.083  69.407  1.00 26.97           C
ATOM   2272  N   THR B  69      25.314  -9.850  72.061  1.00 22.42           N
ATOM   2273  CA  THR B  69      26.598  -9.418  72.612  1.00 23.40           C
ATOM   2274  C   THR B  69      27.130 -10.501  73.532  1.00 24.67           C
ATOM   2275  O   THR B  69      26.460 -10.875  74.501  1.00 25.54           O
ATOM   2276  CB  THR B  69      26.480  -8.104  73.388  1.00 28.86           C
ATOM   2277  OG1 THR B  69      25.971  -7.082  72.523  1.00 29.56           O
ATOM   2278  CG2 THR B  69      27.865  -7.683  73.908  1.00 31.51           C
ATOM   2279  N   ILE B  70      28.309 -11.019  73.227  1.00 21.26           N
ATOM   2280  CA  ILE B  70      28.948 -11.972  74.121  1.00 22.87           C
ATOM   2281  C   ILE B  70      29.887 -11.198  75.037  1.00 25.63           C
ATOM   2282  O   ILE B  70      30.489 -10.193  74.638  1.00 25.59           O
ATOM   2283  CB  ILE B  70      29.679 -13.071  73.330  1.00 23.21           C
ATOM   2284  CG1 ILE B  70      30.071 -14.231  74.236  1.00 22.34           C
ATOM   2285  CG2 ILE B  70      30.921 -12.528  72.659  1.00 20.08           C
ATOM   2286  CD1 ILE B  70      30.710 -15.388  73.440  1.00 21.65           C
ATOM   2287  N   SER B  71      29.962 -11.620  76.292  1.00 22.85           N
ATOM   2288  CA  SER B  71      30.859 -10.984  77.241  1.00 24.44           C
ATOM   2289  C   SER B  71      31.215 -11.998  78.316  1.00 26.51           C
ATOM   2290  O   SER B  71      30.634 -13.084  78.391  1.00 26.02           O
ATOM   2291  CB  SER B  71      30.231  -9.734  77.862  1.00 30.47           C
ATOM   2292  OG  SER B  71      29.095 -10.067  78.642  1.00 29.36           O
ATOM   2293  N   ARG B  72      32.187 -11.636  79.151  1.00 21.83           N
ATOM   2294  CA  ARG B  72      32.619 -12.526  80.212  1.00 23.96           C
ATOM   2295  C   ARG B  72      33.111 -11.700  81.399  1.00 27.32           C
ATOM   2296  O   ARG B  72      33.589 -10.570  81.245  1.00 21.44           O
ATOM   2297  CB  ARG B  72      33.734 -13.479  79.731  1.00 25.56           C
ATOM   2298  CG  ARG B  72      35.034 -12.786  79.323  1.00 24.17           C
ATOM   2299  CD  ARG B  72      36.025 -13.752  78.623  1.00 25.00           C
ATOM   2300  NE  ARG B  72      36.370 -14.881  79.480  1.00 22.55           N
ATOM   2301  CZ  ARG B  72      36.751 -16.074  79.046  1.00 24.14           C
ATOM   2302  NH1 ARG B  72      36.868 -16.320  77.741  1.00 22.11           N
```

[1997]

```
ATOM   2303  NH2 ARG B  72      37.005 -17.031  79.924  1.00 26.10           N
ATOM   2304  N   ASP B  73      32.995 -12.284  82.584  1.00 27.87           N
ATOM   2305  CA  ASP B  73      33.544 -11.697  83.800  1.00 26.24           C
ATOM   2306  C   ASP B  73      34.551 -12.703  84.342  1.00 27.03           C
ATOM   2307  O   ASP B  73      34.173 -13.722  84.936  1.00 22.95           O
ATOM   2308  CB  ASP B  73      32.463 -11.376  84.827  1.00 29.31           C
ATOM   2309  CG  ASP B  73      33.006 -10.560  85.992  1.00 37.44           C
ATOM   2310  OD1 ASP B  73      34.243 -10.600  86.221  1.00 36.24           O
ATOM   2311  OD2 ASP B  73      32.202  -9.875  86.666  1.00 34.14           O
ATOM   2312  N   ASN B  74      35.839 -12.423  84.128  1.00 29.78           N
ATOM   2313  CA  ASN B  74      36.851 -13.357  84.593  1.00 31.83           C
ATOM   2314  C   ASN B  74      37.000 -13.341  86.107  1.00 34.70           C
ATOM   2315  O   ASN B  74      37.486 -14.328  86.666  1.00 37.74           O
ATOM   2316  CB  ASN B  74      38.178 -13.081  83.901  1.00 30.50           C
ATOM   2317  CG  ASN B  74      38.113 -13.427  82.422  1.00 34.19           C
ATOM   2318  OD1 ASN B  74      37.275 -14.236  82.007  1.00 26.83           O
ATOM   2319  ND2 ASN B  74      38.986 -12.825  81.626  1.00 34.50           N
ATOM   2320  N   SER B  75      36.581 -12.268  86.793  1.00 31.05           N
ATOM   2321  CA  SER B  75      36.665 -12.314  88.251  1.00 31.61           C
ATOM   2322  C   SER B  75      35.574 -13.187  88.846  1.00 28.36           C
ATOM   2323  O   SER B  75      35.806 -13.838  89.871  1.00 28.62           O
ATOM   2324  CB  SER B  75      36.642 -10.900  88.865  1.00 32.68           C
ATOM   2325  OG  SER B  75      35.414 -10.208  88.730  1.00 36.21           O
ATOM   2326  N   LYS B  76      34.410 -13.256  88.203  1.00 29.83           N
ATOM   2327  CA  LYS B  76      33.319 -14.103  88.657  1.00 30.33           C
ATOM   2328  C   LYS B  76      33.226 -15.450  87.929  1.00 30.02           C
ATOM   2329  O   LYS B  76      32.361 -16.257  88.272  1.00 27.30           O
ATOM   2330  CB  LYS B  76      31.987 -13.370  88.508  1.00 33.55           C
ATOM   2331  CG  LYS B  76      31.664 -12.418  89.620  1.00 35.79           C
ATOM   2332  CD  LYS B  76      30.353 -11.702  89.347  1.00 41.16           C
ATOM   2333  CE  LYS B  76      30.342 -10.356  90.037  1.00 44.04           C
ATOM   2334  NZ  LYS B  76      31.508  -9.525  89.585  1.00 46.13           N
ATOM   2335  N   ASN B  77      34.075 -15.729  86.944  1.00 27.17           N
ATOM   2336  CA  ASN B  77      34.007 -17.021  86.246  1.00 30.94           C
ATOM   2337  C   ASN B  77      32.641 -17.221  85.583  1.00 29.16           C
ATOM   2338  O   ASN B  77      32.010 -18.277  85.703  1.00 28.78           O
ATOM   2339  CB  ASN B  77      34.306 -18.187  87.201  1.00 29.73           C
ATOM   2340  CG  ASN B  77      35.776 -18.400  87.431  1.00 34.17           C
ATOM   2341  OD1 ASN B  77      36.614 -17.614  86.979  1.00 34.13           O
ATOM   2342  ND2 ASN B  77      36.109 -19.485  88.122  1.00 33.51           N
ATOM   2343  N   THR B  78      32.186 -16.202  84.859  1.00 28.04           N
ATOM   2344  CA  THR B  78      30.851 -16.243  84.282  1.00 28.09           C
ATOM   2345  C   THR B  78      30.885 -15.758  82.845  1.00 24.79           C
ATOM   2346  O   THR B  78      31.607 -14.805  82.526  1.00 22.91           O
ATOM   2347  CB  THR B  78      29.887 -15.399  85.123  1.00 27.81           C
ATOM   2348  OG1 THR B  78      29.857 -15.951  86.442  1.00 31.35           O
ATOM   2349  CG2 THR B  78      28.467 -15.475  84.547  1.00 32.30           C
ATOM   2350  N   LEU B  79      30.119 -16.443  81.988  1.00 26.10           N
ATOM   2351  CA  LEU B  79      29.943 -16.107  80.580  1.00 24.09           C
ATOM   2352  C   LEU B  79      28.518 -15.633  80.308  1.00 23.00           C
ATOM   2353  O   LEU B  79      27.555 -16.231  80.794  1.00 22.52           O
ATOM   2354  CB  LEU B  79      30.237 -17.330  79.694  1.00 26.63           C
ATOM   2355  CG  LEU B  79      30.037 -17.164  78.186  1.00 23.55           C
ATOM   2356  CD1 LEU B  79      31.131 -16.257  77.616  1.00 24.08           C
ATOM   2357  CD2 LEU B  79      30.024 -18.532  77.461  1.00 23.80           C
ATOM   2358  N   TYR B  80      28.382 -14.598  79.481  1.00 22.73           N
ATOM   2359  CA  TYR B  80      27.094 -13.999  79.184  1.00 21.78           C
ATOM   2360  C   TYR B  80      26.811 -13.973  77.684  1.00 26.51           C
ATOM   2361  O   TYR B  80      27.725 -13.852  76.856  1.00 24.79           O
ATOM   2362  CB  TYR B  80      27.034 -12.560  79.717  1.00 27.16           C
ATOM   2363  CG  TYR B  80      27.332 -12.441  81.202  1.00 25.19           C
ATOM   2364  CD1 TYR B  80      26.352 -12.713  82.145  1.00 28.77           C
ATOM   2365  CD2 TYR B  80      28.583 -12.035  81.653  1.00 27.09           C
ATOM   2366  CE1 TYR B  80      26.600 -12.599  83.512  1.00 30.23           C
ATOM   2367  CE2 TYR B  80      28.848 -11.907  83.030  1.00 29.87           C
ATOM   2368  CZ  TYR B  80      27.849 -12.188  83.947  1.00 30.11           C
ATOM   2369  OH  TYR B  80      28.090 -12.084  85.298  1.00 38.01           O
ATOM   2370  N   LEU B  81      25.524 -14.052  77.345  1.00 22.18           N
```

[1998]

```
ATOM   2371  CA  LEU B  81      25.033 -13.733  76.008  1.00 22.64           C
ATOM   2372  C   LEU B  81      23.842 -12.794  76.161  1.00 24.15           C
ATOM   2373  O   LEU B  81      22.776 -13.203  76.626  1.00 22.35           O
ATOM   2374  CB  LEU B  81      24.636 -14.994  75.239  1.00 19.77           C
ATOM   2375  CG  LEU B  81      24.352 -14.799  73.754  1.00 24.22           C
ATOM   2376  CD1 LEU B  81      25.573 -14.227  73.045  1.00 20.48           C
ATOM   2377  CD2 LEU B  81      23.952 -16.119  73.142  1.00 20.65           C
ATOM   2378  N   GLN B  82      24.024 -11.539  75.788  1.00 24.74           N
ATOM   2379  CA  GLN B  82      22.935 -10.576  75.745  1.00 26.19           C
ATOM   2380  C   GLN B  82      22.280 -10.662  74.369  1.00 25.16           C
ATOM   2381  O   GLN B  82      22.939 -10.435  73.350  1.00 22.18           O
ATOM   2382  CB  GLN B  82      23.474  -9.167  76.019  1.00 26.58           C
ATOM   2383  CG  GLN B  82      22.437  -8.050  76.014  1.00 25.27           C
ATOM   2384  CD  GLN B  82      21.385  -8.249  77.079  1.00 31.10           C
ATOM   2385  OE1 GLN B  82      21.700  -8.611  78.219  1.00 28.48           O
ATOM   2386  NE2 GLN B  82      20.124  -8.020  76.720  1.00 27.89           N
ATOM   2387  N   MET B  83      20.988 -10.978  74.340  1.00 25.21           N
ATOM   2388  CA  MET B  83      20.260 -11.175  73.092  1.00 28.41           C
ATOM   2389  C   MET B  83      19.179 -10.117  73.004  1.00 29.87           C
ATOM   2390  O   MET B  83      18.195 -10.165  73.749  1.00 28.72           O
ATOM   2391  CB  MET B  83      19.653 -12.574  73.022  1.00 29.90           C
ATOM   2392  CG  MET B  83      20.632 -13.667  73.371  1.00 28.23           C
ATOM   2393  SD  MET B  83      19.741 -15.155  73.825  1.00 40.14           S
ATOM   2394  CE  MET B  83      19.473 -15.830  72.213  1.00 30.62           C
ATOM   2395  N   ASN B  84      19.359  -9.166  72.101  1.00 28.77           N
ATOM   2396  CA  ASN B  84      18.363  -8.133  71.888  1.00 28.88           C
ATOM   2397  C   ASN B  84      17.601  -8.414  70.608  1.00 30.52           C
ATOM   2398  O   ASN B  84      18.037  -9.198  69.750  1.00 29.32           O
ATOM   2399  CB  ASN B  84      19.010  -6.747  71.821  1.00 29.84           C
ATOM   2400  CG  ASN B  84      19.687  -6.370  73.115  1.00 31.74           C
ATOM   2401  OD1 ASN B  84      19.218  -6.737  74.182  1.00 32.03           O
ATOM   2402  ND2 ASN B  84      20.809  -5.660  73.030  1.00 41.32           N
ATOM   2403  N   SER B  85      16.443  -7.775  70.504  1.00 27.67           N
ATOM   2404  CA  SER B  85      15.592  -7.853  69.319  1.00 30.73           C
ATOM   2405  C   SER B  85      15.468  -9.295  68.827  1.00 25.99           C
ATOM   2406  O   SER B  85      15.760  -9.616  67.676  1.00 28.40           O
ATOM   2407  CB  SER B  85      16.122  -6.930  68.224  1.00 34.96           C
ATOM   2408  OG  SER B  85      16.099  -5.578  68.669  1.00 35.68           O
ATOM   2409  N   LEU B  86      15.070 -10.176  69.734  1.00 21.39           N
ATOM   2410  CA  LEU B  86      14.993 -11.591  69.420  1.00 26.99           C
ATOM   2411  C   LEU B  86      13.950 -11.867  68.332  1.00 26.72           C
ATOM   2412  O   LEU B  86      12.935 -11.168  68.210  1.00 25.87           O
ATOM   2413  CB  LEU B  86      14.666 -12.376  70.689  1.00 30.45           C
ATOM   2414  CG  LEU B  86      15.869 -12.604  71.605  1.00 30.24           C
ATOM   2415  CD1 LEU B  86      15.435 -13.124  72.959  1.00 31.80           C
ATOM   2416  CD2 LEU B  86      16.841 -13.585  70.949  1.00 32.67           C
ATOM   2417  N   ARG B  87      14.231 -12.882  67.517  1.00 26.31           N
ATOM   2418  CA  ARG B  87      13.355 -13.325  66.439  1.00 24.14           C
ATOM   2419  C   ARG B  87      12.904 -14.757  66.693  1.00 23.10           C
ATOM   2420  O   ARG B  87      13.570 -15.516  67.401  1.00 22.63           O
ATOM   2421  CB  ARG B  87      14.068 -13.212  65.090  1.00 25.78           C
ATOM   2422  CG  ARG B  87      14.535 -11.788  64.806  1.00 28.43           C
ATOM   2423  CD  ARG B  87      15.433 -11.702  63.607  1.00 30.74           C
ATOM   2424  NE  ARG B  87      15.999 -10.370  63.448  1.00 27.48           N
ATOM   2425  CZ  ARG B  87      16.995 -10.068  62.622  1.00 29.97           C
ATOM   2426  NH1 ARG B  87      17.561 -11.005  61.856  1.00 29.53           N
ATOM   2427  NH2 ARG B  87      17.409  -8.813  62.540  1.00 29.08           N
ATOM   2428  N   ALA B  88      11.749 -15.129  66.118  1.00 25.67           N
ATOM   2429  CA  ALA B  88      11.269 -16.509  66.248  1.00 26.05           C
ATOM   2430  C   ALA B  88      12.342 -17.510  65.827  1.00 27.89           C
ATOM   2431  O   ALA B  88      12.492 -18.573  66.439  1.00 26.49           O
ATOM   2432  CB  ALA B  88       9.991 -16.719  65.426  1.00 28.51           C
ATOM   2433  N   GLU B  89      13.123 -17.170  64.807  1.00 27.11           N
ATOM   2434  CA  GLU B  89      14.192 -18.044  64.347  1.00 27.30           C
ATOM   2435  C   GLU B  89      15.355 -18.154  65.343  1.00 28.61           C
ATOM   2436  O   GLU B  89      16.271 -18.948  65.109  1.00 25.86           O
ATOM   2437  CB  GLU B  89      14.669 -17.545  62.986  1.00 28.46           C
ATOM   2438  CG  GLU B  89      15.085 -16.080  62.984  1.00 27.41           C
```

[1999]

```
ATOM   2439  CD  GLU B  89      14.066 -15.143  62.326  1.00 32.12           C
ATOM   2440  OE1 GLU B  89      14.486 -14.269  61.528  1.00 30.38           O
ATOM   2441  OE2 GLU B  89      12.848 -15.243  62.636  1.00 35.16           O
ATOM   2442  N   ASP B  90      15.348 -17.405  66.450  1.00 25.44           N
ATOM   2443  CA  ASP B  90      16.343 -17.591  67.503  1.00 22.60           C
ATOM   2444  C   ASP B  90      15.937 -18.681  68.498  1.00 26.95           C
ATOM   2445  O   ASP B  90      16.694 -18.961  69.434  1.00 26.28           O
ATOM   2446  CB  ASP B  90      16.594 -16.261  68.253  1.00 25.58           C
ATOM   2447  CG  ASP B  90      17.178 -15.161  67.354  1.00 25.08           C
ATOM   2448  OD1 ASP B  90      18.147 -15.419  66.609  1.00 27.61           O
ATOM   2449  OD2 ASP B  90      16.668 -14.027  67.380  1.00 25.15           O
ATOM   2450  N   THR B  91      14.750 -19.276  68.340  1.00 26.97           N
ATOM   2451  CA  THR B  91      14.309 -20.355  69.221  1.00 24.88           C
ATOM   2452  C   THR B  91      15.261 -21.540  69.125  1.00 25.09           C
ATOM   2453  O   THR B  91      15.574 -22.010  68.028  1.00 24.18           O
ATOM   2454  CB  THR B  91      12.890 -20.792  68.857  1.00 23.69           C
ATOM   2455  OG1 THR B  91      11.983 -19.718  69.122  1.00 28.42           O
ATOM   2456  CG2 THR B  91      12.471 -22.001  69.684  1.00 21.04           C
ATOM   2457  N   ALA B  92      15.723 -22.021  70.275  1.00 25.15           N
ATOM   2458  CA  ALA B  92      16.760 -23.044  70.290  1.00 24.44           C
ATOM   2459  C   ALA B  92      17.112 -23.375  71.726  1.00 25.44           C
ATOM   2460  O   ALA B  92      16.817 -22.612  72.655  1.00 26.71           O
ATOM   2461  CB  ALA B  92      18.027 -22.575  69.564  1.00 22.55           C
ATOM   2462  N   VAL B  93      17.791 -24.495  71.890  1.00 21.73           N
ATOM   2463  CA  VAL B  93      18.539 -24.769  73.108  1.00 21.86           C
ATOM   2464  C   VAL B  93      19.906 -24.125  72.935  1.00 21.80           C
ATOM   2465  O   VAL B  93      20.508 -24.222  71.863  1.00 23.46           O
ATOM   2466  CB  VAL B  93      18.653 -26.281  73.361  1.00 25.18           C
ATOM   2467  CG1 VAL B  93      19.701 -26.576  74.417  1.00 26.72           C
ATOM   2468  CG2 VAL B  93      17.290 -26.854  73.793  1.00 25.73           C
ATOM   2469  N   TYR B  94      20.367 -23.403  73.957  1.00 23.25           N
ATOM   2470  CA  TYR B  94      21.641 -22.697  73.905  1.00 22.45           C
ATOM   2471  C   TYR B  94      22.637 -23.375  74.834  1.00 27.72           C
ATOM   2472  O   TYR B  94      22.353 -23.564  76.025  1.00 28.48           O
ATOM   2473  CB  TYR B  94      21.487 -21.218  74.275  1.00 22.33           C
ATOM   2474  CG  TYR B  94      20.896 -20.385  73.164  1.00 20.90           C
ATOM   2475  CD1 TYR B  94      19.539 -20.460  72.858  1.00 21.69           C
ATOM   2476  CD2 TYR B  94      21.693 -19.535  72.411  1.00 19.15           C
ATOM   2477  CE1 TYR B  94      18.989 -19.715  71.836  1.00 18.42           C
ATOM   2478  CE2 TYR B  94      21.159 -18.776  71.380  1.00 21.80           C
ATOM   2479  CZ  TYR B  94      19.791 -18.873  71.098  1.00 25.75           C
ATOM   2480  OH  TYR B  94      19.240 -18.130  70.068  1.00 22.39           O
ATOM   2481  N   TYR B  95      23.801 -23.726  74.285  1.00 26.50           N
ATOM   2482  CA  TYR B  95      24.877 -24.379  75.016  1.00 27.71           C
ATOM   2483  C   TYR B  95      26.073 -23.447  75.101  1.00 27.03           C
ATOM   2484  O   TYR B  95      26.440 -22.808  74.111  1.00 25.05           O
ATOM   2485  CB  TYR B  95      25.324 -25.682  74.330  1.00 29.03           C
ATOM   2486  CG  TYR B  95      24.247 -26.717  74.062  1.00 27.59           C
ATOM   2487  CD1 TYR B  95      23.817 -27.577  75.065  1.00 29.24           C
ATOM   2488  CD2 TYR B  95      23.715 -26.886  72.784  1.00 29.80           C
ATOM   2489  CE1 TYR B  95      22.849 -28.555  74.818  1.00 32.17           C
ATOM   2490  CE2 TYR B  95      22.749 -27.864  72.522  1.00 27.49           C
ATOM   2491  CZ  TYR B  95      22.316 -28.686  73.552  1.00 31.81           C
ATOM   2492  OH  TYR B  95      21.355 -29.644  73.320  1.00 35.81           O
ATOM   2493  N   CYS B  96      26.681 -23.361  76.276  1.00 25.91           N
ATOM   2494  CA  CYS B  96      27.984 -22.728  76.391  1.00 26.86           C
ATOM   2495  C   CYS B  96      29.033 -23.821  76.346  1.00 24.70           C
ATOM   2496  O   CYS B  96      28.810 -24.919  76.858  1.00 28.09           O
ATOM   2497  CB  CYS B  96      28.125 -21.889  77.674  1.00 29.81           C
ATOM   2498  SG  CYS B  96      27.816 -22.756  79.233  1.00 37.93           S
ATOM   2499  N   ALA B  97      30.172 -23.522  75.729  1.00 24.05           N
ATOM   2500  CA  ALA B  97      31.202 -24.534  75.540  1.00 27.12           C
ATOM   2501  C   ALA B  97      32.595 -23.936  75.702  1.00 27.46           C
ATOM   2502  O   ALA B  97      32.864 -22.822  75.243  1.00 27.92           O
ATOM   2503  CB  ALA B  97      31.071 -25.188  74.164  1.00 26.97           C
ATOM   2504  N   LYS B  98      33.476 -24.704  76.341  1.00 29.35           N
ATOM   2505  CA  LYS B  98      34.875 -24.335  76.543  1.00 30.10           C
ATOM   2506  C   LYS B  98      35.693 -24.617  75.285  1.00 32.92           C
```

[2000]

```
ATOM   2507  O   LYS B  98      35.596 -25.697  74.698  1.00 33.69           O
ATOM   2508  CB  LYS B  98      35.430 -25.130  77.724  1.00 35.27           C
ATOM   2509  CG  LYS B  98      36.851 -24.839  78.138  1.00 36.97           C
ATOM   2510  CD  LYS B  98      37.145 -25.608  79.420  1.00 39.12           C
ATOM   2511  CE  LYS B  98      38.591 -26.065  79.497  1.00 38.84           C
ATOM   2512  NZ  LYS B  98      38.863 -27.211  78.574  1.00 44.37           N
ATOM   2513  N   TYR B  99      36.510 -23.657  74.879  1.00 34.10           N
ATOM   2514  CA  TYR B  99      37.282 -23.755  73.650  1.00 35.18           C
ATOM   2515  C   TYR B  99      38.763 -23.869  73.996  1.00 36.06           C
ATOM   2516  O   TYR B  99      39.260 -23.133  74.846  1.00 38.92           O
ATOM   2517  CB  TYR B  99      36.993 -22.533  72.775  1.00 37.63           C
ATOM   2518  CG  TYR B  99      37.751 -22.474  71.480  1.00 39.11           C
ATOM   2519  CD1 TYR B  99      39.027 -21.925  71.418  1.00 40.46           C
ATOM   2520  CD2 TYR B  99      37.186 -22.969  70.314  1.00 44.00           C
ATOM   2521  CE1 TYR B  99      39.718 -21.866  70.234  1.00 44.87           C
ATOM   2522  CE2 TYR B  99      37.870 -22.919  69.111  1.00 47.77           C
ATOM   2523  CZ  TYR B  99      39.137 -22.368  69.075  1.00 51.77           C
ATOM   2524  OH  TYR B  99      39.824 -22.318  67.879  1.00 52.64           O
ATOM   2525  N   ASP B 100      39.469 -24.801  73.365  1.00 37.35           N
ATOM   2526  CA  ASP B 100      40.891 -24.987  73.646  1.00 46.24           C
ATOM   2527  C   ASP B 100      41.757 -24.269  72.609  1.00 45.31           C
ATOM   2528  O   ASP B 100      41.557 -24.436  71.401  1.00 43.93           O
ATOM   2529  CB  ASP B 100      41.259 -26.465  73.694  1.00 46.84           C
ATOM   2530  CG  ASP B 100      42.756 -26.671  73.647  1.00 56.32           C
ATOM   2531  OD1 ASP B 100      43.419 -26.373  74.672  1.00 59.87           O
ATOM   2532  OD2 ASP B 100      43.270 -27.096  72.584  1.00 54.10           O
ATOM   2533  N   GLY B 101      42.735 -23.490  73.083  1.00 42.65           N
ATOM   2534  CA  GLY B 101      43.457 -22.581  72.202  1.00 43.10           C
ATOM   2535  C   GLY B 101      44.367 -23.242  71.178  1.00 42.49           C
ATOM   2536  O   GLY B 101      44.678 -22.620  70.157  1.00 42.11           O
ATOM   2537  N   ILE B 102      44.805 -24.475  71.423  1.00 39.27           N
ATOM   2538  CA  ILE B 102      45.773 -25.112  70.530  1.00 43.57           C
ATOM   2539  C   ILE B 102      45.077 -25.763  69.341  1.00 46.98           C
ATOM   2540  O   ILE B 102      45.386 -25.475  68.179  1.00 47.01           O
ATOM   2541  CB  ILE B 102      46.622 -26.136  71.299  1.00 48.78           C
ATOM   2542  CG1 ILE B 102      47.490 -25.427  72.338  1.00 43.88           C
ATOM   2543  CG2 ILE B 102      47.468 -26.949  70.328  1.00 47.05           C
ATOM   2544  CD1 ILE B 102      48.540 -24.524  71.712  1.00 38.97           C
ATOM   2545  N   TYR B 103      44.134 -26.663  69.609  1.00 46.99           N
ATOM   2546  CA  TYR B 103      43.473 -27.388  68.539  1.00 47.13           C
ATOM   2547  C   TYR B 103      42.045 -26.937  68.293  1.00 44.93           C
ATOM   2548  O   TYR B 103      41.486 -27.262  67.244  1.00 41.59           O
ATOM   2549  CB  TYR B 103      43.507 -28.893  68.828  1.00 50.53           C
ATOM   2550  CG  TYR B 103      44.919 -29.416  68.857  1.00 56.08           C
ATOM   2551  CD1 TYR B 103      45.718 -29.342  67.721  1.00 79.53           C
ATOM   2552  CD2 TYR B 103      45.466 -29.959  70.014  1.00 56.89           C
ATOM   2553  CE1 TYR B 103      47.014 -29.800  67.725  1.00 65.05           C
ATOM   2554  CE2 TYR B 103      46.772 -30.429  70.027  1.00 62.07           C
ATOM   2555  CZ  TYR B 103      47.539 -30.343  68.875  1.00 62.01           C
ATOM   2556  OH  TYR B 103      48.835 -30.798  68.870  1.00 64.38           O
ATOM   2557  N   GLY B 104      41.453 -26.171  69.201  1.00 42.77           N
ATOM   2558  CA  GLY B 104      40.161 -25.589  68.921  1.00 42.18           C
ATOM   2559  C   GLY B 104      38.971 -26.480  69.186  1.00 37.30           C
ATOM   2560  O   GLY B 104      37.870 -26.149  68.747  1.00 39.71           O
ATOM   2561  N   GLU B 105      39.149 -27.606  69.863  1.00 34.66           N
ATOM   2562  CA  GLU B 105      38.007 -28.444  70.172  1.00 35.74           C
ATOM   2563  C   GLU B 105      37.175 -27.844  71.302  1.00 41.60           C
ATOM   2564  O   GLU B 105      37.701 -27.229  72.231  1.00 37.01           O
ATOM   2565  CB  GLU B 105      38.469 -29.842  70.553  1.00 34.13           C
ATOM   2566  CG  GLU B 105      39.079 -29.973  71.925  1.00 38.27           C
ATOM   2567  CD  GLU B 105      40.580 -29.758  71.914  1.00 45.16           C
ATOM   2568  OE1 GLU B 105      41.078 -29.063  70.992  1.00 45.68           O
ATOM   2569  OE2 GLU B 105      41.266 -30.314  72.808  1.00 49.82           O
ATOM   2570  N   LEU B 106      35.861 -28.054  71.231  1.00 36.91           N
ATOM   2571  CA  LEU B 106      34.969 -27.656  72.316  1.00 32.55           C
ATOM   2572  C   LEU B 106      34.847 -28.875  73.210  1.00 33.80           C
ATOM   2573  O   LEU B 106      34.006 -29.751  72.998  1.00 34.53           O
ATOM   2574  CB  LEU B 106      33.621 -27.175  71.791  1.00 33.57           C
```

[2001]

```
ATOM   2575  CG  LEU B 106      33.521 -25.878  70.967  1.00 37.12           C
ATOM   2576  CD1 LEU B 106      34.392 -25.864  69.717  1.00 39.81           C
ATOM   2577  CD2 LEU B 106      32.058 -25.619  70.586  1.00 37.82           C
ATOM   2578  N   ASP B 107      35.725 -28.949  74.214  1.00 34.00           N
ATOM   2579  CA  ASP B 107      35.878 -30.184  74.971  1.00 33.38           C
ATOM   2580  C   ASP B 107      34.895 -30.326  76.126  1.00 38.20           C
ATOM   2581  O   ASP B 107      34.659 -31.457  76.568  1.00 42.58           O
ATOM   2582  CB  ASP B 107      37.317 -30.325  75.474  1.00 37.78           C
ATOM   2583  CG  ASP B 107      37.761 -29.162  76.341  1.00 44.37           C
ATOM   2584  OD1 ASP B 107      37.189 -28.050  76.236  1.00 36.92           O
ATOM   2585  OD2 ASP B 107      38.710 -29.368  77.129  1.00 52.37           O
ATOM   2586  N   PHE B 108      34.295 -29.236  76.610  1.00 31.71           N
ATOM   2587  CA  PHE B 108      33.268 -29.348  77.644  1.00 35.74           C
ATOM   2588  C   PHE B 108      32.111 -28.411  77.346  1.00 34.46           C
ATOM   2589  O   PHE B 108      32.316 -27.242  76.999  1.00 32.63           O
ATOM   2590  CB  PHE B 108      33.829 -29.074  79.046  1.00 36.55           C
ATOM   2591  CG  PHE B 108      34.645 -30.210  79.587  1.00 46.86           C
ATOM   2592  CD1 PHE B 108      36.006 -30.312  79.299  1.00 46.69           C
ATOM   2593  CD2 PHE B 108      34.048 -31.202  80.354  1.00 49.76           C
ATOM   2594  CE1 PHE B 108      36.769 -31.382  79.784  1.00 45.77           C
ATOM   2595  CE2 PHE B 108      34.800 -32.274  80.844  1.00 52.95           C
ATOM   2596  CZ  PHE B 108      36.166 -32.362  80.557  1.00 52.66           C
ATOM   2597  N   TRP B 109      30.903 -28.950  77.494  1.00 33.54           N
ATOM   2598  CA  TRP B 109      29.644 -28.291  77.203  1.00 29.88           C
ATOM   2599  C   TRP B 109      28.789 -28.248  78.459  1.00 31.67           C
ATOM   2600  O   TRP B 109      28.872 -29.133  79.313  1.00 33.80           O
ATOM   2601  CB  TRP B 109      28.864 -29.038  76.109  1.00 30.88           C
ATOM   2602  CG  TRP B 109      29.559 -29.131  74.788  1.00 34.38           C
ATOM   2603  CD1 TRP B 109      30.794 -29.686  74.529  1.00 30.71           C
ATOM   2604  CD2 TRP B 109      29.054 -28.677  73.526  1.00 34.14           C
ATOM   2605  NE1 TRP B 109      31.080 -29.588  73.184  1.00 30.59           N
ATOM   2606  CE2 TRP B 109      30.027 -28.977  72.550  1.00 33.24           C
ATOM   2607  CE3 TRP B 109      27.878 -28.038  73.128  1.00 32.08           C
ATOM   2608  CZ2 TRP B 109      29.854 -28.647  71.209  1.00 29.49           C
ATOM   2609  CZ3 TRP B 109      27.709 -27.722  71.800  1.00 26.09           C
ATOM   2610  CH2 TRP B 109      28.689 -28.021  70.857  1.00 28.03           C
ATOM   2611  N   GLY B 110      27.969 -27.209  78.569  1.00 33.24           N
ATOM   2612  CA  GLY B 110      26.926 -27.180  79.566  1.00 32.57           C
ATOM   2613  C   GLY B 110      25.792 -28.107  79.175  1.00 34.37           C
ATOM   2614  O   GLY B 110      25.863 -28.855  78.203  1.00 35.24           O
ATOM   2615  N   GLN B 111      24.698 -28.014  79.928  1.00 34.67           N
ATOM   2616  CA  GLN B 111      23.553 -28.874  79.676  1.00 35.95           C
ATOM   2617  C   GLN B 111      22.500 -28.205  78.809  1.00 34.82           C
ATOM   2618  O   GLN B 111      21.566 -28.882  78.373  1.00 37.31           O
ATOM   2619  CB  GLN B 111      22.901 -29.307  80.997  1.00 44.36           C
ATOM   2620  CG  GLN B 111      23.759 -30.218  81.899  1.00 49.50           C
ATOM   2621  CD  GLN B 111      24.247 -31.497  81.211  1.00 60.75           C
ATOM   2622  OE1 GLN B 111      23.451 -32.296  80.692  1.00 59.49           O
ATOM   2623  NE2 GLN B 111      25.567 -31.698  81.211  1.00 64.36           N
ATOM   2624  N   GLY B 112      22.665 -26.933  78.491  1.00 29.52           N
ATOM   2625  CA  GLY B 112      21.743 -26.232  77.611  1.00 34.10           C
ATOM   2626  C   GLY B 112      20.608 -25.555  78.361  1.00 31.29           C
ATOM   2627  O   GLY B 112      20.161 -25.994  79.418  1.00 33.67           O
ATOM   2628  N   THR B 113      20.139 -24.447  77.803  1.00 26.94           N
ATOM   2629  CA  THR B 113      18.939 -23.802  78.303  1.00 27.65           C
ATOM   2630  C   THR B 113      18.051 -23.466  77.112  1.00 27.64           C
ATOM   2631  O   THR B 113      18.545 -23.117  76.036  1.00 24.70           O
ATOM   2632  CB  THR B 113      19.285 -22.547  79.165  1.00 29.71           C
ATOM   2633  OG1 THR B 113      18.098 -22.039  79.773  1.00 38.50           O
ATOM   2634  CG2 THR B 113      19.938 -21.439  78.347  1.00 27.31           C
ATOM   2635  N   LEU B 114      16.741 -23.631  77.280  1.00 30.41           N
ATOM   2636  CA  LEU B 114      15.826 -23.482  76.156  1.00 29.09           C
ATOM   2637  C   LEU B 114      15.322 -22.051  76.091  1.00 28.19           C
ATOM   2638  O   LEU B 114      14.820 -21.524  77.079  1.00 32.69           O
ATOM   2639  CB  LEU B 114      14.650 -24.452  76.261  1.00 32.50           C
ATOM   2640  CG  LEU B 114      13.554 -24.312  75.190  1.00 29.21           C
ATOM   2641  CD1 LEU B 114      14.052 -24.675  73.792  1.00 25.76           C
ATOM   2642  CD2 LEU B 114      12.385 -25.166  75.563  1.00 32.06           C
```

[2002]

```
ATOM   2643  N   VAL B 115      15.460 -21.437  74.924  1.00 27.75           N
ATOM   2644  CA  VAL B 115      14.952 -20.106  74.634  1.00 25.01           C
ATOM   2645  C   VAL B 115      13.847 -20.250  73.604  1.00 25.73           C
ATOM   2646  O   VAL B 115      14.101 -20.736  72.497  1.00 24.33           O
ATOM   2647  CB  VAL B 115      16.059 -19.193  74.099  1.00 27.11           C
ATOM   2648  CG1 VAL B 115      15.442 -17.889  73.600  1.00 28.18           C
ATOM   2649  CG2 VAL B 115      17.106 -18.935  75.185  1.00 25.90           C
ATOM   2650  N   THR B 116      12.621 -19.843  73.962  1.00 25.57           N
ATOM   2651  CA  THR B 116      11.453 -19.917  73.074  1.00 26.43           C
ATOM   2652  C   THR B 116      11.020 -18.494  72.737  1.00 25.61           C
ATOM   2653  O   THR B 116      10.583 -17.757  73.617  1.00 27.81           O
ATOM   2654  CB  THR B 116      10.296 -20.693  73.713  1.00 27.66           C
ATOM   2655  OG1 THR B 116      10.723 -22.014  74.046  1.00 26.98           O
ATOM   2656  CG2 THR B 116       9.107 -20.825  72.748  1.00 32.36           C
ATOM   2657  N   VAL B 117      11.165 -18.099  71.479  1.00 28.42           N
ATOM   2658  CA  VAL B 117      10.744 -16.783  71.010  1.00 21.82           C
ATOM   2659  C   VAL B 117       9.439 -16.977  70.254  1.00 31.49           C
ATOM   2660  O   VAL B 117       9.429 -17.511  69.137  1.00 26.25           O
ATOM   2661  CB  VAL B 117      11.812 -16.135  70.122  1.00 28.59           C
ATOM   2662  CG1 VAL B 117      11.422 -14.723  69.766  1.00 27.07           C
ATOM   2663  CG2 VAL B 117      13.191 -16.175  70.803  1.00 26.37           C
ATOM   2664  N   SER B 118       8.326 -16.574  70.860  1.00 27.47           N
ATOM   2665  CA  SER B 118       7.035 -16.872  70.261  1.00 33.35           C
ATOM   2666  C   SER B 118       5.992 -15.902  70.788  1.00 34.64           C
ATOM   2667  O   SER B 118       5.983 -15.565  71.978  1.00 37.41           O
ATOM   2668  CB  SER B 118       6.608 -18.321  70.547  1.00 36.06           C
ATOM   2669  OG  SER B 118       5.253 -18.531  70.186  1.00 40.24           O
ATOM   2670  N   SER B 119       5.087 -15.497  69.902  1.00 36.34           N
ATOM   2671  CA  SER B 119       3.976 -14.627  70.259  1.00 35.26           C
ATOM   2672  C   SER B 119       2.636 -15.346  70.197  1.00 33.90           C
ATOM   2673  O   SER B 119       1.594 -14.689  70.237  1.00 35.72           O
ATOM   2674  CB  SER B 119       3.955 -13.400  69.347  1.00 35.40           C
ATOM   2675  OG  SER B 119       3.793 -13.796  67.997  1.00 43.13           O
ATOM   2676  N   GLY B 120       2.638 -16.675  70.112  1.00 30.20           N
ATOM   2677  CA  GLY B 120       1.416 -17.445  70.080  1.00 34.27           C
ATOM   2678  C   GLY B 120       0.770 -17.580  68.718  1.00 40.00           C
ATOM   2679  O   GLY B 120      -0.291 -18.207  68.616  1.00 43.23           O
ATOM   2680  N   GLY B 121       1.375 -17.045  67.663  1.00 37.38           N
ATOM   2681  CA  GLY B 121       0.728 -17.089  66.368  1.00 40.85           C
ATOM   2682  C   GLY B 121       1.199 -18.225  65.481  1.00 42.80           C
ATOM   2683  O   GLY B 121       1.256 -18.072  64.256  1.00 42.61           O
ATOM   2684  N   GLY B 122       1.543 -19.356  66.075  1.00 43.64           N
ATOM   2685  CA  GLY B 122       2.047 -20.455  65.278  1.00 44.92           C
ATOM   2686  C   GLY B 122       3.555 -20.593  65.392  1.00 47.58           C
ATOM   2687  O   GLY B 122       4.287 -19.615  65.584  1.00 49.74           O
ATOM   2688  N   SER B 123       4.032 -21.829  65.273  1.00 47.30           N
ATOM   2689  CA  SER B 123       5.443 -22.146  65.457  1.00 48.81           C
ATOM   2690  C   SER B 123       6.241 -22.120  64.156  1.00 45.03           C
ATOM   2691  O   SER B 123       7.414 -22.505  64.154  1.00 48.74           O
ATOM   2692  CB  SER B 123       5.584 -23.516  66.126  1.00 48.87           C
ATOM   2693  OG  SER B 123       4.771 -23.590  67.286  1.00 56.55           O
ATOM   2694  N   GLY B 124       5.633 -21.684  63.054  1.00 41.75           N
ATOM   2695  CA  GLY B 124       6.310 -21.702  61.771  1.00 48.02           C
ATOM   2696  C   GLY B 124       7.273 -20.567  61.499  1.00 50.72           C
ATOM   2697  O   GLY B 124       8.201 -20.744  60.700  1.00 52.24           O
ATOM   2698  N   GLY B 125       7.104 -19.424  62.159  1.00 52.60           N
ATOM   2699  CA  GLY B 125       7.919 -18.254  61.864  1.00 53.23           C
ATOM   2700  C   GLY B 125       9.420 -18.480  61.914  1.00 50.10           C
ATOM   2701  O   GLY B 125      10.192 -17.748  61.281  1.00 47.84           O
ATOM   2702  N   SER B 126       9.838 -19.521  62.640  1.00 49.24           N
ATOM   2703  CA  SER B 126      11.249 -19.868  62.779  1.00 46.18           C
ATOM   2704  C   SER B 126      11.914 -20.209  61.455  1.00 47.11           C
ATOM   2705  O   SER B 126      13.147 -20.249  61.390  1.00 47.79           O
ATOM   2706  CB  SER B 126      11.388 -21.066  63.729  1.00 51.43           C
ATOM   2707  OG  SER B 126      10.897 -22.262  63.121  1.00 57.19           O
ATOM   2708  N   GLY B 127      11.144 -20.431  60.399  1.00 50.45           N
ATOM   2709  CA  GLY B 127      11.790 -20.883  59.199  1.00 49.78           C
ATOM   2710  C   GLY B 127      12.214 -22.327  59.384  1.00 49.65           C
```

[2003]

```
ATOM   2711  O   GLY B 127      11.689 -23.072  60.219  1.00 52.95           O
ATOM   2712  N   GLY B 128      13.178 -22.735  58.580  1.00 46.41           N
ATOM   2713  CA  GLY B 128      13.695 -24.070  58.668  1.00 49.57           C
ATOM   2714  C   GLY B 128      14.927 -24.121  59.538  1.00 46.88           C
ATOM   2715  O   GLY B 128      15.215 -23.211  60.325  1.00 52.26           O
ATOM   2716  N   CYS B 129      15.688 -25.177  59.365  1.00 48.40           N
ATOM   2717  CA  CYS B 129      16.957 -25.259  60.038  1.00 50.14           C
ATOM   2718  C   CYS B 129      17.918 -24.289  59.355  1.00 49.11           C
ATOM   2719  O   CYS B 129      17.763 -23.986  58.166  1.00 50.22           O
ATOM   2720  CB  CYS B 129      17.482 -26.691  60.002  1.00 53.27           C
ATOM   2721  SG  CYS B 129      16.404 -27.877  60.912  1.00 54.89           S
ATOM   2722  N   PRO B 130      18.865 -23.724  60.090  1.00 45.57           N
ATOM   2723  CA  PRO B 130      19.880 -22.897  59.448  1.00 49.21           C
ATOM   2724  C   PRO B 130      20.658 -23.723  58.444  1.00 49.72           C
ATOM   2725  O   PRO B 130      20.674 -24.959  58.527  1.00 53.27           O
ATOM   2726  CB  PRO B 130      20.776 -22.453  60.617  1.00 48.69           C
ATOM   2727  CG  PRO B 130      20.454 -23.411  61.745  1.00 48.24           C
ATOM   2728  CD  PRO B 130      19.015 -23.762  61.554  1.00 44.21           C
ATOM   2729  N   PRO B 131      21.334 -23.092  57.504  1.00 51.72           N
ATOM   2730  CA  PRO B 131      22.172 -23.868  56.586  1.00 56.47           C
ATOM   2731  C   PRO B 131      23.298 -24.542  57.339  1.00 59.01           C
ATOM   2732  O   PRO B 131      24.208 -23.883  57.857  1.00 61.94           O
ATOM   2733  CB  PRO B 131      22.707 -22.825  55.595  1.00 57.30           C
ATOM   2734  CG  PRO B 131      21.989 -21.579  55.888  1.00 54.45           C
ATOM   2735  CD  PRO B 131      21.474 -21.647  57.290  1.00 50.27           C
ATOM   2736  N   CYS B 132      23.222 -25.861  57.433  1.00 58.29           N
ATOM   2737  CA  CYS B 132      24.305 -26.614  58.026  1.00 54.33           C
ATOM   2738  C   CYS B 132      25.424 -26.765  57.003  1.00 56.82           C
ATOM   2739  O   CYS B 132      25.199 -26.722  55.785  1.00 58.36           O
ATOM   2740  CB  CYS B 132      23.796 -27.974  58.496  1.00 53.96           C
ATOM   2741  SG  CYS B 132      22.925 -28.925  57.199  1.00 58.07           S
ATOM   2742  N   GLY B 133      26.644 -26.918  57.501  1.00 49.33           N
ATOM   2743  CA  GLY B 133      27.746 -27.049  56.576  1.00 50.56           C
ATOM   2744  C   GLY B 133      28.285 -25.736  56.063  1.00 55.94           C
ATOM   2745  O   GLY B 133      29.147 -25.749  55.172  1.00 52.60           O
ATOM   2746  N   GLY B 134      27.786 -24.609  56.580  1.00 55.22           N
ATOM   2747  CA  GLY B 134      28.247 -23.281  56.202  1.00 59.35           C
ATOM   2748  C   GLY B 134      27.171 -22.431  55.550  1.00 60.82           C
ATOM   2749  O   GLY B 134      26.163 -22.101  56.183  1.00 60.95           O
ATOM   2750  N   GLY B 136      27.463 -18.655  54.205  1.00 58.59           N
ATOM   2751  CA  GLY B 136      28.035 -17.584  53.408  1.00 57.49           C
ATOM   2752  C   GLY B 136      29.413 -17.151  53.876  1.00 58.92           C
ATOM   2753  O   GLY B 136      29.576 -16.705  55.005  1.00 63.95           O
ATOM   2754  N   GLY B 137      30.417 -17.290  53.014  1.00 61.89           N
ATOM   2755  CA  GLY B 137      31.767 -16.938  53.398  1.00 60.97           C
ATOM   2756  C   GLY B 137      32.423 -17.924  54.336  1.00 64.70           C
ATOM   2757  O   GLY B 137      33.613 -17.770  54.650  1.00 63.37           O
ATOM   2758  N   ASP B 138      31.685 -18.935  54.783  1.00 64.81           N
ATOM   2759  CA  ASP B 138      32.168 -19.911  55.738  1.00 60.05           C
ATOM   2760  C   ASP B 138      33.053 -20.942  55.047  1.00 58.54           C
ATOM   2761  O   ASP B 138      32.966 -21.165  53.834  1.00 61.36           O
ATOM   2762  CB  ASP B 138      30.987 -20.629  56.400  1.00 58.44           C
ATOM   2763  CG  ASP B 138      30.029 -19.674  57.111  1.00 63.60           C
ATOM   2764  OD1 ASP B 138      30.365 -18.475  57.274  1.00 65.57           O
ATOM   2765  OD2 ASP B 138      28.931 -20.133  57.511  1.00 61.77           O
ATOM   2766  N   ILE B 139      33.925 -21.565  55.834  1.00 48.58           N
ATOM   2767  CA  ILE B 139      34.466 -22.849  55.421  1.00 45.84           C
ATOM   2768  C   ILE B 139      33.311 -23.837  55.386  1.00 52.13           C
ATOM   2769  O   ILE B 139      32.623 -24.044  56.394  1.00 49.22           O
ATOM   2770  CB  ILE B 139      35.575 -23.321  56.361  1.00 42.99           C
ATOM   2771  CG1 ILE B 139      36.796 -22.407  56.237  1.00 44.12           C
ATOM   2772  CG2 ILE B 139      35.932 -24.772  56.061  1.00 43.35           C
ATOM   2773  CD1 ILE B 139      37.873 -22.680  57.271  1.00 42.16           C
ATOM   2774  N   GLN B 140      33.079 -24.428  54.217  1.00 47.74           N
ATOM   2775  CA  GLN B 140      31.992 -25.378  54.035  1.00 47.22           C
ATOM   2776  C   GLN B 140      32.346 -26.733  54.626  1.00 40.01           C
ATOM   2777  O   GLN B 140      33.465 -27.224  54.456  1.00 46.10           O
ATOM   2778  CB  GLN B 140      31.680 -25.533  52.545  1.00 54.49           C
```

[2004]

```
ATOM   2779  CG  GLN B 140      31.200 -24.268  51.858  1.00 57.30           C
ATOM   2780  CD  GLN B 140      29.749 -23.965  52.209  1.00 63.35           C
ATOM   2781  OE1 GLN B 140      28.930 -24.881  52.348  1.00 60.17           O
ATOM   2782  NE2 GLN B 140      29.423 -22.682  52.355  1.00 67.41           N
ATOM   2783  N   MET B 141      31.399 -27.328  55.353  1.00 42.02           N
ATOM   2784  CA  MET B 141      31.570 -28.672  55.902  1.00 42.64           C
ATOM   2785  C   MET B 141      30.550 -29.591  55.237  1.00 43.51           C
ATOM   2786  O   MET B 141      29.344 -29.491  55.499  1.00 39.81           O
ATOM   2787  CB  MET B 141      31.421 -28.693  57.425  1.00 34.37           C
ATOM   2788  CG  MET B 141      32.445 -27.850  58.142  1.00 35.36           C
ATOM   2789  SD  MET B 141      34.116 -28.197  57.539  1.00 45.38           S
ATOM   2790  CE  MET B 141      34.469 -29.758  58.323  1.00 36.58           C
ATOM   2791  N   THR B 142      31.039 -30.519  54.424  1.00 36.65           N
ATOM   2792  CA  THR B 142      30.182 -31.457  53.715  1.00 37.13           C
ATOM   2793  C   THR B 142      30.280 -32.801  54.421  1.00 31.51           C
ATOM   2794  O   THR B 142      31.326 -33.456  54.367  1.00 34.87           O
ATOM   2795  CB  THR B 142      30.608 -31.559  52.254  1.00 39.34           C
ATOM   2796  OG1 THR B 142      30.581 -30.251  51.665  1.00 41.79           O
ATOM   2797  CG2 THR B 142      29.671 -32.476  51.490  1.00 39.52           C
ATOM   2798  N   GLN B 143      29.191 -33.206  55.070  1.00 26.43           N
ATOM   2799  CA  GLN B 143      29.137 -34.410  55.892  1.00 34.54           C
ATOM   2800  C   GLN B 143      28.297 -35.480  55.224  1.00 33.39           C
ATOM   2801  O   GLN B 143      27.192 -35.198  54.759  1.00 33.35           O
ATOM   2802  CB  GLN B 143      28.538 -34.129  57.267  1.00 35.09           C
ATOM   2803  CG  GLN B 143      29.025 -35.103  58.297  1.00 35.06           C
ATOM   2804  CD  GLN B 143      28.423 -34.853  59.652  1.00 35.26           C
ATOM   2805  OE1 GLN B 143      28.339 -33.707  60.104  1.00 34.67           O
ATOM   2806  NE2 GLN B 143      27.994 -35.929  60.320  1.00 30.38           N
ATOM   2807  N   SER B 144      28.793 -36.715  55.220  1.00 34.04           N
ATOM   2808  CA  SER B 144      28.058 -37.743  54.506  1.00 35.23           C
ATOM   2809  C   SER B 144      28.249 -39.097  55.173  1.00 31.30           C
ATOM   2810  O   SER B 144      29.352 -39.389  55.654  1.00 33.56           O
ATOM   2811  CB  SER B 144      28.501 -37.804  53.041  1.00 34.57           C
ATOM   2812  OG  SER B 144      27.572 -38.530  52.266  1.00 45.60           O
ATOM   2813  N   PRO B 145      27.213 -39.948  55.210  1.00 32.30           N
ATOM   2814  CA  PRO B 145      25.867 -39.693  54.691  1.00 34.68           C
ATOM   2815  C   PRO B 145      25.027 -38.937  55.696  1.00 35.72           C
ATOM   2816  O   PRO B 145      25.450 -38.801  56.840  1.00 38.88           O
ATOM   2817  CB  PRO B 145      25.310 -41.092  54.487  1.00 37.88           C
ATOM   2818  CG  PRO B 145      25.921 -41.863  55.602  1.00 39.32           C
ATOM   2819  CD  PRO B 145      27.310 -41.291  55.810  1.00 35.66           C
ATOM   2820  N   SER B 146      23.853 -38.464  55.286  1.00 38.22           N
ATOM   2821  CA  SER B 146      22.978 -37.778  56.231  1.00 40.95           C
ATOM   2822  C   SER B 146      22.356 -38.760  57.217  1.00 42.56           C
ATOM   2823  O   SER B 146      22.177 -38.434  58.399  1.00 42.38           O
ATOM   2824  CB  SER B 146      21.908 -36.988  55.479  1.00 41.12           C
ATOM   2825  OG  SER B 146      21.453 -37.710  54.351  1.00 49.12           O
ATOM   2826  N   SER B 147      22.033 -39.967  56.757  1.00 41.58           N
ATOM   2827  CA  SER B 147      21.580 -41.031  57.645  1.00 40.94           C
ATOM   2828  C   SER B 147      22.026 -42.370  57.078  1.00 38.48           C
ATOM   2829  O   SER B 147      22.257 -42.514  55.875  1.00 36.63           O
ATOM   2830  CB  SER B 147      20.065 -41.034  57.804  1.00 39.55           C
ATOM   2831  OG  SER B 147      19.466 -41.201  56.532  1.00 42.12           O
ATOM   2832  N   LEU B 148      22.137 -43.355  57.960  1.00 40.00           N
ATOM   2833  CA  LEU B 148      22.528 -44.686  57.531  1.00 44.09           C
ATOM   2834  C   LEU B 148      21.938 -45.703  58.489  1.00 45.30           C
ATOM   2835  O   LEU B 148      21.725 -45.419  59.670  1.00 42.57           O
ATOM   2836  CB  LEU B 148      24.057 -44.823  57.434  1.00 40.37           C
ATOM   2837  CG  LEU B 148      24.881 -44.656  58.708  1.00 38.52           C
ATOM   2838  CD1 LEU B 148      25.131 -45.987  59.387  1.00 41.27           C
ATOM   2839  CD2 LEU B 148      26.167 -43.950  58.398  1.00 27.13           C
ATOM   2840  N   SER B 149      21.646 -46.885  57.955  1.00 46.16           N
ATOM   2841  CA  SER B 149      21.155 -48.004  58.744  1.00 51.20           C
ATOM   2842  C   SER B 149      22.219 -49.094  58.779  1.00 50.75           C
ATOM   2843  O   SER B 149      22.738 -49.498  57.730  1.00 46.71           O
ATOM   2844  CB  SER B 149      19.835 -48.542  58.182  1.00 51.16           C
ATOM   2845  OG  SER B 149      19.932 -48.783  56.796  1.00 55.92           O
[2005] ATOM   2846  N   ALA B 150      22.548 -49.551  59.986  1.00 44.47           N
```

```
ATOM   2847  CA  ALA B 150      23.527 -50.605  60.190  1.00 45.82           C
ATOM   2848  C   ALA B 150      23.063 -51.469  61.356  1.00 52.23           C
ATOM   2849  O   ALA B 150      22.061 -51.172  62.015  1.00 55.83           O
ATOM   2850  CB  ALA B 150      24.922 -50.021  60.438  1.00 46.28           C
ATOM   2851  N   SER B 151      23.821 -52.524  61.645  1.00 49.50           N
ATOM   2852  CA  SER B 151      23.457 -53.469  62.685  1.00 48.67           C
ATOM   2853  C   SER B 151      24.510 -53.454  63.777  1.00 52.86           C
ATOM   2854  O   SER B 151      25.645 -53.008  63.574  1.00 52.57           O
ATOM   2855  CB  SER B 151      23.338 -54.905  62.145  1.00 52.36           C
ATOM   2856  OG  SER B 151      22.789 -54.949  60.839  1.00 54.64           O
ATOM   2857  N   VAL B 152      24.111 -53.962  64.944  1.00 51.94           N
ATOM   2858  CA  VAL B 152      25.025 -54.047  66.073  1.00 47.85           C
ATOM   2859  C   VAL B 152      26.255 -54.838  65.671  1.00 48.12           C
ATOM   2860  O   VAL B 152      26.156 -55.921  65.084  1.00 45.08           O
ATOM   2861  CB  VAL B 152      24.335 -54.697  67.277  1.00 45.84           C
ATOM   2862  CG1 VAL B 152      25.310 -54.791  68.438  1.00 47.01           C
ATOM   2863  CG2 VAL B 152      23.084 -53.923  67.652  1.00 44.96           C
ATOM   2864  N   GLY B 153      27.418 -54.291  65.973  1.00 47.25           N
ATOM   2865  CA  GLY B 153      28.673 -54.955  65.778  1.00 41.93           C
ATOM   2866  C   GLY B 153      29.390 -54.632  64.486  1.00 43.04           C
ATOM   2867  O   GLY B 153      30.605 -54.831  64.422  1.00 48.01           O
ATOM   2868  N   ASP B 154      28.696 -54.147  63.455  1.00 43.62           N
ATOM   2869  CA  ASP B 154      29.438 -53.885  62.226  1.00 44.77           C
ATOM   2870  C   ASP B 154      30.117 -52.510  62.266  1.00 45.07           C
ATOM   2871  O   ASP B 154      29.870 -51.674  63.142  1.00 42.58           O
ATOM   2872  CB  ASP B 154      28.580 -54.094  60.971  1.00 47.77           C
ATOM   2873  CG  ASP B 154      27.359 -53.231  60.916  1.00 52.25           C
ATOM   2874  OD1 ASP B 154      27.476 -52.003  61.122  1.00 54.40           O
ATOM   2875  OD2 ASP B 154      26.283 -53.792  60.603  1.00 50.38           O
ATOM   2876  N   ARG B 155      31.034 -52.314  61.320  1.00 39.34           N
ATOM   2877  CA  ARG B 155      31.824 -51.098  61.219  1.00 40.68           C
ATOM   2878  C   ARG B 155      31.136 -50.050  60.362  1.00 42.88           C
ATOM   2879  O   ARG B 155      30.722 -50.327  59.233  1.00 44.13           O
ATOM   2880  CB  ARG B 155      33.199 -51.393  60.629  1.00 37.68           C
ATOM   2881  CG  ARG B 155      33.952 -50.147  60.257  1.00 38.73           C
ATOM   2882  CD  ARG B 155      35.210 -50.506  59.530  1.00 39.93           C
ATOM   2883  NE  ARG B 155      36.108 -51.276  60.382  1.00 44.09           N
ATOM   2884  CZ  ARG B 155      37.434 -51.222  60.314  1.00 49.58           C
ATOM   2885  NH1 ARG B 155      38.013 -50.423  59.421  1.00 44.46           N
ATOM   2886  NH2 ARG B 155      38.175 -51.970  61.131  1.00 45.57           N
ATOM   2887  N   VAL B 156      31.046 -48.839  60.898  1.00 43.83           N
ATOM   2888  CA  VAL B 156      30.399 -47.724  60.231  1.00 38.94           C
ATOM   2889  C   VAL B 156      31.402 -46.587  60.081  1.00 38.53           C
ATOM   2890  O   VAL B 156      32.195 -46.315  60.989  1.00 33.49           O
ATOM   2891  CB  VAL B 156      29.143 -47.304  61.016  1.00 43.28           C
ATOM   2892  CG1 VAL B 156      28.990 -45.790  61.084  1.00 47.28           C
ATOM   2893  CG2 VAL B 156      27.921 -47.965  60.389  1.00 46.84           C
ATOM   2894  N   THR B 157      31.377 -45.940  58.916  1.00 41.56           N
ATOM   2895  CA  THR B 157      32.282 -44.848  58.586  1.00 36.51           C
ATOM   2896  C   THR B 157      31.468 -43.631  58.171  1.00 36.11           C
ATOM   2897  O   THR B 157      30.558 -43.741  57.341  1.00 40.72           O
ATOM   2898  CB  THR B 157      33.242 -45.254  57.455  1.00 38.65           C
ATOM   2899  OG1 THR B 157      33.937 -46.455  57.819  1.00 41.17           O
ATOM   2900  CG2 THR B 157      34.255 -44.153  57.199  1.00 34.42           C
ATOM   2901  N   ILE B 158      31.767 -42.490  58.788  1.00 37.30           N
ATOM   2902  CA  ILE B 158      31.145 -41.206  58.483  1.00 34.03           C
ATOM   2903  C   ILE B 158      32.224 -40.313  57.887  1.00 33.90           C
ATOM   2904  O   ILE B 158      33.334 -40.229  58.431  1.00 32.09           O
ATOM   2905  CB  ILE B 158      30.547 -40.576  59.760  1.00 33.46           C
ATOM   2906  CG1 ILE B 158      29.441 -41.459  60.328  1.00 36.20           C
ATOM   2907  CG2 ILE B 158      30.012 -39.178  59.498  1.00 35.40           C
ATOM   2908  CD1 ILE B 158      28.944 -40.991  61.685  1.00 35.69           C
ATOM   2909  N   THR B 159      31.895 -39.603  56.813  1.00 30.20           N
ATOM   2910  CA  THR B 159      32.898 -38.768  56.171  1.00 34.15           C
ATOM   2911  C   THR B 159      32.474 -37.309  56.146  1.00 33.74           C
ATOM   2912  O   THR B 159      31.296 -36.965  56.235  1.00 35.01           O
ATOM   2913  CB  THR B 159      33.201 -39.242  54.747  1.00 35.60           C
ATOM   2914  OG1 THR B 159      32.036 -39.058  53.937  1.00 38.70           O
```

[2006]

```
ATOM   2915  CG2 THR B 159      33.596 -40.692  54.757  1.00 34.03           C
ATOM   2916  N   CYS B 160      33.474 -36.451  56.016  1.00 34.49           N
ATOM   2917  CA  CYS B 160      33.279 -35.016  56.140  1.00 35.50           C
ATOM   2918  C   CYS B 160      34.369 -34.343  55.323  1.00 37.06           C
ATOM   2919  O   CYS B 160      35.543 -34.709  55.439  1.00 39.08           O
ATOM   2920  CB  CYS B 160      33.304 -34.607  57.625  1.00 38.41           C
ATOM   2921  SG  CYS B 160      33.214 -32.857  58.046  1.00 50.13           S
ATOM   2922  N   ARG B 161      33.986 -33.416  54.451  1.00 33.99           N
ATOM   2923  CA  ARG B 161      34.969 -32.730  53.622  1.00 38.62           C
ATOM   2924  C   ARG B 161      34.820 -31.219  53.764  1.00 42.41           C
ATOM   2925  O   ARG B 161      33.712 -30.677  53.643  1.00 36.03           O
ATOM   2926  CB  ARG B 161      34.874 -33.185  52.148  1.00 42.36           C
ATOM   2927  CG  ARG B 161      35.803 -32.392  51.243  1.00 47.60           C
ATOM   2928  CD  ARG B 161      35.993 -32.946  49.778  1.00 51.52           C
ATOM   2929  NE  ARG B 161      36.378 -34.360  49.689  1.00 57.04           N
ATOM   2930  CZ  ARG B 161      36.433 -35.096  48.566  1.00 56.50           C
ATOM   2931  NH1 ARG B 161      36.151 -34.548  47.389  1.00 60.22           N
ATOM   2932  NH2 ARG B 161      36.782 -36.393  48.613  1.00 48.06           N
ATOM   2933  N   ALA B 162      35.934 -30.544  54.039  1.00 37.72           N
ATOM   2934  CA  ALA B 162      35.933 -29.090  54.097  1.00 41.64           C
ATOM   2935  C   ALA B 162      36.258 -28.508  52.723  1.00 43.12           C
ATOM   2936  O   ALA B 162      37.016 -29.096  51.945  1.00 39.35           O
ATOM   2937  CB  ALA B 162      36.943 -28.580  55.131  1.00 37.62           C
ATOM   2938  N   SER B 163      35.707 -27.320  52.444  1.00 46.52           N
ATOM   2939  CA  SER B 163      35.919 -26.691  51.143  1.00 49.67           C
ATOM   2940  C   SER B 163      37.319 -26.098  50.997  1.00 52.16           C
ATOM   2941  O   SER B 163      37.790 -25.931  49.864  1.00 51.04           O
ATOM   2942  CB  SER B 163      34.885 -25.599  50.909  1.00 45.86           C
ATOM   2943  OG  SER B 163      35.027 -24.598  51.895  1.00 52.68           O
ATOM   2944  N   GLN B 164      37.987 -25.756  52.100  1.00 37.37           N
ATOM   2945  CA  GLN B 164      39.392 -25.377  52.059  1.00 44.48           C
ATOM   2946  C   GLN B 164      40.139 -26.184  53.104  1.00 40.68           C
ATOM   2947  O   GLN B 164      39.553 -26.633  54.090  1.00 43.08           O
ATOM   2948  CB  GLN B 164      39.597 -23.866  52.298  1.00 48.34           C
ATOM   2949  CG  GLN B 164      39.344 -22.991  51.055  1.00 52.39           C
ATOM   2950  CD  GLN B 164      37.857 -22.845  50.696  1.00 61.17           C
ATOM   2951  OE1 GLN B 164      36.970 -22.983  51.554  1.00 58.38           O
ATOM   2952  NE2 GLN B 164      37.583 -22.554  49.422  1.00 57.63           N
ATOM   2953  N   SER B 165      41.431 -26.387  52.874  1.00 32.61           N
ATOM   2954  CA  SER B 165      42.230 -27.149  53.823  1.00 37.37           C
ATOM   2955  C   SER B 165      42.126 -26.546  55.224  1.00 42.04           C
ATOM   2956  O   SER B 165      42.202 -25.325  55.394  1.00 40.91           O
ATOM   2957  CB  SER B 165      43.690 -27.189  53.373  1.00 39.32           C
ATOM   2958  OG  SER B 165      44.483 -27.912  54.302  1.00 38.70           O
ATOM   2959  N   ILE B 166      41.934 -27.408  56.226  1.00 34.75           N
ATOM   2960  CA  ILE B 166      41.875 -26.994  57.621  1.00 31.83           C
ATOM   2961  C   ILE B 166      42.925 -27.727  58.448  1.00 37.06           C
ATOM   2962  O   ILE B 166      42.837 -27.765  59.676  1.00 35.69           O
ATOM   2963  CB  ILE B 166      40.464 -27.197  58.204  1.00 35.16           C
ATOM   2964  CG1 ILE B 166      40.075 -28.682  58.224  1.00 34.04           C
ATOM   2965  CG2 ILE B 166      39.440 -26.436  57.379  1.00 32.56           C
ATOM   2966  CD1 ILE B 166      38.643 -28.938  58.712  1.00 33.65           C
ATOM   2967  N   SER B 167      43.946 -28.273  57.779  1.00 32.83           N
ATOM   2968  CA  SER B 167      44.955 -29.110  58.416  1.00 35.30           C
ATOM   2969  C   SER B 167      44.246 -30.190  59.216  1.00 36.59           C
ATOM   2970  O   SER B 167      43.400 -30.907  58.676  1.00 37.23           O
ATOM   2971  CB  SER B 167      45.897 -28.288  59.302  1.00 38.37           C
ATOM   2972  OG  SER B 167      46.468 -27.226  58.561  1.00 39.11           O
ATOM   2973  N   SER B 168      44.535 -30.287  60.508  1.00 37.32           N
ATOM   2974  CA  SER B 168      43.898 -31.293  61.342  1.00 37.71           C
ATOM   2975  C   SER B 168      42.881 -30.699  62.313  1.00 36.85           C
ATOM   2976  O   SER B 168      42.440 -31.399  63.227  1.00 36.38           O
ATOM   2977  CB  SER B 168      44.967 -32.070  62.110  1.00 40.02           C
ATOM   2978  OG  SER B 168      45.689 -32.925  61.243  1.00 45.72           O
ATOM   2979  N   TYR B 169      42.473 -29.441  62.119  1.00 35.32           N
ATOM   2980  CA  TYR B 169      41.558 -28.761  63.043  1.00 36.40           C
ATOM   2981  C   TYR B 169      40.117 -29.167  62.742  1.00 32.29           C
ATOM   2982  O   TYR B 169      39.293 -28.380  62.276  1.00 34.09           O
```

[2007]

```
ATOM   2983  CB  TYR B 169      41.734 -27.254  62.948  1.00 33.56           C
ATOM   2984  CG  TYR B 169      43.156 -26.806  63.174  1.00 41.35           C
ATOM   2985  CD1 TYR B 169      43.737 -26.859  64.443  1.00 42.93           C
ATOM   2986  CD2 TYR B 169      43.920 -26.322  62.123  1.00 37.42           C
ATOM   2987  CE1 TYR B 169      45.057 -26.442  64.650  1.00 45.56           C
ATOM   2988  CE2 TYR B 169      45.228 -25.902  62.317  1.00 44.70           C
ATOM   2989  CZ  TYR B 169      45.792 -25.961  63.577  1.00 47.31           C
ATOM   2990  OH  TYR B 169      47.093 -25.547  63.747  1.00 50.92           O
ATOM   2991  N   LEU B 170      39.820 -30.433  63.027  1.00 31.72           N
ATOM   2992  CA  LEU B 170      38.515 -31.019  62.755  1.00 29.39           C
ATOM   2993  C   LEU B 170      38.113 -31.832  63.970  1.00 32.60           C
ATOM   2994  O   LEU B 170      38.925 -32.600  64.491  1.00 29.77           O
ATOM   2995  CB  LEU B 170      38.554 -31.902  61.498  1.00 31.90           C
ATOM   2996  CG  LEU B 170      37.246 -32.468  60.916  1.00 35.42           C
ATOM   2997  CD1 LEU B 170      36.783 -33.729  61.645  1.00 32.69           C
ATOM   2998  CD2 LEU B 170      36.148 -31.417  60.933  1.00 34.17           C
ATOM   2999  N   ASN B 171      36.876 -31.641  64.430  1.00 30.36           N
ATOM   3000  CA  ASN B 171      36.358 -32.328  65.605  1.00 29.50           C
ATOM   3001  C   ASN B 171      35.095 -33.110  65.257  1.00 29.13           C
ATOM   3002  O   ASN B 171      34.340 -32.732  64.355  1.00 27.49           O
ATOM   3003  CB  ASN B 171      36.053 -31.333  66.741  1.00 32.43           C
ATOM   3004  CG  ASN B 171      37.174 -30.302  66.944  1.00 34.00           C
ATOM   3005  OD1 ASN B 171      38.272 -30.636  67.373  1.00 39.24           O
ATOM   3006  ND2 ASN B 171      36.898 -29.052  66.595  1.00 33.87           N
ATOM   3007  N   TRP B 172      34.864 -34.199  65.991  1.00 26.53           N
ATOM   3008  CA  TRP B 172      33.646 -34.995  65.875  1.00 29.03           C
ATOM   3009  C   TRP B 172      32.914 -35.015  67.215  1.00 31.26           C
ATOM   3010  O   TRP B 172      33.537 -35.210  68.263  1.00 31.12           O
ATOM   3011  CB  TRP B 172      33.950 -36.434  65.460  1.00 27.33           C
ATOM   3012  CG  TRP B 172      34.506 -36.598  64.080  1.00 29.42           C
ATOM   3013  CD1 TRP B 172      35.824 -36.731  63.730  1.00 28.56           C
ATOM   3014  CD2 TRP B 172      33.757 -36.653  62.860  1.00 26.41           C
ATOM   3015  NE1 TRP B 172      35.934 -36.883  62.365  1.00 27.79           N
ATOM   3016  CE2 TRP B 172      34.681 -36.834  61.809  1.00 28.85           C
ATOM   3017  CE3 TRP B 172      32.393 -36.581  62.555  1.00 30.28           C
ATOM   3018  CZ2 TRP B 172      34.285 -36.932  60.472  1.00 29.84           C
ATOM   3019  CZ3 TRP B 172      32.000 -36.687  61.224  1.00 29.79           C
ATOM   3020  CH2 TRP B 172      32.947 -36.859  60.203  1.00 29.80           C
ATOM   3021  N   TYR B 173      31.592 -34.847  67.179  1.00 27.21           N
ATOM   3022  CA  TYR B 173      30.765 -34.899  68.376  1.00 32.29           C
ATOM   3023  C   TYR B 173      29.667 -35.939  68.221  1.00 32.98           C
ATOM   3024  O   TYR B 173      29.136 -36.151  67.129  1.00 33.17           O
ATOM   3025  CB  TYR B 173      30.123 -33.540  68.688  1.00 29.90           C
ATOM   3026  CG  TYR B 173      31.122 -32.424  68.793  1.00 29.08           C
ATOM   3027  CD1 TYR B 173      31.553 -31.745  67.665  1.00 28.23           C
ATOM   3028  CD2 TYR B 173      31.640 -32.053  70.020  1.00 29.21           C
ATOM   3029  CE1 TYR B 173      32.476 -30.733  67.758  1.00 29.17           C
ATOM   3030  CE2 TYR B 173      32.568 -31.043  70.124  1.00 29.99           C
ATOM   3031  CZ  TYR B 173      32.977 -30.384  68.997  1.00 31.21           C
ATOM   3032  OH  TYR B 173      33.907 -29.387  69.098  1.00 30.13           O
ATOM   3033  N   GLN B 174      29.319 -36.563  69.339  1.00 31.33           N
ATOM   3034  CA  GLN B 174      28.190 -37.473  69.437  1.00 30.75           C
ATOM   3035  C   GLN B 174      27.048 -36.772  70.146  1.00 34.79           C
ATOM   3036  O   GLN B 174      27.271 -36.072  71.138  1.00 35.64           O
ATOM   3037  CB  GLN B 174      28.589 -38.715  70.224  1.00 35.17           C
ATOM   3038  CG  GLN B 174      27.458 -39.680  70.494  1.00 40.46           C
ATOM   3039  CD  GLN B 174      27.930 -40.869  71.295  1.00 42.48           C
ATOM   3040  OE1 GLN B 174      27.842 -42.017  70.839  1.00 43.21           O
ATOM   3041  NE2 GLN B 174      28.470 -40.603  72.481  1.00 38.52           N
ATOM   3042  N   GLN B 175      25.829 -36.935  69.636  1.00 36.60           N
ATOM   3043  CA  GLN B 175      24.658 -36.402  70.326  1.00 37.70           C
ATOM   3044  C   GLN B 175      23.552 -37.434  70.391  1.00 37.35           C
ATOM   3045  O   GLN B 175      23.058 -37.887  69.356  1.00 38.95           O
ATOM   3046  CB  GLN B 175      24.120 -35.135  69.668  1.00 35.99           C
ATOM   3047  CG  GLN B 175      23.013 -34.517  70.513  1.00 44.48           C
ATOM   3048  CD  GLN B 175      22.603 -33.154  70.035  1.00 37.06           C
ATOM   3049  OE1 GLN B 175      22.471 -32.934  68.841  1.00 35.36           O
ATOM   3050  NE2 GLN B 175      22.423 -32.216  70.970  1.00 35.65           N
```

[2008]

```
ATOM   3051  N   LYS B 176      23.151 -37.766  71.586  1.00 42.25           N
ATOM   3052  CA  LYS B 176      21.987 -38.589  71.846  1.00 46.83           C
ATOM   3053  C   LYS B 176      20.771 -37.707  72.101  1.00 47.45           C
ATOM   3054  O   LYS B 176      20.905 -36.539  72.490  1.00 46.45           O
ATOM   3055  CB  LYS B 176      22.265 -39.505  73.037  1.00 48.30           C
ATOM   3056  CG  LYS B 176      23.316 -40.570  72.731  1.00 50.01           C
ATOM   3057  CD  LYS B 176      24.132 -40.929  73.963  1.00 53.68           C
ATOM   3058  CE  LYS B 176      24.859 -42.247  73.787  1.00 47.94           C
ATOM   3059  NZ  LYS B 176      25.946 -42.413  74.794  1.00 46.88           N
ATOM   3060  N   PRO B 177      19.568 -38.234  71.873  1.00 51.32           N
ATOM   3061  CA  PRO B 177      18.355 -37.406  71.976  1.00 48.97           C
ATOM   3062  C   PRO B 177      18.175 -36.786  73.357  1.00 49.16           C
ATOM   3063  O   PRO B 177      18.312 -37.454  74.384  1.00 47.93           O
ATOM   3064  CB  PRO B 177      17.227 -38.389  71.645  1.00 48.30           C
ATOM   3065  CG  PRO B 177      17.840 -39.756  71.768  1.00 51.16           C
ATOM   3066  CD  PRO B 177      19.266 -39.594  71.394  1.00 52.06           C
ATOM   3067  N   GLY B 178      17.882 -35.486  73.367  1.00 48.16           N
ATOM   3068  CA  GLY B 178      17.654 -34.754  74.598  1.00 48.79           C
ATOM   3069  C   GLY B 178      18.888 -34.429  75.409  1.00 51.60           C
ATOM   3070  O   GLY B 178      18.757 -33.907  76.522  1.00 48.69           O
ATOM   3071  N   LYS B 179      20.084 -34.705  74.886  1.00 49.63           N
ATOM   3072  CA  LYS B 179      21.329 -34.500  75.607  1.00 45.35           C
ATOM   3073  C   LYS B 179      22.213 -33.496  74.874  1.00 42.81           C
ATOM   3074  O   LYS B 179      22.060 -33.255  73.674  1.00 45.15           O
ATOM   3075  CB  LYS B 179      22.071 -35.826  75.787  1.00 43.29           C
ATOM   3076  CG  LYS B 179      22.876 -35.905  77.064  1.00 54.30           C
ATOM   3077  CD  LYS B 179      22.018 -35.585  78.285  1.00 54.86           C
ATOM   3078  CE  LYS B 179      22.754 -35.916  79.582  1.00 55.65           C
ATOM   3079  NZ  LYS B 179      24.033 -35.160  79.713  1.00 59.40           N
ATOM   3080  N   ALA B 180      23.139 -32.901  75.618  1.00 41.79           N
ATOM   3081  CA  ALA B 180      24.111 -31.995  75.031  1.00 40.36           C
ATOM   3082  C   ALA B 180      25.160 -32.782  74.249  1.00 42.12           C
ATOM   3083  O   ALA B 180      25.464 -33.925  74.591  1.00 46.65           O
ATOM   3084  CB  ALA B 180      24.800 -31.168  76.114  1.00 38.47           C
ATOM   3085  N   PRO B 181      25.744 -32.184  73.209  1.00 41.15           N
ATOM   3086  CA  PRO B 181      26.790 -32.882  72.453  1.00 38.16           C
ATOM   3087  C   PRO B 181      27.990 -33.224  73.328  1.00 36.55           C
ATOM   3088  O   PRO B 181      28.202 -32.655  74.399  1.00 35.56           O
ATOM   3089  CB  PRO B 181      27.167 -31.879  71.354  1.00 34.57           C
ATOM   3090  CG  PRO B 181      25.988 -30.986  71.232  1.00 37.85           C
ATOM   3091  CD  PRO B 181      25.438 -30.867  72.627  1.00 36.40           C
ATOM   3092  N   LYS B 182      28.781 -34.179  72.848  1.00 35.08           N
ATOM   3093  CA  LYS B 182      29.921 -34.695  73.586  1.00 32.47           C
ATOM   3094  C   LYS B 182      31.087 -34.811  72.619  1.00 37.06           C
ATOM   3095  O   LYS B 182      30.928 -35.369  71.529  1.00 35.51           O
ATOM   3096  CB  LYS B 182      29.573 -36.059  74.194  1.00 36.87           C
ATOM   3097  CG  LYS B 182      30.700 -36.817  74.867  1.00 42.73           C
ATOM   3098  CD  LYS B 182      30.198 -38.205  75.293  1.00 50.23           C
ATOM   3099  CE  LYS B 182      31.335 -39.116  75.768  1.00 57.49           C
ATOM   3100  NZ  LYS B 182      30.887 -40.527  76.035  1.00 58.65           N
ATOM   3101  N   LEU B 183      32.243 -34.276  72.999  1.00 30.10           N
ATOM   3102  CA  LEU B 183      33.400 -34.355  72.121  1.00 31.00           C
ATOM   3103  C   LEU B 183      33.908 -35.789  72.049  1.00 34.30           C
ATOM   3104  O   LEU B 183      34.183 -36.411  73.077  1.00 34.12           O
ATOM   3105  CB  LEU B 183      34.506 -33.434  72.615  1.00 32.27           C
ATOM   3106  CG  LEU B 183      35.830 -33.570  71.861  1.00 35.67           C
ATOM   3107  CD1 LEU B 183      35.693 -32.955  70.473  1.00 29.48           C
ATOM   3108  CD2 LEU B 183      36.975 -32.944  72.637  1.00 30.02           C
ATOM   3109  N   LEU B 184      34.046 -36.309  70.829  1.00 37.61           N
ATOM   3110  CA  LEU B 184      34.620 -37.628  70.561  1.00 32.89           C
ATOM   3111  C   LEU B 184      36.071 -37.545  70.120  1.00 33.83           C
ATOM   3112  O   LEU B 184      36.945 -38.170  70.725  1.00 34.10           O
ATOM   3113  CB  LEU B 184      33.825 -38.344  69.469  1.00 30.57           C
ATOM   3114  CG  LEU B 184      32.435 -38.857  69.794  1.00 37.13           C
ATOM   3115  CD1 LEU B 184      31.862 -39.489  68.548  1.00 36.54           C
ATOM   3116  CD2 LEU B 184      32.477 -39.859  70.946  1.00 37.40           C
ATOM   3117  N   ILE B 185      36.337 -36.773  69.078  1.00 26.99           N
ATOM   3118  CA  ILE B 185      37.638 -36.726  68.437  1.00 29.63           C
```

[2009]

```
ATOM   3119  C   ILE B 185      37.974 -35.272  68.211  1.00 32.45           C
ATOM   3120  O   ILE B 185      37.118 -34.504  67.763  1.00 30.66           O
ATOM   3121  CB  ILE B 185      37.637 -37.478  67.083  1.00 31.03           C
ATOM   3122  CG1 ILE B 185      37.217 -38.938  67.257  1.00 35.48           C
ATOM   3123  CG2 ILE B 185      38.982 -37.376  66.405  1.00 30.94           C
ATOM   3124  CD1 ILE B 185      38.251 -39.787  67.958  1.00 36.88           C
ATOM   3125  N   TYR B 186      39.211 -34.894  68.514  1.00 29.98           N
ATOM   3126  CA  TYR B 186      39.726 -33.582  68.175  1.00 34.23           C
ATOM   3127  C   TYR B 186      41.048 -33.752  67.447  1.00 33.17           C
ATOM   3128  O   TYR B 186      41.711 -34.783  67.562  1.00 37.61           O
ATOM   3129  CB  TYR B 186      39.950 -32.708  69.419  1.00 39.31           C
ATOM   3130  CG  TYR B 186      41.097 -33.174  70.280  1.00 38.07           C
ATOM   3131  CD1 TYR B 186      40.917 -34.175  71.229  1.00 40.87           C
ATOM   3132  CD2 TYR B 186      42.362 -32.608  70.146  1.00 41.69           C
ATOM   3133  CE1 TYR B 186      41.969 -34.604  72.021  1.00 44.37           C
ATOM   3134  CE2 TYR B 186      43.424 -33.028  70.930  1.00 43.13           C
ATOM   3135  CZ  TYR B 186      43.225 -34.024  71.867  1.00 47.79           C
ATOM   3136  OH  TYR B 186      44.283 -34.444  72.650  1.00 49.34           O
ATOM   3137  N   ALA B 187      41.446 -32.699  66.737  1.00 34.04           N
ATOM   3138  CA  ALA B 187      42.676 -32.696  65.947  1.00 37.37           C
ATOM   3139  C   ALA B 187      42.679 -33.857  64.955  1.00 37.34           C
ATOM   3140  O   ALA B 187      43.692 -34.543  64.775  1.00 31.88           O
ATOM   3141  CB  ALA B 187      43.924 -32.719  66.834  1.00 35.04           C
ATOM   3142  N   ALA B 188      41.509 -34.093  64.345  1.00 36.02           N
ATOM   3143  CA  ALA B 188      41.286 -35.075  63.283  1.00 33.60           C
ATOM   3144  C   ALA B 188      41.367 -36.515  63.770  1.00 33.75           C
ATOM   3145  O   ALA B 188      40.574 -37.358  63.335  1.00 36.80           O
ATOM   3146  CB  ALA B 188      42.272 -34.876  62.130  1.00 35.39           C
ATOM   3147  N   SER B 189      42.300 -36.812  64.679  1.00 32.43           N
ATOM   3148  CA  SER B 189      42.562 -38.191  65.044  1.00 28.01           C
ATOM   3149  C   SER B 189      42.804 -38.450  66.520  1.00 38.94           C
ATOM   3150  O   SER B 189      43.007 -39.615  66.882  1.00 37.61           O
ATOM   3151  CB  SER B 189      43.774 -38.699  64.267  1.00 36.71           C
ATOM   3152  OG  SER B 189      44.901 -37.925  64.603  1.00 37.39           O
ATOM   3153  N   SER B 190      42.827 -37.428  67.379  1.00 35.29           N
ATOM   3154  CA  SER B 190      43.086 -37.654  68.790  1.00 35.85           C
ATOM   3155  C   SER B 190      41.789 -38.011  69.502  1.00 35.74           C
ATOM   3156  O   SER B 190      40.782 -37.311  69.362  1.00 39.71           O
ATOM   3157  CB  SER B 190      43.733 -36.429  69.435  1.00 39.39           C
ATOM   3158  OG  SER B 190      44.975 -36.150  68.817  1.00 41.13           O
ATOM   3159  N   LEU B 191      41.819 -39.106  70.253  1.00 37.49           N
ATOM   3160  CA  LEU B 191      40.682 -39.526  71.056  1.00 38.71           C
ATOM   3161  C   LEU B 191      40.599 -38.689  72.325  1.00 44.69           C
ATOM   3162  O   LEU B 191      41.605 -38.468  73.006  1.00 44.12           O
ATOM   3163  CB  LEU B 191      40.805 -41.004  71.416  1.00 40.29           C
ATOM   3164  CG  LEU B 191      39.998 -41.976  70.564  1.00 43.83           C
ATOM   3165  CD1 LEU B 191      40.604 -43.364  70.617  1.00 48.02           C
ATOM   3166  CD2 LEU B 191      38.568 -42.006  71.060  1.00 44.51           C
ATOM   3167  N   GLN B 192      39.399 -38.227  72.641  1.00 45.98           N
ATOM   3168  CA  GLN B 192      39.198 -37.524  73.893  1.00 43.59           C
ATOM   3169  C   GLN B 192      39.264 -38.516  75.049  1.00 49.84           C
ATOM   3170  O   GLN B 192      38.866 -39.681  74.924  1.00 48.50           O
ATOM   3171  CB  GLN B 192      37.856 -36.790  73.871  1.00 43.87           C
ATOM   3172  CG  GLN B 192      37.484 -36.062  75.169  1.00 49.80           C
ATOM   3173  CD  GLN B 192      38.402 -34.896  75.475  1.00 48.96           C
ATOM   3174  OE1 GLN B 192      39.122 -34.409  74.603  1.00 54.05           O
ATOM   3175  NE2 GLN B 192      38.371 -34.432  76.717  1.00 57.87           N
ATOM   3176  N   SER B 193      39.810 -38.055  76.172  1.00 51.72           N
ATOM   3177  CA  SER B 193      39.904 -38.900  77.355  1.00 50.72           C
ATOM   3178  C   SER B 193      38.523 -39.411  77.759  1.00 50.30           C
ATOM   3179  O   SER B 193      37.565 -38.638  77.864  1.00 50.15           O
ATOM   3180  CB  SER B 193      40.561 -38.124  78.500  1.00 51.87           C
ATOM   3181  OG  SER B 193      40.023 -36.819  78.606  1.00 58.98           O
ATOM   3182  N   GLY B 194      38.424 -40.724  77.981  1.00 49.08           N
ATOM   3183  CA  GLY B 194      37.178 -41.349  78.364  1.00 49.20           C
ATOM   3184  C   GLY B 194      36.331 -41.863  77.218  1.00 46.32           C
ATOM   3185  O   GLY B 194      35.292 -42.491  77.470  1.00 46.04           O
ATOM   3186  N   VAL B 195      36.719 -41.597  75.976  1.00 46.32           N
```

[2010]

```
ATOM   3187  CA  VAL B 195      35.930 -42.013  74.818  1.00 45.46           C
ATOM   3188  C   VAL B 195      36.359 -43.425  74.430  1.00 45.18           C
ATOM   3189  O   VAL B 195      37.567 -43.689  74.318  1.00 44.67           O
ATOM   3190  CB  VAL B 195      36.096 -41.027  73.651  1.00 42.08           C
ATOM   3191  CG1 VAL B 195      35.332 -41.518  72.433  1.00 46.09           C
ATOM   3192  CG2 VAL B 195      35.624 -39.651  74.054  1.00 41.42           C
ATOM   3193  N   PRO B 196      35.425 -44.355  74.209  1.00 44.59           N
ATOM   3194  CA  PRO B 196      35.820 -45.741  73.910  1.00 46.10           C
ATOM   3195  C   PRO B 196      36.741 -45.840  72.700  1.00 43.72           C
ATOM   3196  O   PRO B 196      36.685 -45.032  71.770  1.00 42.36           O
ATOM   3197  CB  PRO B 196      34.484 -46.444  73.650  1.00 43.97           C
ATOM   3198  CG  PRO B 196      33.469 -45.621  74.391  1.00 46.21           C
ATOM   3199  CD  PRO B 196      33.961 -44.200  74.296  1.00 47.43           C
ATOM   3200  N   SER B 197      37.597 -46.862  72.727  1.00 46.93           N
ATOM   3201  CA  SER B 197      38.587 -47.096  71.681  1.00 48.65           C
ATOM   3202  C   SER B 197      37.983 -47.602  70.372  1.00 43.35           C
ATOM   3203  O   SER B 197      38.710 -47.705  69.378  1.00 47.02           O
ATOM   3204  CB  SER B 197      39.638 -48.096  72.192  1.00 56.75           C
ATOM   3205  OG  SER B 197      40.314 -48.770  71.137  1.00 59.89           O
ATOM   3206  N   ARG B 198      36.691 -47.922  70.340  1.00 40.39           N
ATOM   3207  CA  ARG B 198      36.074 -48.283  69.072  1.00 41.43           C
ATOM   3208  C   ARG B 198      35.839 -47.072  68.179  1.00 41.98           C
ATOM   3209  O   ARG B 198      35.553 -47.247  66.992  1.00 34.19           O
ATOM   3210  CB  ARG B 198      34.763 -49.021  69.327  1.00 40.33           C
ATOM   3211  CG  ARG B 198      33.703 -48.199  70.029  1.00 41.79           C
ATOM   3212  CD  ARG B 198      32.425 -49.007  70.147  1.00 41.93           C
ATOM   3213  NE  ARG B 198      31.334 -48.254  70.752  1.00 50.84           N
ATOM   3214  CZ  ARG B 198      31.172 -48.073  72.061  1.00 52.65           C
ATOM   3215  NH1 ARG B 198      32.029 -48.595  72.926  1.00 49.33           N
ATOM   3216  NH2 ARG B 198      30.142 -47.367  72.504  1.00 52.62           N
ATOM   3217  N   PHE B 199      35.970 -45.856  68.712  1.00 42.51           N
ATOM   3218  CA  PHE B 199      35.938 -44.641  67.906  1.00 37.41           C
ATOM   3219  C   PHE B 199      37.345 -44.295  67.441  1.00 38.56           C
ATOM   3220  O   PHE B 199      38.290 -44.312  68.237  1.00 42.32           O
ATOM   3221  CB  PHE B 199      35.349 -43.474  68.705  1.00 38.07           C
ATOM   3222  CG  PHE B 199      33.901 -43.635  69.005  1.00 37.02           C
ATOM   3223  CD1 PHE B 199      32.947 -43.171  68.115  1.00 33.32           C
ATOM   3224  CD2 PHE B 199      33.487 -44.281  70.153  1.00 39.44           C
ATOM   3225  CE1 PHE B 199      31.610 -43.337  68.367  1.00 35.16           C
ATOM   3226  CE2 PHE B 199      32.147 -44.450  70.417  1.00 44.81           C
ATOM   3227  CZ  PHE B 199      31.203 -43.978  69.522  1.00 43.63           C
ATOM   3228  N   SER B 200      37.476 -43.963  66.157  1.00 36.66           N
ATOM   3229  CA  SER B 200      38.732 -43.461  65.621  1.00 34.02           C
ATOM   3230  C   SER B 200      38.421 -42.458  64.525  1.00 31.19           C
ATOM   3231  O   SER B 200      37.327 -42.445  63.956  1.00 35.54           O
ATOM   3232  CB  SER B 200      39.620 -44.583  65.076  1.00 38.68           C
ATOM   3233  OG  SER B 200      39.011 -45.204  63.957  1.00 39.82           O
ATOM   3234  N   GLY B 201      39.393 -41.599  64.253  1.00 31.05           N
ATOM   3235  CA  GLY B 201      39.268 -40.645  63.175  1.00 33.55           C
ATOM   3236  C   GLY B 201      40.572 -40.560  62.411  1.00 32.57           C
ATOM   3237  O   GLY B 201      41.641 -40.892  62.925  1.00 37.40           O
ATOM   3238  N   SER B 202      40.467 -40.080  61.178  1.00 31.57           N
ATOM   3239  CA  SER B 202      41.633 -39.911  60.333  1.00 32.71           C
ATOM   3240  C   SER B 202      41.355 -38.795  59.341  1.00 30.44           C
ATOM   3241  O   SER B 202      40.213 -38.386  59.125  1.00 28.23           O
ATOM   3242  CB  SER B 202      41.998 -41.215  59.591  1.00 39.17           C
ATOM   3243  OG  SER B 202      40.997 -41.595  58.655  1.00 35.21           O
ATOM   3244  N   GLY B 203      42.421 -38.325  58.720  1.00 33.72           N
ATOM   3245  CA  GLY B 203      42.310 -37.333  57.679  1.00 33.18           C
ATOM   3246  C   GLY B 203      43.217 -36.167  57.973  1.00 39.59           C
ATOM   3247  O   GLY B 203      43.655 -35.981  59.113  1.00 34.67           O
ATOM   3248  N   SER B 204      43.535 -35.398  56.940  1.00 40.14           N
ATOM   3249  CA  SER B 204      44.226 -34.131  57.102  1.00 40.89           C
ATOM   3250  C   SER B 204      43.939 -33.316  55.863  1.00 41.02           C
ATOM   3251  O   SER B 204      43.634 -33.868  54.806  1.00 43.31           O
ATOM   3252  CB  SER B 204      45.740 -34.307  57.286  1.00 47.88           C
ATOM   3253  OG  SER B 204      46.353 -34.702  56.066  1.00 50.08           O
ATOM   3254  N   GLY B 205      44.006 -32.003  56.005  1.00 42.08           N
```

[2011]

```
ATOM   3255  CA  GLY B 205      43.736 -31.182  54.851  1.00 40.24           C
ATOM   3256  C   GLY B 205      42.259 -30.951  54.661  1.00 36.96           C
ATOM   3257  O   GLY B 205      41.628 -30.166  55.379  1.00 41.22           O
ATOM   3258  N   THR B 206      41.685 -31.676  53.708  1.00 38.07           N
ATOM   3259  CA  THR B 206      40.306 -31.466  53.297  1.00 35.15           C
ATOM   3260  C   THR B 206      39.380 -32.646  53.577  1.00 40.83           C
ATOM   3261  O   THR B 206      38.159 -32.484  53.505  1.00 40.56           O
ATOM   3262  CB  THR B 206      40.261 -31.134  51.797  1.00 40.33           C
ATOM   3263  OG1 THR B 206      38.906 -31.064  51.331  1.00 48.19           O
ATOM   3264  CG2 THR B 206      41.034 -32.190  50.997  1.00 34.92           C
ATOM   3265  N   ASP B 207      39.908 -33.826  53.860  1.00 37.19           N
ATOM   3266  CA  ASP B 207      39.096 -35.036  53.893  1.00 37.18           C
ATOM   3267  C   ASP B 207      39.214 -35.735  55.236  1.00 32.28           C
ATOM   3268  O   ASP B 207      40.322 -36.027  55.699  1.00 30.11           O
ATOM   3269  CB  ASP B 207      39.507 -36.000  52.774  1.00 45.19           C
ATOM   3270  CG  ASP B 207      39.263 -35.422  51.383  1.00 49.99           C
ATOM   3271  OD1 ASP B 207      38.322 -34.621  51.206  1.00 52.13           O
ATOM   3272  OD2 ASP B 207      40.045 -35.746  50.436  1.00 52.47           O
ATOM   3273  N   PHE B 208      38.072 -36.065  55.828  1.00 26.40           N
ATOM   3274  CA  PHE B 208      38.093 -36.600  57.173  1.00 30.24           C
ATOM   3275  C   PHE B 208      37.059 -37.701  57.305  1.00 30.86           C
ATOM   3276  O   PHE B 208      35.989 -37.657  56.696  1.00 28.65           O
ATOM   3277  CB  PHE B 208      37.837 -35.466  58.189  1.00 33.64           C
ATOM   3278  CG  PHE B 208      38.789 -34.310  58.043  1.00 29.55           C
ATOM   3279  CD1 PHE B 208      38.502 -33.256  57.182  1.00 30.11           C
ATOM   3280  CD2 PHE B 208      39.991 -34.302  58.732  1.00 30.21           C
ATOM   3281  CE1 PHE B 208      39.389 -32.205  57.034  1.00 30.89           C
ATOM   3282  CE2 PHE B 208      40.880 -33.253  58.591  1.00 31.69           C
ATOM   3283  CZ  PHE B 208      40.580 -32.204  57.745  1.00 32.61           C
ATOM   3284  N   THR B 209      37.379 -38.678  58.138  1.00 31.90           N
ATOM   3285  CA  THR B 209      36.481 -39.790  58.368  1.00 31.26           C
ATOM   3286  C   THR B 209      36.443 -40.080  59.856  1.00 30.39           C
ATOM   3287  O   THR B 209      37.466 -39.984  60.544  1.00 32.17           O
ATOM   3288  CB  THR B 209      36.920 -41.045  57.598  1.00 28.29           C
ATOM   3289  OG1 THR B 209      38.233 -41.405  58.016  1.00 37.05           O
ATOM   3290  CG2 THR B 209      36.955 -40.763  56.125  1.00 29.73           C
ATOM   3291  N   LEU B 210      35.256 -40.443  60.328  1.00 27.91           N
ATOM   3292  CA  LEU B 210      35.039 -40.979  61.660  1.00 30.32           C
ATOM   3293  C   LEU B 210      34.601 -42.418  61.497  1.00 26.88           C
ATOM   3294  O   LEU B 210      33.660 -42.696  60.747  1.00 27.01           O
ATOM   3295  CB  LEU B 210      33.956 -40.194  62.407  1.00 26.43           C
ATOM   3296  CG  LEU B 210      33.525 -40.815  63.736  1.00 30.06           C
ATOM   3297  CD1 LEU B 210      34.622 -40.636  64.762  1.00 28.37           C
ATOM   3298  CD2 LEU B 210      32.202 -40.241  64.244  1.00 25.15           C
ATOM   3299  N   THR B 211      35.252 -43.323  62.215  1.00 26.24           N
ATOM   3300  CA  THR B 211      34.923 -44.738  62.143  1.00 31.78           C
ATOM   3301  C   THR B 211      34.571 -45.247  63.531  1.00 34.00           C
ATOM   3302  O   THR B 211      35.276 -44.961  64.506  1.00 36.79           O
ATOM   3303  CB  THR B 211      36.087 -45.552  61.568  1.00 35.34           C
ATOM   3304  OG1 THR B 211      36.518 -44.963  60.336  1.00 34.70           O
ATOM   3305  CG2 THR B 211      35.651 -46.990  61.295  1.00 34.93           C
ATOM   3306  N   ILE B 212      33.487 -46.000  63.606  1.00 31.92           N
ATOM   3307  CA  ILE B 212      33.133 -46.785  64.778  1.00 38.65           C
ATOM   3308  C   ILE B 212      33.381 -48.242  64.400  1.00 35.95           C
ATOM   3309  O   ILE B 212      32.622 -48.831  63.619  1.00 35.62           O
ATOM   3310  CB  ILE B 212      31.680 -46.529  65.195  1.00 39.19           C
ATOM   3311  CG1 ILE B 212      31.407 -45.020  65.172  1.00 34.03           C
ATOM   3312  CG2 ILE B 212      31.420 -47.111  66.567  1.00 38.64           C
ATOM   3313  CD1 ILE B 212      29.940 -44.639  65.311  1.00 37.60           C
ATOM   3314  N   SER B 213      34.457 -48.821  64.940  1.00 35.24           N
ATOM   3315  CA  SER B 213      34.930 -50.106  64.437  1.00 40.48           C
ATOM   3316  C   SER B 213      33.915 -51.214  64.651  1.00 41.61           C
ATOM   3317  O   SER B 213      33.874 -52.171  63.866  1.00 40.00           O
ATOM   3318  CB  SER B 213      36.252 -50.482  65.097  1.00 42.04           C
ATOM   3319  OG  SER B 213      36.050 -50.787  66.458  1.00 44.07           O
ATOM   3320  N   SER B 214      33.106 -51.119  65.703  1.00 37.62           N
ATOM   3321  CA  SER B 214      32.049 -52.101  65.945  1.00 44.12           C
ATOM   3322  C   SER B 214      30.924 -51.409  66.696  1.00 45.04           C
```

[2012]

```
ATOM   3323  O   SER B 214      31.107 -50.968  67.836  1.00 46.55           O
ATOM   3324  CB  SER B 214      32.552 -53.317  66.714  1.00 42.06           C
ATOM   3325  OG  SER B 214      31.469 -54.215  66.931  1.00 44.09           O
ATOM   3326  N   LEU B 215      29.775 -51.308  66.045  1.00 45.33           N
ATOM   3327  CA  LEU B 215      28.650 -50.545  66.563  1.00 49.16           C
ATOM   3328  C   LEU B 215      28.066 -51.199  67.819  1.00 52.65           C
ATOM   3329  O   LEU B 215      27.695 -52.378  67.805  1.00 50.57           O
ATOM   3330  CB  LEU B 215      27.601 -50.428  65.467  1.00 46.86           C
ATOM   3331  CG  LEU B 215      26.969 -49.056  65.342  1.00 54.47           C
ATOM   3332  CD1 LEU B 215      28.097 -48.054  65.178  1.00 44.29           C
ATOM   3333  CD2 LEU B 215      26.065 -49.054  64.127  1.00 54.62           C
ATOM   3334  N   GLN B 216      27.985 -50.439  68.905  1.00 53.16           N
ATOM   3335  CA  GLN B 216      27.321 -50.920  70.106  1.00 52.18           C
ATOM   3336  C   GLN B 216      25.932 -50.316  70.206  1.00 56.52           C
ATOM   3337  O   GLN B 216      25.614 -49.359  69.496  1.00 56.75           O
ATOM   3338  CB  GLN B 216      28.138 -50.551  71.341  1.00 51.12           C
ATOM   3339  CG  GLN B 216      29.579 -50.975  71.238  1.00 53.32           C
ATOM   3340  CD  GLN B 216      29.895 -52.191  72.074  1.00 54.86           C
ATOM   3341  OE1 GLN B 216      29.342 -53.277  71.853  1.00 52.25           O
ATOM   3342  NE2 GLN B 216      30.796 -52.020  73.049  1.00 52.32           N
ATOM   3343  N   PRO B 217      25.047 -50.881  71.037  1.00 61.41           N
ATOM   3344  CA  PRO B 217      23.676 -50.337  71.104  1.00 60.22           C
ATOM   3345  C   PRO B 217      23.611 -48.877  71.543  1.00 57.90           C
ATOM   3346  O   PRO B 217      22.750 -48.137  71.051  1.00 56.62           O
ATOM   3347  CB  PRO B 217      22.980 -51.272  72.101  1.00 59.22           C
ATOM   3348  CG  PRO B 217      23.719 -52.568  71.959  1.00 50.62           C
ATOM   3349  CD  PRO B 217      25.160 -52.167  71.754  1.00 53.73           C
ATOM   3350  N   GLU B 218      24.497 -48.433  72.441  1.00 52.09           N
ATOM   3351  CA  GLU B 218      24.467 -47.044  72.883  1.00 54.53           C
ATOM   3352  C   GLU B 218      25.007 -46.077  71.838  1.00 57.03           C
ATOM   3353  O   GLU B 218      24.945 -44.864  72.058  1.00 57.27           O
ATOM   3354  CB  GLU B 218      25.259 -46.862  74.186  1.00 57.23           C
ATOM   3355  CG  GLU B 218      26.679 -47.409  74.160  1.00 62.45           C
ATOM   3356  CD  GLU B 218      26.752 -48.899  74.488  1.00 65.65           C
ATOM   3357  OE1 GLU B 218      25.829 -49.641  74.084  1.00 61.00           O
ATOM   3358  OE2 GLU B 218      27.741 -49.328  75.135  1.00 65.69           O
ATOM   3359  N   ASP B 219      25.555 -46.570  70.730  1.00 53.28           N
ATOM   3360  CA  ASP B 219      26.171 -45.695  69.744  1.00 52.51           C
ATOM   3361  C   ASP B 219      25.197 -45.179  68.694  1.00 49.75           C
ATOM   3362  O   ASP B 219      25.582 -44.320  67.891  1.00 44.57           O
ATOM   3363  CB  ASP B 219      27.328 -46.412  69.043  1.00 49.43           C
ATOM   3364  CG  ASP B 219      28.449 -46.763  69.991  1.00 54.04           C
ATOM   3365  OD1 ASP B 219      28.548 -46.101  71.045  1.00 53.68           O
ATOM   3366  OD2 ASP B 219      29.238 -47.691  69.676  1.00 52.61           O
ATOM   3367  N   PHE B 220      23.959 -45.667  68.676  1.00 50.74           N
ATOM   3368  CA  PHE B 220      22.959 -45.142  67.751  1.00 49.04           C
ATOM   3369  C   PHE B 220      22.564 -43.745  68.211  1.00 49.70           C
ATOM   3370  O   PHE B 220      21.962 -43.579  69.275  1.00 48.90           O
ATOM   3371  CB  PHE B 220      21.758 -46.080  67.681  1.00 54.31           C
ATOM   3372  CG  PHE B 220      22.103 -47.454  67.166  1.00 60.10           C
ATOM   3373  CD1 PHE B 220      22.127 -47.721  65.804  1.00 59.52           C
ATOM   3374  CD2 PHE B 220      22.429 -48.475  68.048  1.00 62.58           C
ATOM   3375  CE1 PHE B 220      22.464 -48.988  65.332  1.00 60.67           C
ATOM   3376  CE2 PHE B 220      22.763 -49.740  67.585  1.00 62.22           C
ATOM   3377  CZ  PHE B 220      22.779 -49.998  66.226  1.00 59.98           C
ATOM   3378  N   ALA B 221      22.922 -42.744  67.418  1.00 51.07           N
ATOM   3379  CA  ALA B 221      22.861 -41.335  67.806  1.00 41.56           C
ATOM   3380  C   ALA B 221      23.116 -40.501  66.554  1.00 38.97           C
ATOM   3381  O   ALA B 221      23.171 -41.030  65.435  1.00 37.58           O
ATOM   3382  CB  ALA B 221      23.868 -41.025  68.913  1.00 43.14           C
ATOM   3383  N   THR B 222      23.256 -39.193  66.739  1.00 34.29           N
ATOM   3384  CA  THR B 222      23.649 -38.291  65.667  1.00 36.73           C
ATOM   3385  C   THR B 222      25.094 -37.847  65.886  1.00 35.94           C
ATOM   3386  O   THR B 222      25.505 -37.581  67.021  1.00 35.94           O
ATOM   3387  CB  THR B 222      22.714 -37.081  65.602  1.00 35.59           C
ATOM   3388  OG1 THR B 222      21.362 -37.540  65.527  1.00 35.32           O
ATOM   3389  CG2 THR B 222      22.998 -36.258  64.345  1.00 34.17           C
ATOM   3390  N   TYR B 223      25.872 -37.802  64.803  1.00 31.67           N
```

[2013]

```
ATOM   3391  CA  TYR B 223      27.285 -37.440  64.841  1.00 31.60           C
ATOM   3392  C   TYR B 223      27.508 -36.194  63.997  1.00 32.74           C
ATOM   3393  O   TYR B 223      26.922 -36.061  62.917  1.00 35.32           O
ATOM   3394  CB  TYR B 223      28.171 -38.609  64.350  1.00 30.26           C
ATOM   3395  CG  TYR B 223      28.052 -39.800  65.269  1.00 31.44           C
ATOM   3396  CD1 TYR B 223      27.055 -40.747  65.081  1.00 31.91           C
ATOM   3397  CD2 TYR B 223      28.892 -39.940  66.370  1.00 27.77           C
ATOM   3398  CE1 TYR B 223      26.918 -41.813  65.943  1.00 34.45           C
ATOM   3399  CE2 TYR B 223      28.764 -41.004  67.231  1.00 30.40           C
ATOM   3400  CZ  TYR B 223      27.774 -41.937  67.017  1.00 32.14           C
ATOM   3401  OH  TYR B 223      27.645 -43.005  67.873  1.00 34.86           O
ATOM   3402  N   TYR B 224      28.300 -35.254  64.520  1.00 27.72           N
ATOM   3403  CA  TYR B 224      28.596 -34.005  63.830  1.00 26.56           C
ATOM   3404  C   TYR B 224      30.100 -33.805  63.722  1.00 31.65           C
ATOM   3405  O   TYR B 224      30.822 -34.002  64.706  1.00 28.41           O
ATOM   3406  CB  TYR B 224      27.987 -32.823  64.565  1.00 26.26           C
ATOM   3407  CG  TYR B 224      26.484 -32.857  64.719  1.00 30.93           C
ATOM   3408  CD1 TYR B 224      25.894 -33.452  65.829  1.00 30.27           C
ATOM   3409  CD2 TYR B 224      25.655 -32.267  63.779  1.00 31.40           C
ATOM   3410  CE1 TYR B 224      24.518 -33.470  65.986  1.00 29.39           C
ATOM   3411  CE2 TYR B 224      24.271 -32.276  63.941  1.00 32.40           C
ATOM   3412  CZ  TYR B 224      23.719 -32.881  65.040  1.00 27.04           C
ATOM   3413  OH  TYR B 224      22.360 -32.900  65.196  1.00 32.90           O
ATOM   3414  N   CYS B 225      30.573 -33.402  62.539  1.00 33.06           N
ATOM   3415  CA  CYS B 225      31.931 -32.880  62.427  1.00 27.67           C
ATOM   3416  C   CYS B 225      31.888 -31.371  62.559  1.00 29.09           C
ATOM   3417  O   CYS B 225      30.830 -30.747  62.436  1.00 27.30           O
ATOM   3418  CB  CYS B 225      32.609 -33.274  61.102  1.00 30.77           C
ATOM   3419  SG  CYS B 225      31.857 -32.594  59.608  1.00 39.22           S
ATOM   3420  N   GLN B 226      33.054 -30.786  62.834  1.00 29.38           N
ATOM   3421  CA  GLN B 226      33.136 -29.344  63.040  1.00 27.91           C
ATOM   3422  C   GLN B 226      34.564 -28.882  62.804  1.00 25.81           C
ATOM   3423  O   GLN B 226      35.499 -29.457  63.360  1.00 27.48           O
ATOM   3424  CB  GLN B 226      32.671 -28.974  64.450  1.00 31.01           C
ATOM   3425  CG  GLN B 226      32.681 -27.487  64.767  1.00 25.97           C
ATOM   3426  CD  GLN B 226      33.790 -27.142  65.726  1.00 35.30           C
ATOM   3427  OE1 GLN B 226      34.162 -27.947  66.579  1.00 36.33           O
ATOM   3428  NE2 GLN B 226      34.314 -25.936  65.609  1.00 42.05           N
ATOM   3429  N   GLN B 227      34.736 -27.873  61.961  1.00 25.36           N
ATOM   3430  CA  GLN B 227      36.049 -27.289  61.773  1.00 26.41           C
ATOM   3431  C   GLN B 227      36.269 -26.198  62.812  1.00 31.45           C
ATOM   3432  O   GLN B 227      35.364 -25.411  63.102  1.00 34.46           O
ATOM   3433  CB  GLN B 227      36.197 -26.725  60.360  1.00 28.67           C
ATOM   3434  CG  GLN B 227      35.307 -25.553  60.009  1.00 33.47           C
ATOM   3435  CD  GLN B 227      35.911 -24.202  60.393  1.00 32.27           C
ATOM   3436  OE1 GLN B 227      37.051 -24.115  60.849  1.00 36.42           O
ATOM   3437  NE2 GLN B 227      35.155 -23.150  60.185  1.00 32.01           N
ATOM   3438  N   SER B 228      37.462 -26.176  63.394  1.00 32.50           N
ATOM   3439  CA  SER B 228      37.864 -25.107  64.302  1.00 37.88           C
ATOM   3440  C   SER B 228      39.097 -24.390  63.761  1.00 40.27           C
ATOM   3441  O   SER B 228      39.893 -23.827  64.517  1.00 42.04           O
ATOM   3442  CB  SER B 228      38.112 -25.647  65.708  1.00 34.85           C
ATOM   3443  OG  SER B 228      39.035 -26.717  65.680  1.00 42.57           O
ATOM   3444  N   TYR B 229      39.259 -24.423  62.437  1.00 40.13           N
ATOM   3445  CA  TYR B 229      40.336 -23.694  61.783  1.00 40.87           C
ATOM   3446  C   TYR B 229      40.113 -22.190  61.888  1.00 44.64           C
ATOM   3447  O   TYR B 229      41.020 -21.430  62.256  1.00 39.69           O
ATOM   3448  CB  TYR B 229      40.419 -24.132  60.319  1.00 37.80           C
ATOM   3449  CG  TYR B 229      41.547 -23.500  59.558  1.00 36.96           C
ATOM   3450  CD1 TYR B 229      42.838 -23.995  59.656  1.00 40.25           C
ATOM   3451  CD2 TYR B 229      41.321 -22.398  58.746  1.00 38.17           C
ATOM   3452  CE1 TYR B 229      43.879 -23.414  58.958  1.00 41.52           C
ATOM   3453  CE2 TYR B 229      42.350 -21.802  58.049  1.00 38.02           C
ATOM   3454  CZ  TYR B 229      43.628 -22.311  58.159  1.00 44.17           C
ATOM   3455  OH  TYR B 229      44.659 -21.716  57.462  1.00 50.27           O
ATOM   3456  N   SER B 230      38.900 -21.746  61.589  1.00 40.65           N
ATOM   3457  CA  SER B 230      38.632 -20.326  61.529  1.00 40.58           C
ATOM   3458  C   SER B 230      37.171 -20.076  61.855  1.00 43.88           C
```

[2014]

```
ATOM   3459  O   SER B 230      36.299 -20.887  61.523  1.00 38.54           O
ATOM   3460  CB  SER B 230      38.968 -19.740  60.158  1.00 46.32           C
ATOM   3461  OG  SER B 230      38.730 -18.338  60.157  1.00 55.77           O
ATOM   3462  N   THR B 231      36.938 -18.955  62.535  1.00 39.07           N
ATOM   3463  CA  THR B 231      35.605 -18.458  62.822  1.00 34.92           C
ATOM   3464  C   THR B 231      34.942 -17.981  61.531  1.00 36.51           C
ATOM   3465  O   THR B 231      35.613 -17.409  60.669  1.00 40.96           O
ATOM   3466  CB  THR B 231      35.722 -17.298  63.829  1.00 35.91           C
ATOM   3467  OG1 THR B 231      35.303 -17.737  65.129  1.00 34.17           O
ATOM   3468  CG2 THR B 231      34.926 -16.067  63.373  1.00 31.03           C
ATOM   3469  N   PRO B 232      33.627 -18.202  61.353  1.00 36.28           N
ATOM   3470  CA  PRO B 232      32.653 -18.924  62.185  1.00 33.88           C
ATOM   3471  C   PRO B 232      32.892 -20.420  62.234  1.00 33.61           C
ATOM   3472  O   PRO B 232      33.081 -21.015  61.181  1.00 34.61           O
ATOM   3473  CB  PRO B 232      31.313 -18.638  61.487  1.00 37.92           C
ATOM   3474  CG  PRO B 232      31.557 -17.428  60.646  1.00 40.45           C
ATOM   3475  CD  PRO B 232      32.981 -17.534  60.212  1.00 36.50           C
ATOM   3476  N   LEU B 233      32.823 -21.027  63.413  1.00 28.58           N
ATOM   3477  CA  LEU B 233      33.076 -22.454  63.524  1.00 30.54           C
ATOM   3478  C   LEU B 233      31.890 -23.224  62.954  1.00 32.77           C
ATOM   3479  O   LEU B 233      30.770 -23.108  63.449  1.00 41.23           O
ATOM   3480  CB  LEU B 233      33.321 -22.846  64.975  1.00 32.86           C
ATOM   3481  CG  LEU B 233      34.352 -22.019  65.753  1.00 34.71           C
ATOM   3482  CD1 LEU B 233      34.302 -22.421  67.217  1.00 37.31           C
ATOM   3483  CD2 LEU B 233      35.765 -22.179  65.198  1.00 35.36           C
ATOM   3484  N   THR B 234      32.110 -23.964  61.879  1.00 34.53           N
ATOM   3485  CA  THR B 234      31.013 -24.583  61.151  1.00 32.03           C
ATOM   3486  C   THR B 234      30.849 -26.024  61.604  1.00 28.62           C
ATOM   3487  O   THR B 234      31.837 -26.756  61.712  1.00 29.04           O
ATOM   3488  CB  THR B 234      31.265 -24.523  59.647  1.00 33.73           C
ATOM   3489  OG1 THR B 234      31.466 -23.166  59.261  1.00 37.67           O
ATOM   3490  CG2 THR B 234      30.073 -25.063  58.899  1.00 41.10           C
ATOM   3491  N   PHE B 235      29.609 -26.426  61.867  1.00 26.02           N
ATOM   3492  CA  PHE B 235      29.296 -27.826  62.100  1.00 27.64           C
ATOM   3493  C   PHE B 235      28.804 -28.483  60.814  1.00 34.12           C
ATOM   3494  O   PHE B 235      28.133 -27.855  59.993  1.00 35.77           O
ATOM   3495  CB  PHE B 235      28.239 -27.994  63.187  1.00 25.99           C
ATOM   3496  CG  PHE B 235      28.714 -27.633  64.552  1.00 25.57           C
ATOM   3497  CD1 PHE B 235      28.693 -26.316  64.991  1.00 29.89           C
ATOM   3498  CD2 PHE B 235      29.179 -28.612  65.403  1.00 22.82           C
ATOM   3499  CE1 PHE B 235      29.145 -25.983  66.248  1.00 29.17           C
ATOM   3500  CE2 PHE B 235      29.624 -28.290  66.665  1.00 28.14           C
ATOM   3501  CZ  PHE B 235      29.611 -26.973  67.090  1.00 30.64           C
ATOM   3502  N   GLY B 236      29.125 -29.766  60.655  1.00 31.50           N
ATOM   3503  CA  GLY B 236      28.515 -30.535  59.593  1.00 34.62           C
ATOM   3504  C   GLY B 236      27.024 -30.697  59.842  1.00 35.46           C
ATOM   3505  O   GLY B 236      26.507 -30.411  60.921  1.00 32.83           O
ATOM   3506  N   CYS B 237      26.322 -31.189  58.817  1.00 36.26           N
ATOM   3507  CA  CYS B 237      24.873 -31.338  58.899  1.00 40.50           C
ATOM   3508  C   CYS B 237      24.430 -32.450  59.837  1.00 36.60           C
ATOM   3509  O   CYS B 237      23.268 -32.468  60.251  1.00 41.01           O
ATOM   3510  CB  CYS B 237      24.309 -31.586  57.500  1.00 48.65           C
ATOM   3511  SG  CYS B 237      24.392 -30.117  56.438  1.00 66.32           S
ATOM   3512  N   GLY B 238      25.327 -33.349  60.210  1.00 36.74           N
ATOM   3513  CA  GLY B 238      24.967 -34.443  61.087  1.00 36.52           C
ATOM   3514  C   GLY B 238      24.658 -35.715  60.322  1.00 39.57           C
ATOM   3515  O   GLY B 238      24.083 -35.676  59.228  1.00 35.38           O
ATOM   3516  N   THR B 239      25.070 -36.848  60.893  1.00 41.19           N
ATOM   3517  CA  THR B 239      24.722 -38.183  60.422  1.00 41.72           C
ATOM   3518  C   THR B 239      23.954 -38.894  61.526  1.00 38.99           C
ATOM   3519  O   THR B 239      24.435 -38.982  62.660  1.00 38.94           O
ATOM   3520  CB  THR B 239      25.975 -39.005  60.056  1.00 37.74           C
ATOM   3521  OG1 THR B 239      26.687 -38.376  58.985  1.00 35.15           O
ATOM   3522  CG2 THR B 239      25.588 -40.424  59.637  1.00 40.85           C
ATOM   3523  N   LYS B 240      22.772 -39.397  61.206  1.00 39.41           N
ATOM   3524  CA  LYS B 240      22.007 -40.205  62.148  1.00 44.41           C
ATOM   3525  C   LYS B 240      22.293 -41.677  61.874  1.00 44.09           C
ATOM   3526  O   LYS B 240      22.179 -42.140  60.731  1.00 44.14           O
```

[2015]

```
ATOM   3527  CB  LYS B 240      20.507 -39.911  62.061  1.00 44.42           C
ATOM   3528  CG  LYS B 240      19.694 -40.717  63.066  1.00 53.72           C
ATOM   3529  CD  LYS B 240      18.256 -40.222  63.241  1.00 62.76           C
ATOM   3530  CE  LYS B 240      18.130 -39.195  64.363  1.00 66.04           C
ATOM   3531  NZ  LYS B 240      16.701 -38.983  64.750  1.00 67.66           N
ATOM   3532  N   VAL B 241      22.696 -42.399  62.913  1.00 45.92           N
ATOM   3533  CA  VAL B 241      23.024 -43.815  62.806  1.00 47.18           C
ATOM   3534  C   VAL B 241      21.858 -44.592  63.400  1.00 49.08           C
ATOM   3535  O   VAL B 241      21.619 -44.539  64.611  1.00 44.70           O
ATOM   3536  CB  VAL B 241      24.344 -44.147  63.516  1.00 45.74           C
ATOM   3537  CG1 VAL B 241      24.678 -45.613  63.342  1.00 48.30           C
ATOM   3538  CG2 VAL B 241      25.474 -43.286  62.978  1.00 39.83           C
ATOM   3539  N   GLU B 242      21.133 -45.316  62.548  1.00 49.95           N
ATOM   3540  CA  GLU B 242      19.907 -45.997  62.941  1.00 56.64           C
ATOM   3541  C   GLU B 242      20.035 -47.508  62.790  1.00 57.26           C
ATOM   3542  O   GLU B 242      20.742 -48.006  61.907  1.00 57.97           O
ATOM   3543  CB  GLU B 242      18.714 -45.496  62.121  1.00 56.91           C
ATOM   3544  CG  GLU B 242      17.999 -44.301  62.750  1.00 67.83           C
ATOM   3545  CD  GLU B 242      17.376 -44.628  64.110  1.00 67.35           C
ATOM   3546  OE1 GLU B 242      18.090 -44.555  65.140  1.00 64.86           O
ATOM   3547  OE2 GLU B 242      16.171 -44.964  64.141  1.00 67.90           O
ATOM   3548  N   ILE B 243      19.316 -48.232  63.656  1.00 62.19           N
ATOM   3549  CA  ILE B 243      19.405 -49.689  63.696  1.00 61.85           C
ATOM   3550  C   ILE B 243      18.678 -50.292  62.503  1.00 62.20           C
ATOM   3551  O   ILE B 243      17.633 -49.790  62.062  1.00 60.90           O
ATOM   3552  CB  ILE B 243      18.827 -50.265  65.005  1.00 62.31           C
ATOM   3553  CG1 ILE B 243      19.291 -49.495  66.242  1.00 63.05           C
ATOM   3554  CG2 ILE B 243      19.236 -51.728  65.164  1.00 66.60           C
ATOM   3555  CD1 ILE B 243      18.372 -48.362  66.678  1.00 69.13           C
ATOM   3556  N   LYS B 244      19.237 -51.376  61.977  1.00 59.90           N
ATOM   3557  CA  LYS B 244      18.524 -52.271  61.080  1.00 60.45           C
ATOM   3558  C   LYS B 244      19.158 -53.645  61.235  1.00 65.05           C
ATOM   3559  O   LYS B 244      19.968 -53.855  62.145  1.00 60.71           O
ATOM   3560  CB  LYS B 244      18.581 -51.794  59.627  1.00 57.44           C
ATOM   3561  CG  LYS B 244      17.341 -52.170  58.812  1.00 65.83           C
ATOM   3562  CD  LYS B 244      16.066 -51.554  59.406  1.00 61.51           C
ATOM   3563  CE  LYS B 244      15.997 -50.052  59.150  1.00 61.39           C
ATOM   3564  NZ  LYS B 244      15.656 -49.735  57.731  1.00 62.02           N
TER
HETATM 3565  O   HOH S   1      51.835 -32.001  30.708  1.00 26.40           O
HETATM 3566  O   HOH S   2      27.571 -24.558  61.044  1.00 34.17           O
HETATM 3567  O   HOH S   3      27.885 -23.364  62.687  1.00 29.47           O
HETATM 3568  O   HOH S   4      51.053  -8.224  34.664  1.00 28.08           O
HETATM 3569  O   HOH S   5      44.798 -17.373  82.487  1.00 37.62           O
HETATM 3570  O   HOH S   6      19.882 -25.122  64.898  1.00 31.12           O
HETATM 3571  O   HOH S   7      49.917 -13.533  58.308  1.00 29.59           O
HETATM 3572  O   HOH S   8      54.617 -13.449  60.738  1.00 27.78           O
HETATM 3573  O   HOH S   9      56.948  -5.084  49.248  1.00 25.72           O
HETATM 3574  O   HOH S  10      33.788  -9.260  78.427  1.00 31.30           O
HETATM 3575  O   HOH S  11      35.957 -20.767  43.218  1.00 32.07           O
HETATM 3576  O   HOH S  12      24.597 -28.920  62.418  1.00 33.59           O
HETATM 3577  O   HOH S  13      27.407 -30.513  33.122  1.00 28.08           O
HETATM 3578  O   HOH S  14      27.445 -31.169  55.628  1.00 38.76           O
HETATM 3579  O   HOH S  15      31.963  -7.899  74.768  1.00 32.28           O
HETATM 3580  O   HOH S  16      62.708 -23.696  26.871  1.00 35.72           O
HETATM 3581  O   HOH S  17      56.291   5.331  45.911  1.00 33.21           O
HETATM 3582  O   HOH S  18      38.667 -43.040  60.497  1.00 34.80           O
HETATM 3583  O   HOH S  19      29.624 -24.441  87.415  1.00 35.58           O
HETATM 3584  O   HOH S  20      21.202 -14.916  83.098  1.00 34.02           O
HETATM 3585  O   HOH S  21      45.088 -33.404  41.199  1.00 27.38           O
HETATM 3586  O   HOH S  22      41.714 -16.867  73.690  1.00 30.94           O
HETATM 3587  O   HOH S  23      17.852 -20.640  66.470  1.00 28.26           O
HETATM 3588  O   HOH S  24      27.205 -20.650  62.509  1.00 30.07           O
HETATM 3589  O   HOH S  25      23.355  -7.054  72.254  1.00 31.97           O
HETATM 3590  O   HOH S  26      60.218   0.092  44.987  1.00 31.82           O
HETATM 3591  O   HOH S  27      61.449 -27.010  29.483  1.00 31.84           O
HETATM 3592  O   HOH S  28      49.795 -33.374  34.247  1.00 21.44           O
HETATM 3593  O   HOH S  29      41.445 -21.098  74.352  1.00 35.99           O
```

[2016]

```
HETATM 3594  O   HOH S  30      43.274 -14.494  79.335  1.00 33.82           O
HETATM 3595  O   HOH S  31      28.998 -44.671  55.371  1.00 34.84           O
HETATM 3596  O   HOH S  32      59.037 -12.052  43.996  1.00 25.13           O
HETATM 3597  O   HOH S  33      56.937   1.116  50.235  1.00 29.92           O
HETATM 3598  O   HOH S  34      14.005 -22.096  65.585  1.00 33.81           O
HETATM 3599  O   HOH S  35      18.679 -16.266  63.976  1.00 31.42           O
HETATM 3600  O   HOH S  36      40.757 -17.824  85.388  1.00 36.76           O
HETATM 3601  O   HOH S  37      51.351  12.222  36.282  1.00 34.54           O
HETATM 3602  O   HOH S  38      44.869 -31.664  31.844  1.00 24.95           O
HETATM 3603  O   HOH S  39      12.320 -10.648  78.192  1.00 34.88           O
HETATM 3604  O   HOH S  40      21.971 -30.798  36.843  1.00 36.17           O
HETATM 3605  O   HOH S  41      41.658 -19.256  73.060  1.00 30.11           O
HETATM 3606  O   HOH S  42      21.923 -22.169  36.547  1.00 28.10           O
HETATM 3607  O   HOH S  43      43.265 -34.491  52.524  1.00 40.32           O
HETATM 3608  O   HOH S  44      11.929  -8.750  76.662  1.00 36.73           O
HETATM 3609  O   HOH S  45      48.619  12.500  42.045  1.00 35.55           O
HETATM 3610  O   HOH S  46      52.361 -33.246  33.432  1.00 31.78           O
HETATM 3611  O   HOH S  47      60.538 -17.879  59.243  1.00 36.15           O
HETATM 3612  O   HOH S  48      29.901 -31.992  42.989  1.00 33.02           O
HETATM 3613  O   HOH S  49      27.155 -33.152  33.369  1.00 35.42           O
HETATM 3614  O   HOH S  50      47.428 -31.207  23.456  1.00 37.79           O
HETATM 3615  O   HOH S  51      40.807 -30.098  66.368  1.00 38.86           O
HETATM 3616  O   HOH S  52      35.240 -12.905  39.155  1.00 34.39           O
HETATM 3617  O   HOH S  53      33.516 -32.578  44.145  1.00 40.03           O
HETATM 3618  O   HOH S  54      59.336 -20.114  35.022  1.00 28.48           O
HETATM 3619  O   HOH S  55      24.292 -20.082  85.486  1.00 32.32           O
HETATM 3620  O   HOH S  56      36.682 -10.218  82.707  1.00 31.04           O
HETATM 3621  O   HOH S  57      54.480 -31.003  26.488  1.00 31.07           O
HETATM 3622  O   HOH S  58      59.747 -24.955  35.708  1.00 26.55           O
HETATM 3623  O   HOH S  59      37.245 -49.309  58.008  1.00 39.64           O
HETATM 3624  O   HOH S  60      36.245 -27.442  47.756  1.00 43.57           O
HETATM 3625  O   HOH S  61      19.996 -22.236  65.115  1.00 33.31           O
HETATM 3626  O   HOH S  62      37.884 -19.518  45.173  1.00 41.20           O
HETATM 3627  O   HOH S  63      27.411 -21.856  28.688  1.00 35.44           O
HETATM 3628  O   HOH S  64      60.594  -5.502  56.210  1.00 35.35           O
HETATM 3629  O   HOH S  65      37.626 -11.228  37.731  1.00 30.82           O
HETATM 3630  O   HOH S  66      39.265 -31.773  45.687  1.00 38.36           O
HETATM 3631  O   HOH S  67      41.275 -34.251  36.586  1.00 28.02           O
HETATM 3632  O   HOH S  68      15.418  -6.008  72.677  1.00 35.57           O
HETATM 3633  O   HOH S  69      15.672 -30.655  68.506  1.00 48.24           O
HETATM 3634  O   HOH S  70      15.860 -25.068  79.703  1.00 33.66           O
HETATM 3635  O   HOH S  71      32.210 -56.497  66.131  1.00 32.60           O
HETATM 3636  O   HOH S  72      52.803  -5.746  57.318  1.00 41.85           O
HETATM 3637  O   HOH S  73      23.793 -32.562  39.256  1.00 38.95           O
HETATM 3638  O   HOH S  74      49.146  11.551  51.962  1.00 39.58           O
HETATM 3639  O   HOH S  75      36.032 -17.457  27.500  1.00 41.04           O
HETATM 3640  O   HOH S  76      48.954   5.104  54.635  1.00 36.67           O
HETATM 3641  O   HOH S  77      15.207  -8.121  65.194  1.00 31.54           O
HETATM 3642  O   HOH S  78      38.042 -16.740  44.758  1.00 34.35           O
HETATM 3643  O   HOH S  79      36.866 -51.220  57.184  1.00 46.12           O
HETATM 3644  O   HOH S  80      61.026 -32.879  33.590  1.00 38.54           O
HETATM 3645  O   HOH S  81      37.713 -47.298  64.941  1.00 37.25           O
HETATM 3646  O   HOH S  82      54.270 -31.982  29.125  1.00 35.51           O
HETATM 3647  O   HOH S  83      28.817 -23.603  27.373  1.00 39.50           O
HETATM 3648  O   HOH S  84      27.364  -8.110  67.766  1.00 41.53           O
HETATM 3649  O   HOH S  85      55.694  -5.357  31.463  1.00 41.19           O
HETATM 3650  O   HOH S  86      29.004  -9.788  85.962  1.00 37.54           O
HETATM 3651  O   HOH S  87      44.464  -6.166  33.153  1.00 37.98           O
HETATM 3652  O   HOH S  88      32.813 -12.364  37.666  1.00 41.78           O
HETATM 3653  O   HOH S  89      61.693 -19.304  33.861  1.00 28.46           O
HETATM 3654  O   HOH S  90      16.525  -6.822  64.625  1.00 35.92           O
HETATM 3655  O   HOH S  91      39.819  -7.559  43.089  1.00 34.02           O
HETATM 3656  O   HOH S  92      61.986 -16.962  34.569  1.00 37.72           O
HETATM 3657  O   HOH S  93      43.957 -16.800  56.196  1.00 41.67           O
HETATM 3658  O   HOH S  94      47.900 -16.514  22.146  1.00 33.98           O
HETATM 3659  O   HOH S  95      23.170 -30.966  41.012  1.00 39.95           O
HETATM 3660  O   HOH S  96      41.794 -41.986  66.128  1.00 38.32           O
```

[2017]

```
HETATM 3661  O   HOH S  97      51.839 -21.795  51.052  1.00 35.72           O
```

```
HETATM 3662  O   HOH S  98      44.782 -10.665  53.831  1.00 30.93           O
HETATM 3663  O   HOH S  99      63.141  -1.115  49.094  1.00 41.13           O
HETATM 3664  O   HOH S 100      45.689 -18.260  47.099  1.00 29.00           O
HETATM 3665  O   HOH S 101      12.467 -12.577  60.876  1.00 38.40           O
HETATM 3666  O   HOH S 102      60.900 -33.930  35.640  1.00 39.55           O
HETATM 3667  O   HOH S 103      49.653 -10.236  62.091  1.00 34.04           O
HETATM 3668  O   HOH S 104      61.959   0.817  47.161  1.00 34.56           O
HETATM 3669  O   HOH S 105      42.587 -12.941  47.714  1.00 28.64           O
HETATM 3670  O   HOH S 106      44.277 -41.016  70.570  1.00 38.74           O
HETATM 3671  O   HOH S 107      38.607 -36.972  61.278  1.00 32.36           O
HETATM 3672  O   HOH S 108      29.968 -30.982  31.742  1.00 32.39           O
HETATM 3673  O   HOH S 109      49.766  -6.404  57.130  1.00 34.20           O
HETATM 3674  O   HOH S 110      38.787  -8.597  46.804  1.00 37.23           O
HETATM 3675  O   HOH S 111      19.834 -30.944  75.694  1.00 47.10           O
HETATM 3676  O   HOH S 112      18.286 -18.541  62.170  1.00 35.86           O
HETATM 3677  O   HOH S 113      32.052 -19.481  43.907  1.00 33.25           O
HETATM 3678  O   HOH S 114      32.845 -32.919  75.680  1.00 36.91           O
HETATM 3679  O   HOH S 115      14.819 -21.670  63.210  1.00 41.35           O
HETATM 3680  O   HOH S 116       9.787 -23.825  59.384  1.00 45.78           O
HETATM 3681  O   HOH S 117      18.929 -14.663  61.872  1.00 34.02           O
HETATM 3682  O   HOH S 118       5.672 -16.087  66.927  1.00 33.86           O
HETATM 3683  O   HOH S 119      32.619 -33.617  87.683  1.00 51.05           O
HETATM 3684  O   HOH S 120      34.704 -10.486  40.591  1.00 45.85           O
HETATM 3685  O   HOH S 121      59.852   2.936  42.663  1.00 37.55           O
HETATM 3686  O   HOH S 122      -1.836 -20.037  70.052  1.00 41.37           O
HETATM 3687  O   HOH S 123      21.094 -10.248  62.954  1.00 36.05           O
HETATM 3688  O   HOH S 124      43.718 -10.434  55.818  1.00 36.25           O
HETATM 3689  O   HOH S 125      15.465 -19.037  83.588  1.00 42.36           O
HETATM 3690  O   HOH S 126      52.379  -5.291  34.382  1.00 41.82           O
HETATM 3691  O   HOH S 127      58.293 -23.686  23.891  1.00 41.91           O
HETATM 3692  O   HOH S 128      43.851 -36.100  74.003  1.00 49.24           O
HETATM 3693  O   HOH S 129      20.848 -18.980  61.504  1.00 38.86           O
HETATM 3694  O   HOH S 130      28.632 -30.615  45.097  1.00 43.76           O
HETATM 3695  O   HOH S 131      53.800 -23.296  51.878  1.00 38.72           O
HETATM 3696  O   HOH S 132      35.570 -21.104  46.582  1.00 43.41           O
HETATM 3697  O   HOH S 133      55.438 -16.923  20.096  1.00 41.28           O
HETATM 3698  O   HOH S 134      43.513 -21.901  75.391  1.00 38.72           O
HETATM 3699  O   HOH S 135      24.887 -27.342  31.784  1.00 33.83           O
HETATM 3700  O   HOH S 136      28.831  -7.702  65.814  1.00 39.67           O
HETATM 3701  O   HOH S 137      39.291 -25.740  25.951  1.00 34.27           O
HETATM 3702  O   HOH S 138      63.295 -17.441  60.477  1.00 34.45           O
HETATM 3703  O   HOH S 139      37.570  -5.171  73.406  1.00 40.69           O
HETATM 3704  O   HOH S 140      60.540 -28.881  27.760  1.00 39.22           O
HETATM 3705  O   HOH S 141      36.276  -9.468  42.662  1.00 43.26           O
HETATM 3706  O   HOH S 142      65.566  -3.771  41.000  1.00 46.00           O
HETATM 3707  O   HOH S 143      27.140  -9.296  77.052  1.00 35.41           O
HETATM 3708  O   HOH S 144      37.909 -10.273  49.269  1.00 45.00           O
HETATM 3709  O   HOH S 145      47.445 -34.345  42.895  1.00 43.99           O
HETATM 3710  O   HOH S 146      46.522  10.998  35.854  1.00 41.15           O
HETATM 3711  O   HOH S 147      16.772 -20.471  60.198  1.00 40.89           O
HETATM 3712  O   HOH S 148      22.317 -13.246  86.758  1.00 39.56           O
HETATM 3713  O   HOH S 149      32.488 -11.561  63.858  1.00 30.62           O
HETATM 3714  O   HOH S 150      51.726 -26.633  51.584  1.00 45.09           O
HETATM 3715  O   HOH S 151      50.026   1.065  36.596  1.00 39.11           O
HETATM 3716  O   HOH S 152      64.291  -6.770  44.699  1.00 37.86           O
HETATM 3717  O   HOH S 153      66.080 -17.266  60.093  1.00 40.16           O
HETATM 3718  O   HOH S 154      51.032 -29.131  49.966  1.00 44.78           O
HETATM 3719  O   HOH S 155      31.312  -7.075  70.965  1.00 31.20           O
HETATM 3720  O   HOH S 156      41.144 -20.252  68.584  1.00 46.92           O
HETATM 3721  O   HOH S 157      23.934 -32.863  78.700  1.00 47.58           O
HETATM 3722  O   HOH S 158      43.700 -19.382  67.542  1.00 43.68           O
HETATM 3723  O   HOH S 159      12.242  -6.808  76.532  1.00 41.47           O
HETATM 3724  O   HOH S 160      26.641 -33.771  36.555  1.00 44.63           O
HETATM 3725  O   HOH S 161      37.940  -9.699  53.068  1.00 45.00           O
HETATM 3726  O   HOH S 162      46.460 -34.449  19.618  1.00 37.47           O
HETATM 3727  O   HOH S 163      34.326  -8.250  75.738  1.00 37.06           O
HETATM 3728  O   HOH S 164      30.406 -33.772  32.179  1.00 50.68           O
HETATM 3729  O   HOH S 165      35.027  -9.438  52.464  1.00 48.08           O
```

[2018]

```
HETATM 3730  O   HOH S 166      25.906 -22.480  42.500  1.00 37.90           O
HETATM 3731  O   HOH S 167      36.789 -16.485  91.130  1.00 29.53           O
HETATM 3732  O   HOH S 168      49.039 -34.083  37.915  1.00 28.15           O
HETATM 3733  O   HOH S 169      44.119  14.594  52.021  1.00 41.60           O
HETATM 3734  O   HOH S 170      50.498 -30.285  45.290  1.00 29.62           O
HETATM 3735  O   HOH S 171      13.519 -16.725  81.442  1.00 39.25           O
HETATM 3736  O   HOH S 172      57.240 -20.607  22.098  1.00 36.46           O
HETATM 3737  O   HOH S 173      34.654 -10.063  50.242  1.00 48.81           O
HETATM 3738  O   HOH S 174      67.401  -1.479  39.941  1.00 59.90           O
HETATM 3739  O   HOH S 175      39.741 -36.315  33.188  1.00 41.67           O
HETATM 3740  O   HOH S 176      24.649 -13.962  86.609  1.00 48.68           O
HETATM 3741  O   HOH S 177      16.700 -21.805  39.560  1.00 41.29           O
HETATM 3742  O   HOH S 178      13.549  -4.865  75.508  1.00 49.25           O
HETATM 3743  O   HOH S 179      17.297 -21.099  84.359  1.00 59.54           O
HETATM 3744  O   HOH S 180      36.732 -24.496  24.490  1.00 51.32           O
END
```

[2019]

[2020] [표 20]

Glk2spFv_HL(mscg274)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3    정밀화.
REMARK   3   프로그램      : PHENIX (1.10_2155: ???)
REMARK   3     저자        : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                : Hintze,Hung,Ioerger,McCoy,McKee,Moriarty,Oeffner,
REMARK   3                : Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,Sauter,
REMARK   3                : Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)         : 1.509
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)        : 56.276
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)     : 1.35
REMARK   3   범위의 완전성          (%)  : 75.47
REMARK   3   반사 수                   : 30529
REMARK   3   반사 수 (비이상)           : 30529
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값      (작업 + 시험 세트)        : 0.1844
REMARK   3   R값             (작업 세트)       : 0.1831
REMARK   3   자유 R값                        : 0.2094
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈   (%)   : 4.88
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트          : 1490
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3  BIN      분해능 범위     COMPL.    NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWORK CCFREE
REMARK   3    1 56.3155 -  3.3556    1.00     3751   204  0.1593 0.1878   0.943  0.929
REMARK   3    2  3.3556 -  2.6634    1.00     3580   180  0.1824 0.2070   0.927  0.925
REMARK   3    3  2.6634 -  2.3268    1.00     3512   177  0.1924 0.2256   0.911  0.878
REMARK   3    4  2.3268 -  2.1140    0.96     3354   160  0.1809 0.1987   0.920  0.906
REMARK   3    5  2.1140 -  1.9625    1.00     3475   185  0.1814 0.2161   0.919  0.885
REMARK   3    6  1.9625 -  1.8468    1.00     3429   197  0.2031 0.2187   0.899  0.859
REMARK   3    7  1.8468 -  1.7543    0.98     3399   172  0.2339 0.2828   0.854  0.788
REMARK   3    8  1.7543 -  1.6779    0.73     2541   115  0.2448 0.2321   0.823  0.865
REMARK   3    9  1.6779 -  1.6133    0.38     1302    64  0.2677 0.2798   0.809  0.766
REMARK   3   10  1.6133 -  1.5576    0.15      530    27  0.2937 0.2831   0.708  0.652
REMARK   3   11  1.5576 -  1.5089    0.05      166     9  0.2743 0.4307   0.774  0.152
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법         : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경           : 1.11
REMARK   3   수축 반경           : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자    : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)       : 0.14
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반)   : 25.51
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
REMARK   3
REMARK   3  제한 라이브러리
REMARK   3    GEOSTD + MON.LIB. + CDL v1.2
REMARK   3
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3                RMSD     MAX  카운트
REMARK   3   결합    :  0.007   0.066   1851
REMARK   3   각도    :  0.923   8.308   2518
REMARK   3   키랄성  :  0.061   0.208    267
```

[2021]

```
REMARK   3   평면성  :  0.005   0.037    321
REMARK   3   이면각  : 12.107 168.045   1089
REMARK   3   최소 비결합 거리 : 1.876
REMARK   3
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3   모든 원자 충돌 점수 : 2.28
REMARK   3   라마찬드란 플롯:
REMARK   3     이상치 : 0.00  %
REMARK   3     허용   : 2.54  %
REMARK   3     선호   : 97.46 %
REMARK   3   회전 이성질체 이상치 : 0.00 %
REMARK   3   CBETA 편차         : 0
REMARK   3
REMARK   3  원자 변위 파라미터.
REMARK   3   WILSON B : 없음
REMARK   3   RMS(B_ISO_OR_EQUIVALENT_BONDED) : 2.81
REMARK   3   원자                    원자 수
REMARK   3                         ISO.  ANISO.
REMARK   3    모두          :   2096       0
REMARK   3    모두 (NO H)   :   2096       0
REMARK   3    용매          :    289       0
REMARK   3    비용매        :   1807       0
REMARK   3    수소          :      0       0
REMARK   3
SSBOND   1 CYS H   22    CYS H   96
SSBOND   2 CYS H   43    CYS H  125
SSBOND   3 CYS H  128    CYS H  235
SSBOND   4 CYS H  157    CYS H  223
CRYST1   63.030   63.030  124.960  90.00  90.00  90.00 P 41 21 2
SCALE1      0.015865  0.000000  0.000000        0.00000
SCALE2      0.000000  0.015865  0.000000        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.008003        0.00000
ATOM      1  N   GLU A   1      58.035  45.260 140.066  1.00 32.49           N
ATOM      2  CA  GLU A   1      58.868  44.071 140.199  1.00 33.37           C
ATOM      3  C   GLU A   1      58.090  42.821 139.788  1.00 25.65           C
ATOM      4  O   GLU A   1      56.906  42.698 140.089  1.00 23.56           O
ATOM      5  CB  GLU A   1      59.377  43.924 141.632  1.00 32.61           C
ATOM      6  N   VAL A   2      58.761  41.899 139.097  1.00 23.22           N
ATOM      7  CA  VAL A   2      58.154  40.610 138.773  1.00 20.36           C
ATOM      8  C   VAL A   2      58.048  39.772 140.039  1.00 22.56           C
ATOM      9  O   VAL A   2      59.032  39.616 140.777  1.00 22.44           O
ATOM     10  CB  VAL A   2      58.992  39.874 137.716  1.00 20.69           C
ATOM     11  CG1 VAL A   2      58.443  38.471 137.476  1.00 21.42           C
ATOM     12  CG2 VAL A   2      59.070  40.680 136.415  1.00 22.58           C
ATOM     13  N   GLN A   3      56.864  39.203 140.286  1.00 19.38           N
ATOM     14  CA  GLN A   3      56.690  38.269 141.391  1.00 20.90           C
ATOM     15  C   GLN A   3      55.814  37.100 140.970  1.00 21.39           C
ATOM     16  O   GLN A   3      54.890  37.253 140.171  1.00 19.91           O
ATOM     17  CB  GLN A   3      56.034  38.910 142.604  1.00 21.27           C
ATOM     18  CG  GLN A   3      56.811  40.024 143.237  1.00 31.73           C
ATOM     19  CD  GLN A   3      56.001  40.674 144.331  1.00 37.60           C
ATOM     20  NE2 GLN A   3      55.492  39.853 145.255  1.00 39.40           N
ATOM     21  OE1 GLN A   3      55.793  41.898 144.331  1.00 44.71           O
ATOM     22  N   LEU A   4      56.114  35.933 141.536  1.00 18.77           N
ATOM     23  CA  LEU A   4      55.256  34.755 141.457  1.00 17.60           C
ATOM     24  C   LEU A   4      54.891  34.360 142.875  1.00 19.21           C
ATOM     25  O   LEU A   4      55.781  34.160 143.709  1.00 18.65           O
ATOM     26  CB  LEU A   4      55.963  33.602 140.749  1.00 17.46           C
ATOM     27  CG  LEU A   4      56.327  33.826 139.283  1.00 18.64           C
ATOM     28  CD1 LEU A   4      57.220  32.696 138.770  1.00 19.79           C
ATOM     29  CD2 LEU A   4      55.063  33.897 138.474  1.00 25.72           C
ATOM     30  N   VAL A   5      53.592  34.265 143.158  1.00 18.71           N
ATOM     31  CA  VAL A   5      53.096  33.977 144.496  1.00 19.82           C
ATOM     32  C   VAL A   5      52.297  32.684 144.435  1.00 19.04           C
ATOM     33  O   VAL A   5      51.332  32.585 143.663  1.00 19.19           O
```

[2022]

```
ATOM     34  CB  VAL A   5      52.237  35.130 145.042  1.00 21.73           C
ATOM     35  CG1 VAL A   5      51.612  34.751 146.381  1.00 23.07           C
ATOM     36  CG2 VAL A   5      53.076  36.432 145.141  1.00 21.39           C
ATOM     37  N   GLN A   6      52.674  31.714 145.264  1.00 17.93           N
ATOM     38  CA  GLN A   6      52.066  30.388 145.233  1.00 18.08           C
ATOM     39  C   GLN A   6      51.106  30.189 146.399  1.00 19.14           C
ATOM     40  O   GLN A   6      51.139  30.910 147.401  1.00 19.69           O
ATOM     41  CB  GLN A   6      53.142  29.301 145.248  1.00 16.18           C
ATOM     42  CG  GLN A   6      54.070  29.360 144.044  1.00 18.21           C
ATOM     43  CD  GLN A   6      55.103  28.265 144.055  1.00 17.47           C
ATOM     44  NE2 GLN A   6      54.642  27.026 144.137  1.00 18.72           N
ATOM     45  OE1 GLN A   6      56.309  28.529 144.015  1.00 16.83           O
ATOM     46  N   SER A   7      50.245  29.185 146.264  1.00 18.41           N
ATOM     47  CA  SER A   7      49.244  28.917 147.287  1.00 18.79           C
ATOM     48  C   SER A   7      49.883  28.224 148.499  1.00 21.09           C
ATOM     49  O   SER A   7      51.053  27.825 148.481  1.00 18.38           O
ATOM     50  CB  SER A   7      48.102  28.080 146.698  1.00 20.90           C
ATOM     51  OG  SER A   7      48.589  26.973 145.954  1.00 19.84           O
ATOM     52  N   GLY A   8      49.096  28.081 149.576  1.00 20.52           N
ATOM     53  CA  GLY A   8      49.643  27.652 150.849  1.00 20.33           C
ATOM     54  C   GLY A   8      49.872  26.152 150.944  1.00 21.52           C
ATOM     55  O   GLY A   8      49.464  25.374 150.085  1.00 19.74           O
ATOM     56  N   ALA A   9      50.521  25.750 152.038  1.00 19.19           N
ATOM     57  CA  ALA A   9      50.878  24.355 152.260  1.00 20.81           C
ATOM     58  C   ALA A   9      49.651  23.446 152.260  1.00 24.19           C
ATOM     59  O   ALA A   9      48.555  23.841 152.662  1.00 21.98           O
ATOM     60  CB  ALA A   9      51.621  24.202 153.587  1.00 21.36           C
ATOM     61  N   GLU A  10      49.862  22.202 151.827  1.00 21.21           N
ATOM     62  CA  GLU A  10      48.815  21.192 151.704  1.00 19.16           C
ATOM     63  C   GLU A  10      49.241  19.912 152.395  1.00 21.49           C
ATOM     64  O   GLU A  10      50.407  19.510 152.314  1.00 20.45           O
ATOM     65  CB  GLU A  10      48.517  20.868 150.231  1.00 20.08           C
ATOM     66  CG  GLU A  10      48.165  22.055 149.404  1.00 20.46           C
ATOM     67  CD  GLU A  10      46.696  22.438 149.487  1.00 25.98           C
ATOM     68  OE1 GLU A  10      45.925  21.793 150.237  1.00 27.48           O
ATOM     69  OE2 GLU A  10      46.311  23.383 148.769  1.00 25.14           O
ATOM     70  N   VAL A  11      48.281  19.252 153.048  1.00 20.27           N
ATOM     71  CA  VAL A  11      48.490  17.946 153.656  1.00 19.66           C
ATOM     72  C   VAL A  11      47.407  17.007 153.142  1.00 20.65           C
ATOM     73  O   VAL A  11      46.215  17.292 153.293  1.00 22.46           O
ATOM     74  CB  VAL A  11      48.442  18.004 155.196  1.00 22.09           C
ATOM     75  CG1 VAL A  11      48.833  16.649 155.772  1.00 20.32           C
ATOM     76  CG2 VAL A  11      49.339  19.115 155.736  1.00 26.56           C
ATOM     77  N   LYS A  12      47.822  15.879 152.573  1.00 20.98           N
ATOM     78  CA  LYS A  12      46.921  14.982 151.869  1.00 21.71           C
ATOM     79  C   LYS A  12      47.305  13.543 152.157  1.00 22.18           C
ATOM     80  O   LYS A  12      48.377  13.249 152.687  1.00 23.37           O
ATOM     81  CB  LYS A  12      46.958  15.226 150.352  1.00 19.90           C
ATOM     82  CG  LYS A  12      46.454  16.603 149.921  1.00 21.22           C
ATOM     83  CD  LYS A  12      44.973  16.793 150.219  1.00 26.18           C
ATOM     84  CE  LYS A  12      44.266  17.535 149.103  1.00 33.40           C
ATOM     85  NZ  LYS A  12      43.020  18.199 149.585  1.00 36.71           N
ATOM     86  N   LYS A  13      46.414  12.634 151.785  1.00 22.12           N
ATOM     87  CA  LYS A  13      46.678  11.214 151.845  1.00 23.11           C
ATOM     88  C   LYS A  13      46.809  10.665 150.428  1.00 20.67           C
ATOM     89  O   LYS A  13      46.263  11.264 149.492  1.00 19.67           O
ATOM     90  CB  LYS A  13      45.547  10.501 152.602  1.00 22.47           C
ATOM     91  CG  LYS A  13      45.561  10.786 154.113  1.00 25.98           C
ATOM     92  CD  LYS A  13      44.365  10.173 154.826  1.00 27.05           C
ATOM     93  CE  LYS A  13      43.067  10.936 154.524  1.00 33.00           C
ATOM     94  NZ  LYS A  13      42.046  10.800 155.626  1.00 38.00           N
ATOM     95  N   PRO A  14      47.549   9.569 150.228  1.00 18.63           N
ATOM     96  CA  PRO A  14      47.683   8.990 148.881  1.00 19.34           C
ATOM     97  C   PRO A  14      46.323   8.725 148.248  1.00 19.07           C
ATOM     98  O   PRO A  14      45.369   8.321 148.920  1.00 19.93           O
ATOM     99  CB  PRO A  14      48.448   7.687 149.131  1.00 24.27           C
ATOM    100  CG  PRO A  14      49.204   7.944 150.408  1.00 23.29           C
ATOM    101  CD  PRO A  14      48.334   8.822 151.232  1.00 21.72           C
```

[2023]

```
ATOM    102  N   GLY A  15      46.241   8.970 146.938  1.00 17.98           N
ATOM    103  CA  GLY A  15      45.035   8.813 146.171  1.00 21.40           C
ATOM    104  C   GLY A  15      44.255  10.096 145.992  1.00 18.50           C
ATOM    105  O   GLY A  15      43.503  10.224 145.014  1.00 20.50           O
ATOM    106  N   GLU A  16      44.404  11.042 146.915  1.00 18.01           N
ATOM    107  CA  GLU A  16      43.622  12.260 146.827  1.00 17.57           C
ATOM    108  C   GLU A  16      44.105  13.123 145.670  1.00 18.24           C
ATOM    109  O   GLU A  16      45.265  13.062 145.256  1.00 17.01           O
ATOM    110  CB  GLU A  16      43.696  13.042 148.131  1.00 21.46           C
ATOM    111  CG  GLU A  16      43.123  12.289 149.314  1.00 18.95           C
ATOM    112  CD  GLU A  16      42.864  13.205 150.485  1.00 26.02           C
ATOM    113  OE1 GLU A  16      43.831  13.581 151.177  1.00 25.01           O
ATOM    114  OE2 GLU A  16      41.688  13.566 150.699  1.00 25.14           O
ATOM    115  N   SER A  17      43.185  13.895 145.120  1.00 17.80           N
ATOM    116  CA  SER A  17      43.524  14.891 144.120  1.00 17.69           C
ATOM    117  C   SER A  17      43.939  16.176 144.820  1.00 18.18           C
ATOM    118  O   SER A  17      43.612  16.414 145.986  1.00 20.57           O
ATOM    119  CB  SER A  17      42.340  15.150 143.188  1.00 20.85           C
ATOM    120  OG  SER A  17      41.245  15.677 143.915  1.00 23.62           O
ATOM    121  N   LEU A  18      44.669  17.010 144.090  1.00 17.26           N
ATOM    122  CA  LEU A  18      45.148  18.265 144.645  1.00 18.42           C
ATOM    123  C   LEU A  18      45.476  19.193 143.492  1.00 17.73           C
ATOM    124  O   LEU A  18      46.073  18.761 142.504  1.00 18.82           O
ATOM    125  CB  LEU A  18      46.392  18.047 145.511  1.00 20.77           C
ATOM    126  CG  LEU A  18      47.080  19.327 145.986  1.00 22.06           C
ATOM    127  CD1 LEU A  18      46.141  20.118 146.891  1.00 23.05           C
ATOM    128  CD2 LEU A  18      48.383  18.971 146.682  1.00 20.70           C
ATOM    129  N   LYS A  19      45.130  20.472 143.644  1.00 20.85           N
ATOM    130  CA  LYS A  19      45.466  21.499 142.665  1.00 17.20           C
ATOM    131  C   LYS A  19      46.091  22.671 143.403  1.00 18.70           C
ATOM    132  O   LYS A  19      45.476  23.205 144.329  1.00 18.99           O
ATOM    133  CB  LYS A  19      44.223  21.949 141.907  1.00 19.85           C
ATOM    134  CG  LYS A  19      44.485  22.873 140.745  1.00 20.82           C
ATOM    135  CD  LYS A  19      43.199  22.936 139.934  1.00 28.95           C
ATOM    136  CE  LYS A  19      43.312  23.810 138.728  1.00 33.22           C
ATOM    137  NZ  LYS A  19      41.983  23.854 138.036  1.00 34.23           N
ATOM    138  N   ILE A  20      47.318  23.045 143.018  1.00 18.53           N
ATOM    139  CA  ILE A  20      47.988  24.201 143.610  1.00 16.39           C
ATOM    140  C   ILE A  20      48.199  25.268 142.541  1.00 17.32           C
ATOM    141  O   ILE A  20      48.166  24.994 141.340  1.00 17.67           O
ATOM    142  CB  ILE A  20      49.316  23.814 144.288  1.00 16.92           C
ATOM    143  CG1 ILE A  20      50.330  23.268 143.273  1.00 17.00           C
ATOM    144  CG2 ILE A  20      49.048  22.805 145.401  1.00 17.45           C
ATOM    145  CD1 ILE A  20      51.680  22.948 143.885  1.00 16.76           C
ATOM    146  N   SER A  21      48.408  26.507 142.988  1.00 16.64           N
ATOM    147  CA  SER A  21      48.380  27.632 142.072  1.00 17.51           C
ATOM    148  C   SER A  21      49.625  28.509 142.186  1.00 17.80           C
ATOM    149  O   SER A  21      50.323  28.545 143.210  1.00 17.63           O
ATOM    150  CB  SER A  21      47.127  28.497 142.284  1.00 19.49           C
ATOM    151  OG  SER A  21      47.133  29.104 143.567  1.00 22.06           O
ATOM    152  N   CYS A  22      49.843  29.261 141.110  1.00 17.33           N
ATOM    153  CA  CYS A  22      51.005  30.128 140.944  1.00 15.95           C
ATOM    154  C   CYS A  22      50.521  31.395 140.254  1.00 18.08           C
ATOM    155  O   CYS A  22      50.221  31.358 139.058  1.00 19.29           O
ATOM    156  CB  CYS A  22      52.076  29.436 140.110  1.00 17.62           C
ATOM    157  SG  CYS A  22      53.483  30.494 139.648  1.00 21.76           S
ATOM    158  N   LYS A  23      50.473  32.510 140.985  1.00 17.54           N
ATOM    159  CA  LYS A  23      49.959  33.784 140.473  1.00 20.12           C
ATOM    160  C   LYS A  23      51.099  34.716 140.075  1.00 17.45           C
ATOM    161  O   LYS A  23      51.962  35.031 140.902  1.00 20.83           O
ATOM    162  CB  LYS A  23      49.092  34.458 141.534  1.00 19.65           C
ATOM    163  CG  LYS A  23      48.739  35.896 141.222  1.00 27.20           C
ATOM    164  CD  LYS A  23      47.420  35.965 140.516  1.00 27.51           C
ATOM    165  CE  LYS A  23      46.938  37.412 140.397  1.00 24.32           C
ATOM    166  NZ  LYS A  23      45.588  37.445 139.733  1.00 25.40           N
ATOM    167  N   GLY A  24      51.087  35.191 138.830  1.00 15.86           N
ATOM    168  CA  GLY A  24      52.105  36.114 138.372  1.00 17.75           C
[2024]
ATOM    169  C   GLY A  24      51.670  37.572 138.497  1.00 20.48           C
```

```
ATOM    170  O   GLY A  24      50.500  37.906 138.366  1.00 20.08           O
ATOM    171  N   SER A  25      52.632  38.453 138.763  1.00 20.14           N
ATOM    172  CA  SER A  25      52.320  39.871 138.891  1.00 19.76           C
ATOM    173  C   SER A  25      53.516  40.678 138.416  1.00 19.46           C
ATOM    174  O   SER A  25      54.660  40.229 138.517  1.00 18.98           O
ATOM    175  CB  SER A  25      51.962  40.238 140.334  1.00 21.46           C
ATOM    176  OG  SER A  25      53.044  39.943 141.204  1.00 21.74           O
ATOM    177  N   GLY A  26      53.250  41.882 137.915  1.00 17.58           N
ATOM    178  CA  GLY A  26      54.312  42.764 137.459  1.00 18.52           C
ATOM    179  C   GLY A  26      54.883  42.476 136.088  1.00 20.55           C
ATOM    180  O   GLY A  26      55.962  42.993 135.759  1.00 21.31           O
ATOM    181  N   TYR A  27      54.202  41.681 135.270  1.00 17.17           N
ATOM    182  CA  TYR A  27      54.689  41.371 133.935  1.00 19.32           C
ATOM    183  C   TYR A  27      53.525  40.808 133.131  1.00 19.10           C
ATOM    184  O   TYR A  27      52.490  40.433 133.684  1.00 19.97           O
ATOM    185  CB  TYR A  27      55.877  40.395 133.976  1.00 20.62           C
ATOM    186  CG  TYR A  27      55.493  38.955 134.253  1.00 17.73           C
ATOM    187  CD1 TYR A  27      55.350  38.490 135.555  1.00 18.70           C
ATOM    188  CD2 TYR A  27      55.269  38.058 133.202  1.00 20.05           C
ATOM    189  CE1 TYR A  27      54.998  37.175 135.813  1.00 19.67           C
ATOM    190  CE2 TYR A  27      54.911  36.724 133.457  1.00 20.74           C
ATOM    191  CZ  TYR A  27      54.776  36.299 134.759  1.00 21.05           C
ATOM    192  OH  TYR A  27      54.430  34.993 135.039  1.00 19.48           O
ATOM    193  N   SER A  28      53.705  40.760 131.813  1.00 22.41           N
ATOM    194  C   SER A  28      52.684  38.719 130.966  1.00 21.81           C
ATOM    195  O   SER A  28      53.569  38.069 130.397  1.00 21.39           O
ATOM    196  CA ASER A  28      52.682  40.243 130.911  0.56 22.79           C
ATOM    197  CB ASER A  28      52.930  40.735 129.491  0.56 24.97           C
ATOM    198  OG ASER A  28      52.086  40.043 128.598  0.56 25.20           O
ATOM    199  CA BSER A  28      52.686  40.240 130.902  0.44 22.33           C
ATOM    200  CB BSER A  28      52.950  40.715 129.476  0.44 24.95           C
ATOM    201  OG BSER A  28      52.852  42.120 129.389  0.44 25.64           O
ATOM    202  N   PHE A  29      51.672  38.158 131.626  1.00 20.26           N
ATOM    203  CA  PHE A  29      51.614  36.726 131.905  1.00 21.91           C
ATOM    204  C   PHE A  29      51.779  35.877 130.649  1.00 23.92           C
ATOM    205  O   PHE A  29      52.538  34.903 130.645  1.00 23.34           O
ATOM    206  CB  PHE A  29      50.287  36.402 132.590  1.00 22.89           C
ATOM    207  CG  PHE A  29      50.194  34.999 133.106  1.00 27.41           C
ATOM    208  CD2 PHE A  29      49.331  34.092 132.513  1.00 24.55           C
ATOM    209  CD1 PHE A  29      50.958  34.586 134.196  1.00 23.57           C
ATOM    210  CE2 PHE A  29      49.220  32.801 133.006  1.00 23.94           C
ATOM    211  CE1 PHE A  29      50.852  33.286 134.681  1.00 21.91           C
ATOM    212  CZ  PHE A  29      49.979  32.404 134.088  1.00 21.97           C
ATOM    213  N   THR A  30      51.070  36.216 129.571  1.00 23.34           N
ATOM    214  CA  THR A  30      51.066  35.324 128.411  1.00 23.91           C
ATOM    215  C   THR A  30      52.372  35.339 127.630  1.00 25.10           C
ATOM    216  O   THR A  30      52.545  34.500 126.739  1.00 27.44           O
ATOM    217  CB  THR A  30      49.902  35.667 127.466  1.00 27.82           C
ATOM    218  CG2 THR A  30      48.589  35.464 128.175  1.00 27.12           C
ATOM    219  OG1 THR A  30      50.017  37.028 127.027  1.00 30.10           O
ATOM    220  N   SER A  31      53.293  36.249 127.940  1.00 22.12           N
ATOM    221  CA  SER A  31      54.545  36.370 127.216  1.00 23.00           C
ATOM    222  C   SER A  31      55.637  35.453 127.747  1.00 23.26           C
ATOM    223  O   SER A  31      56.720  35.397 127.157  1.00 21.84           O
ATOM    224  CB  SER A  31      55.032  37.821 127.259  1.00 27.87           C
ATOM    225  OG  SER A  31      54.063  38.685 126.682  1.00 33.05           O
ATOM    226  N   TYR A  32      55.394  34.743 128.842  1.00 21.79           N
ATOM    227  CA  TYR A  32      56.416  33.894 129.444  1.00 22.45           C
ATOM    228  C   TYR A  32      55.828  32.537 129.782  1.00 19.88           C
ATOM    229  O   TYR A  32      54.675  32.435 130.213  1.00 24.30           O
ATOM    230  CB  TYR A  32      56.983  34.525 130.717  1.00 19.11           C
ATOM    231  CG  TYR A  32      57.674  35.847 130.492  1.00 20.95           C
ATOM    232  CD1 TYR A  32      56.939  37.026 130.382  1.00 24.88           C
ATOM    233  CD2 TYR A  32      59.054  35.923 130.409  1.00 24.64           C
ATOM    234  CE1 TYR A  32      57.570  38.241 130.171  1.00 24.59           C
ATOM    235  CE2 TYR A  32      59.689  37.135 130.212  1.00 24.66           C
ATOM    236  CZ  TYR A  32      58.940  38.284 130.090  1.00 27.19           C
ATOM    237  OH  TYR A  32      59.571  39.493 129.884  1.00 28.46           O
```

[2025]

```
ATOM    238  N   TRP A  33      56.632  31.498 129.626  1.00 17.92           N
ATOM    239  CA  TRP A  33      56.175  30.169 129.986  1.00 17.55           C
ATOM    240  C   TRP A  33      56.349  29.964 131.489  1.00 18.51           C
ATOM    241  O   TRP A  33      57.165  30.629 132.124  1.00 20.97           O
ATOM    242  CB  TRP A  33      56.966  29.112 129.201  1.00 19.75           C
ATOM    243  CG  TRP A  33      56.769  29.145 127.690  1.00 21.88           C
ATOM    244  CD1 TRP A  33      56.899  30.231 126.865  1.00 22.80           C
ATOM    245  CD2 TRP A  33      56.472  28.028 126.830  1.00 24.19           C
ATOM    246  CE2 TRP A  33      56.409  28.520 125.507  1.00 24.91           C
ATOM    247  CE3 TRP A  33      56.232  26.667 127.055  1.00 24.98           C
ATOM    248  NE1 TRP A  33      56.671  29.866 125.555  1.00 23.63           N
ATOM    249  CZ2 TRP A  33      56.118  27.695 124.412  1.00 27.85           C
ATOM    250  CZ3 TRP A  33      55.946  25.844 125.963  1.00 26.20           C
ATOM    251  CH2 TRP A  33      55.887  26.365 124.663  1.00 27.09           C
ATOM    252  N   ILE A  34      55.552  29.068 132.065  1.00 17.79           N
ATOM    253  CA  ILE A  34      55.661  28.734 133.483  1.00 16.10           C
ATOM    254  C   ILE A  34      56.087  27.278 133.594  1.00 19.31           C
ATOM    255  O   ILE A  34      55.389  26.389 133.094  1.00 16.76           O
ATOM    256  CB  ILE A  34      54.346  28.956 134.251  1.00 16.80           C
ATOM    257  CG1 ILE A  34      53.963  30.440 134.318  1.00 17.79           C
ATOM    258  CG2 ILE A  34      54.454  28.365 135.679  1.00 18.17           C
ATOM    259  CD1 ILE A  34      54.808  31.266 135.271  1.00 20.41           C
ATOM    260  N   SER A  35      57.198  27.036 134.288  1.00 16.50           N
ATOM    261  CA  SER A  35      57.669  25.691 134.611  1.00 15.95           C
ATOM    262  C   SER A  35      57.309  25.351 136.050  1.00 17.71           C
ATOM    263  O   SER A  35      57.230  26.234 136.906  1.00 16.82           O
ATOM    264  CB  SER A  35      59.188  25.582 134.439  1.00 16.27           C
ATOM    265  OG  SER A  35      59.591  25.570 133.077  1.00 17.74           O
ATOM    266  N   TRP A  36      57.091  24.062 136.313  1.00 14.81           N
ATOM    267  CA  TRP A  36      56.943  23.561 137.672  1.00 15.82           C
ATOM    268  C   TRP A  36      58.157  22.707 138.031  1.00 15.67           C
ATOM    269  O   TRP A  36      58.584  21.863 137.235  1.00 15.31           O
ATOM    270  CB  TRP A  36      55.648  22.765 137.819  1.00 14.57           C
ATOM    271  CG  TRP A  36      54.424  23.657 137.858  1.00 16.86           C
ATOM    272  CD1 TRP A  36      53.638  24.020 136.804  1.00 17.26           C
ATOM    273  CD2 TRP A  36      53.879  24.296 139.015  1.00 17.65           C
ATOM    274  CE2 TRP A  36      52.751  25.034 138.594  1.00 17.21           C
ATOM    275  CE3 TRP A  36      54.234  24.319 140.371  1.00 18.01           C
ATOM    276  NE1 TRP A  36      52.618  24.851 137.243  1.00 19.87           N
ATOM    277  CZ2 TRP A  36      51.972  25.776 139.480  1.00 17.46           C
ATOM    278  CZ3 TRP A  36      53.451  25.067 141.255  1.00 19.33           C
ATOM    279  CH2 TRP A  36      52.335  25.784 140.792  1.00 17.68           C
ATOM    280  N   VAL A  37      58.694  22.917 139.235  1.00 15.62           N
ATOM    281  CA  VAL A  37      59.938  22.296 139.684  1.00 14.33           C
ATOM    282  C   VAL A  37      59.697  21.721 141.075  1.00 16.85           C
ATOM    283  O   VAL A  37      59.142  22.401 141.942  1.00 18.66           O
ATOM    284  CB  VAL A  37      61.111  23.302 139.704  1.00 14.61           C
ATOM    285  CG1 VAL A  37      62.340  22.670 140.323  1.00 16.42           C
ATOM    286  CG2 VAL A  37      61.417  23.808 138.288  1.00 16.24           C
ATOM    287  N   ARG A  38      60.106  20.479 141.290  1.00 14.26           N
ATOM    288  CA  ARG A  38      59.874  19.782 142.548  1.00 19.56           C
ATOM    289  C   ARG A  38      61.184  19.596 143.304  1.00 17.92           C
ATOM    290  O   ARG A  38      62.246  19.448 142.702  1.00 18.61           O
ATOM    291  CB  ARG A  38      59.229  18.422 142.263  1.00 20.61           C
ATOM    292  CG  ARG A  38      59.266  17.437 143.354  1.00 28.70           C
ATOM    293  CD  ARG A  38      58.369  16.284 143.007  1.00 22.93           C
ATOM    294  NE  ARG A  38      59.110  15.112 142.575  1.00 20.42           N
ATOM    295  CZ  ARG A  38      58.572  13.896 142.525  1.00 29.81           C
ATOM    296  NH1 ARG A  38      57.307  13.737 142.885  1.00 31.49           N
ATOM    297  NH2 ARG A  38      59.283  12.856 142.124  1.00 33.54           N
ATOM    298  N   GLN A  39      61.111  19.619 144.630  1.00 14.89           N
ATOM    299  CA  GLN A  39      62.271  19.287 145.452  1.00 15.38           C
ATOM    300  C   GLN A  39      61.790  18.394 146.588  1.00 16.62           C
ATOM    301  O   GLN A  39      61.276  18.891 147.590  1.00 16.51           O
ATOM    302  CB  GLN A  39      62.943  20.545 145.977  1.00 17.40           C
ATOM    303  CG  GLN A  39      64.285  20.290 146.647  1.00 19.20           C
ATOM    304  CD  GLN A  39      65.009  21.591 146.856  1.00 19.12           C
ATOM    305  NE2 GLN A  39      66.310  21.586 146.658  1.00 20.94           N
```

[2026]

```
ATOM    306  OE1 GLN A  39      64.386  22.601 147.175  1.00 22.59           O
ATOM    307  N   MET A  40      61.910  17.083 146.402  1.00 18.04           N
ATOM    308  CA  MET A  40      61.597  16.162 147.484  1.00 18.75           C
ATOM    309  C   MET A  40      62.580  16.377 148.628  1.00 20.28           C
ATOM    310  O   MET A  40      63.688  16.878 148.414  1.00 18.57           O
ATOM    311  CB  MET A  40      61.651  14.716 146.998  1.00 18.03           C
ATOM    312  CG  MET A  40      60.608  14.407 145.939  1.00 19.52           C
ATOM    313  SD  MET A  40      60.657  12.687 145.404  1.00 26.69           S
ATOM    314  CE  MET A  40      62.240  12.692 144.618  1.00 24.13           C
ATOM    315  N   PRO A  41      62.179  16.032 149.862  1.00 23.03           N
ATOM    316  CA  PRO A  41      63.047  16.276 151.025  1.00 22.76           C
ATOM    317  C   PRO A  41      64.426  15.659 150.848  1.00 19.32           C
ATOM    318  O   PRO A  41      64.549  14.454 150.600  1.00 20.08           O
ATOM    319  CB  PRO A  41      62.279  15.607 152.176  1.00 26.10           C
ATOM    320  CG  PRO A  41      60.869  15.596 151.731  1.00 23.96           C
ATOM    321  CD  PRO A  41      60.919  15.370 150.247  1.00 20.35           C
ATOM    322  N   GLY A  42      65.461  16.491 150.925  1.00 23.38           N
ATOM    323  CA  GLY A  42      66.829  16.046 150.789  1.00 21.79           C
ATOM    324  C   GLY A  42      67.317  15.845 149.372  1.00 23.28           C
ATOM    325  O   GLY A  42      68.476  15.449 149.191  1.00 25.24           O
ATOM    326  N   CYS A  43      66.494  16.118 148.361  1.00 20.56           N
ATOM    327  CA  CYS A  43      66.855  15.870 146.971  1.00 19.37           C
ATOM    328  C   CYS A  43      67.121  17.179 146.234  1.00 20.63           C
ATOM    329  O   CYS A  43      66.894  18.280 146.744  1.00 21.57           O
ATOM    330  CB  CYS A  43      65.754  15.083 146.247  1.00 20.55           C
ATOM    331  SG  CYS A  43      65.255  13.591 147.097  1.00 24.24           S
ATOM    332  N   GLY A  44      67.633  17.038 145.019  1.00 20.89           N
ATOM    333  CA  GLY A  44      67.865  18.180 144.160  1.00 24.68           C
ATOM    334  C   GLY A  44      66.592  18.616 143.461  1.00 23.11           C
ATOM    335  O   GLY A  44      65.527  18.023 143.604  1.00 22.92           O
ATOM    336  N   LEU A  45      66.715  19.683 142.682  1.00 19.67           N
ATOM    337  CA  LEU A  45      65.575  20.198 141.933  1.00 19.06           C
ATOM    338  C   LEU A  45      65.254  19.281 140.757  1.00 17.08           C
ATOM    339  O   LEU A  45      66.158  18.785 140.087  1.00 17.36           O
ATOM    340  CB  LEU A  45      65.888  21.609 141.425  1.00 17.17           C
ATOM    341  CG  LEU A  45      66.249  22.658 142.488  1.00 17.11           C
ATOM    342  CD1 LEU A  45      66.686  23.939 141.812  1.00 18.04           C
ATOM    343  CD2 LEU A  45      65.081  22.908 143.432  1.00 18.89           C
ATOM    344  N   GLU A  46      63.958  19.073 140.492  1.00 16.17           N
ATOM    345  CA  GLU A  46      63.487  18.274 139.358  1.00 16.17           C
ATOM    346  C   GLU A  46      62.508  19.093 138.537  1.00 16.19           C
ATOM    347  O   GLU A  46      61.474  19.513 139.060  1.00 16.82           O
ATOM    348  CB  GLU A  46      62.748  17.011 139.799  1.00 19.65           C
ATOM    349  CG  GLU A  46      63.452  15.968 140.607  1.00 28.45           C
ATOM    350  CD  GLU A  46      62.430  14.919 141.034  1.00 32.31           C
ATOM    351  OE1 GLU A  46      61.863  15.052 142.147  1.00 25.51           O
ATOM    352  OE2 GLU A  46      62.137  14.015 140.214  1.00 29.15           O
ATOM    353  N   TRP A  47      62.776  19.239 137.242  1.00 16.93           N
ATOM    354  CA  TRP A  47      61.839  19.911 136.340  1.00 15.18           C
ATOM    355  C   TRP A  47      60.685  18.962 135.995  1.00 18.14           C
ATOM    356  O   TRP A  47      60.922  17.838 135.529  1.00 19.76           O
ATOM    357  CB  TRP A  47      62.588  20.372 135.088  1.00 15.70           C
ATOM    358  CG  TRP A  47      61.759  21.126 134.087  1.00 15.97           C
ATOM    359  CD1 TRP A  47      61.445  22.464 134.101  1.00 15.49           C
ATOM    360  CD2 TRP A  47      61.143  20.582 132.905  1.00 18.69           C
ATOM    361  CE2 TRP A  47      60.472  21.644 132.254  1.00 18.15           C
ATOM    362  CE3 TRP A  47      61.093  19.299 132.340  1.00 20.21           C
ATOM    363  NE1 TRP A  47      60.670  22.776 133.003  1.00 17.21           N
ATOM    364  CZ2 TRP A  47      59.764  21.466 131.063  1.00 18.99           C
ATOM    365  CZ3 TRP A  47      60.385  19.118 131.154  1.00 19.18           C
ATOM    366  CH2 TRP A  47      59.730  20.201 130.527  1.00 18.68           C
ATOM    367  N   MET A  48      59.443  19.393 136.251  1.00 15.72           N
ATOM    368  CA  MET A  48      58.272  18.545 136.031  1.00 15.34           C
ATOM    369  C   MET A  48      57.626  18.752 134.672  1.00 17.12           C
ATOM    370  O   MET A  48      57.120  17.795 134.076  1.00 18.00           O
ATOM    371  CB  MET A  48      57.219  18.797 137.099  1.00 15.11           C
ATOM    372  CG  MET A  48      57.721  18.471 138.495  1.00 16.43           C
ATOM    373  SD  MET A  48      56.558  18.973 139.747  1.00 16.78           S
```

[2027]

```
ATOM    374  CE  MET A  48      55.254  17.747 139.539  1.00 17.75           C
ATOM    375  N   GLY A  49      57.590  19.987 134.203  1.00 16.45           N
ATOM    376  CA  GLY A  49      56.852  20.303 132.998  1.00 15.64           C
ATOM    377  C   GLY A  49      56.706  21.801 132.861  1.00 17.34           C
ATOM    378  O   GLY A  49      57.158  22.575 133.708  1.00 16.47           O
ATOM    379  N   ILE A  50      56.060  22.202 131.772  1.00 15.24           N
ATOM    380  CA  ILE A  50      56.010  23.615 131.420  1.00 17.66           C
ATOM    381  C   ILE A  50      54.713  23.880 130.672  1.00 19.19           C
ATOM    382  O   ILE A  50      54.165  22.989 130.015  1.00 16.10           O
ATOM    383  CB  ILE A  50      57.266  23.998 130.602  1.00 19.15           C
ATOM    384  CG1 ILE A  50      57.396  25.517 130.466  1.00 19.80           C
ATOM    385  CG2 ILE A  50      57.292  23.244 129.250  1.00 17.33           C
ATOM    386  CD1 ILE A  50      58.677  25.948 129.803  1.00 20.96           C
ATOM    387  N   ILE A  51      54.204  25.109 130.790  1.00 16.90           N
ATOM    388  CA  ILE A  51      53.018  25.522 130.039  1.00 17.27           C
ATOM    389  C   ILE A  51      53.277  26.872 129.387  1.00 20.15           C
ATOM    390  O   ILE A  51      53.935  27.744 129.962  1.00 17.31           O
ATOM    391  CB  ILE A  51      51.750  25.572 130.928  1.00 16.57           C
ATOM    392  CG1 ILE A  51      50.492  25.819 130.091  1.00 15.91           C
ATOM    393  CG2 ILE A  51      51.883  26.598 132.061  1.00 17.07           C
ATOM    394  CD1 ILE A  51      49.212  25.471 130.826  1.00 19.00           C
ATOM    395  N   ASP A  52      52.771  27.031 128.166  1.00 18.88           N
ATOM    396  CA  ASP A  52      52.717  28.327 127.507  1.00 18.74           C
ATOM    397  C   ASP A  52      51.344  28.902 127.800  1.00 20.05           C
ATOM    398  O   ASP A  52      50.347  28.374 127.286  1.00 18.77           O
ATOM    399  CB  ASP A  52      52.927  28.154 126.007  1.00 20.27           C
ATOM    400  CG  ASP A  52      52.853  29.447 125.233  1.00 24.97           C
ATOM    401  OD2 ASP A  52      53.160  29.401 124.012  1.00 25.03           O
ATOM    402  OD1 ASP A  52      52.487  30.489 125.814  1.00 22.68           O
ATOM    403  N   PRO A  53      51.231  29.958 128.611  1.00 20.01           N
ATOM    404  CA  PRO A  53      49.898  30.439 129.002  1.00 20.33           C
ATOM    405  C   PRO A  53      49.111  31.021 127.854  1.00 21.67           C
ATOM    406  O   PRO A  53      47.885  31.138 127.978  1.00 23.93           O
ATOM    407  CB  PRO A  53      50.199  31.511 130.058  1.00 23.85           C
ATOM    408  CG  PRO A  53      51.583  31.217 130.518  1.00 24.66           C
ATOM    409  CD  PRO A  53      52.304  30.670 129.325  1.00 22.51           C
ATOM    410  N   SER A  54      49.767  31.392 126.749  1.00 22.18           N
ATOM    411  CA  SER A  54      49.029  32.001 125.642  1.00 24.05           C
ATOM    412  C   SER A  54      48.051  31.013 125.017  1.00 27.84           C
ATOM    413  O   SER A  54      46.977  31.416 124.549  1.00 25.72           O
ATOM    414  CB  SER A  54      49.993  32.542 124.585  1.00 23.90           C
ATOM    415  OG  SER A  54      50.698  31.490 123.941  1.00 32.40           O
ATOM    416  N   ASP A  55      48.381  29.719 125.033  1.00 21.96           N
ATOM    417  CA  ASP A  55      47.548  28.725 124.369  1.00 23.44           C
ATOM    418  C   ASP A  55      47.412  27.430 125.156  1.00 22.61           C
ATOM    419  O   ASP A  55      46.768  26.489 124.670  1.00 21.47           O
ATOM    420  CB  ASP A  55      48.098  28.437 122.964  1.00 22.44           C
ATOM    421  CG  ASP A  55      49.489  27.822 122.976  1.00 28.34           C
ATOM    422  OD1 ASP A  55      50.085  27.660 124.055  1.00 23.68           O
ATOM    423  OD2 ASP A  55      50.005  27.494 121.882  1.00 31.24           O
ATOM    424  N   SER A  56      47.991  27.358 126.354  1.00 22.16           N
ATOM    425  CA  SER A  56      47.938  26.203 127.244  1.00 23.06           C
ATOM    426  C   SER A  56      48.636  24.980 126.665  1.00 24.51           C
ATOM    427  O   SER A  56      48.405  23.859 127.132  1.00 23.14           O
ATOM    428  CB  SER A  56      46.503  25.860 127.648  1.00 24.50           C
ATOM    429  OG  SER A  56      46.026  26.838 128.560  1.00 26.68           O
ATOM    430  N   ASP A  57      49.522  25.176 125.689  1.00 19.77           N
ATOM    431  CA  ASP A  57      50.384  24.087 125.246  1.00 22.30           C
ATOM    432  C   ASP A  57      51.319  23.670 126.375  1.00 21.46           C
ATOM    433  O   ASP A  57      51.888  24.515 127.066  1.00 20.39           O
ATOM    434  CB  ASP A  57      51.200  24.521 124.032  1.00 24.01           C
ATOM    435  CG  ASP A  57      52.162  23.456 123.580  1.00 29.05           C
ATOM    436  OD2 ASP A  57      53.364  23.558 123.920  1.00 38.16           O
ATOM    437  OD1 ASP A  57      51.718  22.514 122.887  1.00 36.53           O
ATOM    438  N   THR A  58      51.480  22.362 126.561  1.00 19.04           N
ATOM    439  CA  THR A  58      52.261  21.838 127.677  1.00 17.43           C
ATOM    440  C   THR A  58      53.265  20.797 127.210  1.00 20.39           C
ATOM    441  O   THR A  58      53.041  20.092 126.219  1.00 19.23           O
```

[2028]

```
ATOM    442  CB  THR A  58      51.382  21.182 128.728  1.00 20.06           C
ATOM    443  CG2 THR A  58      50.519  22.214 129.436  1.00 20.06           C
ATOM    444  OG1 THR A  58      50.554  20.185 128.103  1.00 19.54           O
ATOM    445  N   ARG A  59      54.378  20.701 127.947  1.00 17.58           N
ATOM    446  CA  ARG A  59      55.294  19.574 127.838  1.00 18.34           C
ATOM    447  C   ARG A  59      55.620  19.075 129.236  1.00 21.37           C
ATOM    448  O   ARG A  59      55.611  19.844 130.198  1.00 18.58           O
ATOM    449  CB  ARG A  59      56.563  19.942 127.093  1.00 17.66           C
ATOM    450  CG  ARG A  59      56.318  20.035 125.589  1.00 18.11           C
ATOM    451  CD  ARG A  59      57.546  20.374 124.843  1.00 19.69           C
ATOM    452  NE  ARG A  59      57.240  20.602 123.431  1.00 18.21           N
ATOM    453  CZ  ARG A  59      57.324  19.669 122.479  1.00 19.89           C
ATOM    454  NH1 ARG A  59      57.682  18.426 122.781  1.00 17.95           N
ATOM    455  NH2 ARG A  59      57.053  19.988 121.222  1.00 15.65           N
ATOM    456  N   TYR A  60      55.892  17.780 129.346  1.00 17.34           N
ATOM    457  CA  TYR A  60      56.073  17.142 130.643  1.00 17.67           C
ATOM    458  C   TYR A  60      57.346  16.316 130.638  1.00 19.27           C
ATOM    459  O   TYR A  60      57.654  15.649 129.645  1.00 19.85           O
ATOM    460  CB  TYR A  60      54.903  16.235 130.980  1.00 18.91           C
ATOM    461  CG  TYR A  60      53.584  16.942 131.150  1.00 19.63           C
ATOM    462  CD1 TYR A  60      53.226  17.471 132.380  1.00 19.41           C
ATOM    463  CD2 TYR A  60      52.689  17.067 130.089  1.00 16.51           C
ATOM    464  CE1 TYR A  60      52.024  18.111 132.554  1.00 21.13           C
ATOM    465  CE2 TYR A  60      51.466  17.709 130.256  1.00 18.30           C
ATOM    466  CZ  TYR A  60      51.153  18.235 131.499  1.00 16.32           C
ATOM    467  OH  TYR A  60      49.960  18.878 131.727  1.00 19.34           O
ATOM    468  N   SER A  61      58.072  16.341 131.750  1.00 16.34           N
ATOM    469  CA  SER A  61      59.123  15.358 131.932  1.00 18.95           C
ATOM    470  C   SER A  61      58.507  13.960 131.896  1.00 19.83           C
ATOM    471  O   SER A  61      57.390  13.764 132.390  1.00 19.92           O
ATOM    472  CB  SER A  61      59.846  15.587 133.260  1.00 22.00           C
ATOM    473  OG  SER A  61      60.746  14.524 133.523  1.00 24.66           O
ATOM    474  N   PRO A  62      59.192  12.971 131.317  1.00 22.33           N
ATOM    475  CA  PRO A  62      58.582  11.636 131.225  1.00 22.72           C
ATOM    476  C   PRO A  62      58.251  11.028 132.579  1.00 25.73           C
ATOM    477  O   PRO A  62      57.325  10.213 132.660  1.00 28.56           O
ATOM    478  CB  PRO A  62      59.638  10.816 130.468  1.00 24.49           C
ATOM    479  CG  PRO A  62      60.912  11.546 130.662  1.00 29.25           C
ATOM    480  CD  PRO A  62      60.538  13.006 130.718  1.00 23.78           C
ATOM    481  N   SER A  63      58.961  11.420 133.647  1.00 25.13           N
ATOM    482  CA  SER A  63      58.636  10.934 134.986  1.00 29.18           C
ATOM    483  C   SER A  63      57.272  11.418 135.469  1.00 27.49           C
ATOM    484  O   SER A  63      56.668  10.773 136.329  1.00 31.79           O
ATOM    485  CB  SER A  63      59.701  11.373 136.003  1.00 30.00           C
ATOM    486  OG  SER A  63      61.013  11.322 135.465  1.00 37.35           O
ATOM    487  N   PHE A  64      56.777  12.537 134.944  1.00 24.02           N
ATOM    488  CA  PHE A  64      55.558  13.141 135.454  1.00 22.28           C
ATOM    489  C   PHE A  64      54.391  13.082 134.483  1.00 24.15           C
ATOM    490  O   PHE A  64      53.244  13.274 134.904  1.00 24.20           O
ATOM    491  CB  PHE A  64      55.848  14.587 135.867  1.00 18.90           C
ATOM    492  CG  PHE A  64      56.853  14.669 136.980  1.00 18.86           C
ATOM    493  CD2 PHE A  64      58.210  14.768 136.704  1.00 23.19           C
ATOM    494  CD1 PHE A  64      56.444  14.543 138.301  1.00 20.57           C
ATOM    495  CE2 PHE A  64      59.143  14.793 137.737  1.00 24.00           C
ATOM    496  CE1 PHE A  64      57.364  14.573 139.327  1.00 21.36           C
ATOM    497  CZ  PHE A  64      58.713  14.697 139.049  1.00 19.91           C
ATOM    498  N   GLN A  65      54.647  12.782 133.216  1.00 23.54           N
ATOM    499  CA  GLN A  65      53.572  12.663 132.243  1.00 25.55           C
ATOM    500  C   GLN A  65      52.564  11.617 132.707  1.00 28.89           C
ATOM    501  O   GLN A  65      52.938  10.516 133.120  1.00 30.20           O
ATOM    502  CB  GLN A  65      54.174  12.298 130.883  1.00 25.73           C
ATOM    503  CG  GLN A  65      53.333  12.680 129.696  1.00 31.95           C
ATOM    504  CD  GLN A  65      52.154  11.769 129.561  1.00 41.19           C
ATOM    505  NE2 GLN A  65      51.028  12.312 129.103  1.00 38.89           N
ATOM    506  OE1 GLN A  65      52.246  10.576 129.877  1.00 42.58           O
ATOM    507  N   GLY A  66      51.279  11.973 132.672  1.00 27.95           N
ATOM    508  CA  GLY A  66      50.230  11.081 133.126  1.00 26.70           C
ATOM    509  C   GLY A  66      49.970  11.092 134.615  1.00 31.59           C
```

[2029]

```
ATOM    510  O   GLY A  66      48.931  10.576 135.050  1.00 33.21           O
ATOM    511  N   GLN A  67      50.872  11.665 135.410  1.00 26.56           N
ATOM    512  CA  GLN A  67      50.697  11.854 136.845  1.00 24.37           C
ATOM    513  C   GLN A  67      50.158  13.231 137.207  1.00 27.91           C
ATOM    514  O   GLN A  67      49.400  13.360 138.178  1.00 25.78           O
ATOM    515  CB  GLN A  67      52.043  11.656 137.555  1.00 27.32           C
ATOM    516  CG  GLN A  67      52.644  10.270 137.383  1.00 35.84           C
ATOM    517  CD  GLN A  67      51.840   9.205 138.102  1.00 37.21           C
ATOM    518  NE2 GLN A  67      51.725   8.027 137.501  1.00 38.23           N
ATOM    519  OE1 GLN A  67      51.335   9.441 139.200  1.00 38.87           O
ATOM    520  N   VAL A  68      50.535  14.272 136.459  1.00 24.04           N
ATOM    521  CA  VAL A  68      50.126  15.629 136.790  1.00 18.00           C
ATOM    522  C   VAL A  68      49.604  16.299 135.534  1.00 21.15           C
ATOM    523  O   VAL A  68      49.894  15.882 134.410  1.00 21.74           O
ATOM    524  CB  VAL A  68      51.276  16.464 137.400  1.00 19.27           C
ATOM    525  CG1 VAL A  68      51.785  15.825 138.672  1.00 21.85           C
ATOM    526  CG2 VAL A  68      52.404  16.636 136.404  1.00 20.18           C
ATOM    527  N   THR A  69      48.797  17.335 135.747  1.00 17.97           N
ATOM    528  CA  THR A  69      48.319  18.210 134.684  1.00 19.44           C
ATOM    529  C   THR A  69      48.677  19.642 135.046  1.00 17.61           C
ATOM    530  O   THR A  69      48.384  20.095 136.161  1.00 18.26           O
ATOM    531  CB  THR A  69      46.803  18.070 134.501  1.00 23.47           C
ATOM    532  CG2 THR A  69      46.276  19.067 133.453  1.00 23.25           C
ATOM    533  OG1 THR A  69      46.509  16.738 134.072  1.00 23.61           O
ATOM    534  N   ILE A  70      49.356  20.322 134.128  1.00 17.36           N
ATOM    535  CA  ILE A  70      49.646  21.748 134.240  1.00 16.33           C
ATOM    536  C   ILE A  70      48.611  22.499 133.413  1.00 19.62           C
ATOM    537  O   ILE A  70      48.295  22.103 132.281  1.00 18.43           O
ATOM    538  CB  ILE A  70      51.082  22.055 133.778  1.00 18.59           C
ATOM    539  CG1 ILE A  70      52.087  21.271 134.639  1.00 17.42           C
ATOM    540  CG2 ILE A  70      51.372  23.553 133.867  1.00 18.43           C
ATOM    541  CD1 ILE A  70      53.516  21.354 134.110  1.00 19.38           C
ATOM    542  N   SER A  71      48.052  23.559 133.982  1.00 17.30           N
ATOM    543  CA  SER A  71      47.029  24.339 133.293  1.00 18.64           C
ATOM    544  C   SER A  71      47.249  25.808 133.618  1.00 19.88           C
ATOM    545  O   SER A  71      48.106  26.165 134.428  1.00 18.30           O
ATOM    546  CB  SER A  71      45.613  23.911 133.690  1.00 19.70           C
ATOM    547  OG  SER A  71      45.391  24.096 135.080  1.00 19.57           O
ATOM    548  N   ALA A  72      46.477  26.671 132.969  1.00 17.43           N
ATOM    549  CA  ALA A  72      46.636  28.097 133.216  1.00 19.29           C
ATOM    550  C   ALA A  72      45.299  28.777 132.999  1.00 25.35           C
ATOM    551  O   ALA A  72      44.460  28.304 132.223  1.00 25.05           O
ATOM    552  CB  ALA A  72      47.705  28.711 132.313  1.00 17.67           C
ATOM    553  N   ASP A  73      45.089  29.869 133.725  1.00 21.69           N
ATOM    554  CA  ASP A  73      43.943  30.746 133.492  1.00 23.15           C
ATOM    555  C   ASP A  73      44.561  32.106 133.209  1.00 21.90           C
ATOM    556  O   ASP A  73      44.866  32.869 134.128  1.00 21.65           O
ATOM    557  CB  ASP A  73      42.986  30.768 134.666  1.00 21.17           C
ATOM    558  CG  ASP A  73      41.743  31.600 134.395  1.00 24.44           C
ATOM    559  OD1 ASP A  73      41.732  32.338 133.389  1.00 23.58           O
ATOM    560  OD2 ASP A  73      40.794  31.530 135.208  1.00 27.81           O
ATOM    561  N   LYS A  74      44.744  32.403 131.927  1.00 21.05           N
ATOM    562  CA  LYS A  74      45.503  33.587 131.554  1.00 20.79           C
ATOM    563  C   LYS A  74      44.765  34.871 131.899  1.00 25.26           C
ATOM    564  O   LYS A  74      45.404  35.917 132.051  1.00 24.39           O
ATOM    565  CB  LYS A  74      45.832  33.545 130.064  1.00 27.30           C
ATOM    566  CG  LYS A  74      44.623  33.497 129.156  1.00 29.38           C
ATOM    567  CD  LYS A  74      45.061  33.405 127.703  1.00 28.90           C
ATOM    568  CE  LYS A  74      43.872  33.492 126.780  1.00 36.52           C
ATOM    569  NZ  LYS A  74      44.310  33.411 125.365  1.00 43.03           N
ATOM    570  N   SER A  75      43.442  34.811 132.055  1.00 21.84           N
ATOM    571  CA  SER A  75      42.699  36.012 132.417  1.00 25.00           C
ATOM    572  C   SER A  75      43.019  36.497 133.828  1.00 26.32           C
ATOM    573  O   SER A  75      42.728  37.658 134.143  1.00 25.95           O
ATOM    574  CB  SER A  75      41.200  35.769 132.277  1.00 25.35           C
ATOM    575  OG  SER A  75      40.719  34.941 133.311  1.00 25.44           O
ATOM    576  N   ILE A  76      43.596  35.645 134.687  1.00 21.14           N
ATOM    577  CA  ILE A  76      43.952  36.050 136.047  1.00 22.39           C
```

[2030]

```
ATOM    578  C   ILE A  76      45.412  35.712 136.341  1.00 21.71           C
ATOM    579  O   ILE A  76      45.807  35.593 137.509  1.00 20.07           O
ATOM    580  CB  ILE A  76      43.016  35.410 137.089  1.00 23.24           C
ATOM    581  CG1 ILE A  76      43.097  33.876 137.006  1.00 21.40           C
ATOM    582  CG2 ILE A  76      41.579  35.891 136.866  1.00 24.20           C
ATOM    583  CD1 ILE A  76      42.419  33.154 138.131  1.00 22.68           C
ATOM    584  N   SER A  77      46.215  35.562 135.282  1.00 20.52           N
ATOM    585  CA  SER A  77      47.668  35.379 135.392  1.00 20.79           C
ATOM    586  C   SER A  77      48.047  34.275 136.381  1.00 20.47           C
ATOM    587  O   SER A  77      48.975  34.432 137.179  1.00 20.05           O
ATOM    588  CB  SER A  77      48.353  36.693 135.783  1.00 22.66           C
ATOM    589  OG  SER A  77      47.980  37.739 134.902  1.00 24.48           O
ATOM    590  N   THR A  78      47.333  33.149 136.337  1.00 19.78           N
ATOM    591  CA  THR A  78      47.570  32.049 137.265  1.00 16.52           C
ATOM    592  C   THR A  78      47.841  30.757 136.504  1.00 19.43           C
ATOM    593  O   THR A  78      47.103  30.402 135.571  1.00 20.42           O
ATOM    594  CB  THR A  78      46.396  31.874 138.238  1.00 18.98           C
ATOM    595  CG2 THR A  78      46.667  30.768 139.265  1.00 18.11           C
ATOM    596  OG1 THR A  78      46.186  33.100 138.959  1.00 20.39           O
ATOM    597  N   ALA A  79      48.918  30.078 136.890  1.00 16.68           N
ATOM    598  CA  ALA A  79      49.221  28.723 136.450  1.00 17.64           C
ATOM    599  C   ALA A  79      48.884  27.750 137.571  1.00 17.50           C
ATOM    600  O   ALA A  79      48.865  28.111 138.755  1.00 18.51           O
ATOM    601  CB  ALA A  79      50.696  28.582 136.061  1.00 18.24           C
ATOM    602  N   TYR A  80      48.622  26.497 137.190  1.00 16.07           N
ATOM    603  CA  TYR A  80      48.177  25.486 138.136  1.00 17.23           C
ATOM    604  C   TYR A  80      48.929  24.182 137.898  1.00 16.69           C
ATOM    605  O   TYR A  80      49.336  23.871 136.775  1.00 17.32           O
ATOM    606  CB  TYR A  80      46.663  25.203 138.024  1.00 20.09           C
ATOM    607  CG  TYR A  80      45.762  26.403 138.212  1.00 19.77           C
ATOM    608  CD2 TYR A  80      45.309  27.132 137.118  1.00 22.14           C
ATOM    609  CD1 TYR A  80      45.344  26.789 139.478  1.00 19.30           C
ATOM    610  CE2 TYR A  80      44.465  28.228 137.285  1.00 21.36           C
ATOM    611  CE1 TYR A  80      44.503  27.886 139.656  1.00 20.59           C
ATOM    612  CZ  TYR A  80      44.072  28.594 138.557  1.00 22.66           C
ATOM    613  OH  TYR A  80      43.241  29.678 138.741  1.00 24.46           O
ATOM    614  N   LEU A  81      49.080  23.416 138.970  1.00 16.38           N
ATOM    615  CA  LEU A  81      49.638  22.071 138.927  1.00 16.10           C
ATOM    616  C   LEU A  81      48.655  21.168 139.653  1.00 17.53           C
ATOM    617  O   LEU A  81      48.255  21.473 140.783  1.00 17.42           O
ATOM    618  CB  LEU A  81      51.013  22.031 139.592  1.00 19.54           C
ATOM    619  CG  LEU A  81      51.677  20.672 139.736  1.00 18.64           C
ATOM    620  CD1 LEU A  81      51.941  20.100 138.351  1.00 17.87           C
ATOM    621  CD2 LEU A  81      52.974  20.805 140.524  1.00 19.87           C
ATOM    622  N   GLN A  82      48.219  20.090 139.000  1.00 18.31           N
ATOM    623  CA  GLN A  82      47.149  19.261 139.542  1.00 19.93           C
ATOM    624  C   GLN A  82      47.552  17.793 139.514  1.00 19.00           C
ATOM    625  O   GLN A  82      48.154  17.325 138.543  1.00 18.46           O
ATOM    626  CB  GLN A  82      45.835  19.452 138.747  1.00 22.27           C
ATOM    627  CG  GLN A  82      44.567  18.882 139.416  1.00 28.46           C
ATOM    628  CD  GLN A  82      44.147  17.516 138.855  1.00 35.29           C
ATOM    629  NE2 GLN A  82      43.229  16.842 139.550  1.00 33.13           N
ATOM    630  OE1 GLN A  82      44.630  17.086 137.799  1.00 42.06           O
ATOM    631  N   TRP A  83      47.201  17.076 140.572  1.00 17.97           N
ATOM    632  CA  TRP A  83      47.333  15.627 140.647  1.00 20.34           C
ATOM    633  C   TRP A  83      45.953  14.993 140.707  1.00 19.46           C
ATOM    634  O   TRP A  83      45.073  15.469 141.429  1.00 19.44           O
ATOM    635  CB  TRP A  83      48.094  15.180 141.895  1.00 19.50           C
ATOM    636  CG  TRP A  83      49.513  15.525 141.964  1.00 21.71           C
ATOM    637  CD1 TRP A  83      50.563  14.707 141.688  1.00 22.45           C
ATOM    638  CD2 TRP A  83      50.068  16.767 142.399  1.00 19.04           C
ATOM    639  CE2 TRP A  83      51.467  16.635 142.348  1.00 19.38           C
ATOM    640  CE3 TRP A  83      49.516  17.980 142.828  1.00 18.39           C
ATOM    641  NE1 TRP A  83      51.744  15.365 141.917  1.00 21.46           N
ATOM    642  CZ2 TRP A  83      52.326  17.669 142.707  1.00 18.94           C
ATOM    643  CZ3 TRP A  83      50.375  19.010 143.186  1.00 20.70           C
ATOM    644  CH2 TRP A  83      51.759  18.846 143.123  1.00 20.27           C
ATOM    645  N   SER A  84      45.773  13.900 139.971  1.00 21.06           N
```

[2031]

```
ATOM    646  CA  SER A  84      44.554  13.128 140.141  1.00 20.10           C
ATOM    647  C   SER A  84      44.671  12.150 141.292  1.00 21.89           C
ATOM    648  O   SER A  84      43.654  11.816 141.909  1.00 21.01           O
ATOM    649  CB  SER A  84      44.218  12.367 138.853  1.00 25.41           C
ATOM    650  OG  SER A  84      45.373  11.699 138.353  1.00 33.62           O
ATOM    651  N   SER A  85      45.894  11.687 141.595  1.00 20.67           N
ATOM    652  CA  SER A  85      46.097  10.639 142.602  1.00 19.04           C
ATOM    653  C   SER A  85      47.488  10.819 143.221  1.00 17.77           C
ATOM    654  O   SER A  85      48.467  10.254 142.731  1.00 20.22           O
ATOM    655  CB  SER A  85      45.959   9.263 141.963  1.00 18.09           C
ATOM    656  OG  SER A  85      46.028   8.260 142.955  1.00 24.86           O
ATOM    657  N   LEU A  86      47.555  11.564 144.323  1.00 16.60           N
ATOM    658  CA  LEU A  86      48.842  11.799 144.970  1.00 16.96           C
ATOM    659  C   LEU A  86      49.485  10.486 145.416  1.00 19.66           C
ATOM    660  O   LEU A  86      48.805   9.566 145.879  1.00 18.24           O
ATOM    661  CB  LEU A  86      48.665  12.723 146.176  1.00 17.26           C
ATOM    662  CG  LEU A  86      48.472  14.209 145.847  1.00 18.04           C
ATOM    663  CD1 LEU A  86      47.901  14.958 147.039  1.00 19.26           C
ATOM    664  CD2 LEU A  86      49.805  14.832 145.441  1.00 20.50           C
ATOM    665  N   LYS A  87      50.805  10.408 145.275  1.00 17.76           N
ATOM    666  CA  LYS A  87      51.608   9.312 145.806  1.00 18.70           C
ATOM    667  C   LYS A  87      52.320   9.762 147.075  1.00 20.66           C
ATOM    668  O   LYS A  87      52.507  10.955 147.316  1.00 19.29           O
ATOM    669  CB  LYS A  87      52.648   8.839 144.784  1.00 19.23           C
ATOM    670  CG  LYS A  87      52.108   8.374 143.447  1.00 21.85           C
ATOM    671  CD  LYS A  87      53.269   7.806 142.654  1.00 26.95           C
ATOM    672  CE  LYS A  87      52.987   7.788 141.190  1.00 38.14           C
ATOM    673  NZ  LYS A  87      52.820   9.195 140.749  1.00 41.80           N
ATOM    674  N   ALA A  88      52.731   8.788 147.891  1.00 21.19           N
ATOM    675  CA  ALA A  88      53.500   9.137 149.083  1.00 22.70           C
ATOM    676  C   ALA A  88      54.774   9.876 148.703  1.00 21.17           C
ATOM    677  O   ALA A  88      55.182  10.828 149.385  1.00 21.75           O
ATOM    678  CB  ALA A  88      53.833   7.882 149.896  1.00 23.02           C
ATOM    679  N   SER A  89      55.393   9.474 147.598  1.00 19.15           N
ATOM    680  CA  SER A  89      56.613  10.107 147.119  1.00 23.25           C
ATOM    681  C   SER A  89      56.385  11.501 146.542  1.00 22.32           C
ATOM    682  O   SER A  89      57.368  12.159 146.179  1.00 23.08           O
ATOM    683  CB  SER A  89      57.277   9.211 146.071  1.00 27.11           C
ATOM    684  OG  SER A  89      56.440   9.036 144.936  1.00 24.11           O
ATOM    685  N   ASP A  90      55.145  11.977 146.437  1.00 18.40           N
ATOM    686  CA  ASP A  90      54.935  13.354 146.003  1.00 17.31           C
ATOM    687  C   ASP A  90      55.152  14.370 147.118  1.00 18.40           C
ATOM    688  O   ASP A  90      55.002  15.568 146.865  1.00 18.82           O
ATOM    689  CB  ASP A  90      53.541  13.516 145.398  1.00 16.96           C
ATOM    690  CG  ASP A  90      53.405  12.774 144.077  1.00 21.08           C
ATOM    691  OD1 ASP A  90      54.382  12.746 143.295  1.00 20.30           O
ATOM    692  OD2 ASP A  90      52.328  12.198 143.815  1.00 20.93           O
ATOM    693  N   THR A  91      55.516  13.937 148.332  1.00 17.85           N
ATOM    694  CA  THR A  91      55.901  14.880 149.378  1.00 18.42           C
ATOM    695  C   THR A  91      57.119  15.681 148.921  1.00 16.17           C
ATOM    696  O   THR A  91      58.165  15.102 148.619  1.00 18.33           O
ATOM    697  CB  THR A  91      56.212  14.126 150.671  1.00 19.36           C
ATOM    698  CG2 THR A  91      56.726  15.084 151.729  1.00 23.06           C
ATOM    699  OG1 THR A  91      55.011  13.509 151.146  1.00 22.12           O
ATOM    700  N   ALA A  92      56.982  17.005 148.862  1.00 16.78           N
ATOM    701  CA  ALA A  92      58.041  17.832 148.285  1.00 15.59           C
ATOM    702  C   ALA A  92      57.651  19.294 148.411  1.00 16.94           C
ATOM    703  O   ALA A  92      56.489  19.624 148.657  1.00 15.94           O
ATOM    704  CB  ALA A  92      58.286  17.511 146.812  1.00 17.23           C
ATOM    705  N   MET A  93      58.647  20.170 148.242  1.00 13.65           N
ATOM    706  CA  MET A  93      58.402  21.574 147.948  1.00 16.54           C
ATOM    707  C   MET A  93      58.206  21.723 146.440  1.00 16.32           C
ATOM    708  O   MET A  93      59.000  21.200 145.653  1.00 17.85           O
ATOM    709  CB  MET A  93      59.570  22.443 148.414  1.00 18.44           C
ATOM    710  CG  MET A  93      59.315  23.948 148.260  1.00 23.09           C
ATOM    711  SD  MET A  93      58.077  24.573 149.419  1.00 26.41           S
ATOM    712  CE  MET A  93      58.640  23.779 150.902  1.00 23.86           C
ATOM    713  N   TYR A  94      57.144  22.413 146.038  1.00 15.19           N
```

[2032]

```
ATOM    714  CA  TYR A  94      56.859  22.654 144.620  1.00 15.45           C
ATOM    715  C   TYR A  94      57.052  24.125 144.316  1.00 15.87           C
ATOM    716  O   TYR A  94      56.478  24.976 145.002  1.00 17.71           O
ATOM    717  CB  TYR A  94      55.429  22.223 144.274  1.00 17.23           C
ATOM    718  CG  TYR A  94      55.340  20.730 144.317  1.00 16.02           C
ATOM    719  CD2 TYR A  94      55.042  20.071 145.501  1.00 16.36           C
ATOM    720  CD1 TYR A  94      55.639  19.973 143.190  1.00 17.74           C
ATOM    721  CE2 TYR A  94      55.012  18.676 145.547  1.00 17.43           C
ATOM    722  CE1 TYR A  94      55.632  18.601 143.227  1.00 15.67           C
ATOM    723  CZ  TYR A  94      55.308  17.963 144.403  1.00 15.54           C
ATOM    724  OH  TYR A  94      55.286  16.592 144.439  1.00 18.85           O
ATOM    725  N   TYR A  95      57.870  24.423 143.306  1.00 14.93           N
ATOM    726  CA  TYR A  95      58.127  25.788 142.870  1.00 16.37           C
ATOM    727  C   TYR A  95      57.598  25.993 141.459  1.00 18.29           C
ATOM    728  O   TYR A  95      57.700  25.100 140.613  1.00 17.47           O
ATOM    729  CB  TYR A  95      59.616  26.111 142.863  1.00 15.02           C
ATOM    730  CG  TYR A  95      60.315  25.941 144.183  1.00 17.43           C
ATOM    731  CD2 TYR A  95      61.089  24.811 144.443  1.00 16.31           C
ATOM    732  CD1 TYR A  95      60.220  26.922 145.161  1.00 18.43           C
ATOM    733  CE2 TYR A  95      61.744  24.657 145.653  1.00 18.25           C
ATOM    734  CE1 TYR A  95      60.877  26.780 146.383  1.00 17.91           C
ATOM    735  CZ  TYR A  95      61.644  25.654 146.615  1.00 19.25           C
ATOM    736  OH  TYR A  95      62.305  25.509 147.821  1.00 20.96           O
ATOM    737  N   CYS A  96      57.037  27.167 141.205  1.00 16.08           N
ATOM    738  CA  CYS A  96      56.817  27.598 139.839  1.00 14.89           C
ATOM    739  C   CYS A  96      57.865  28.645 139.487  1.00 18.11           C
ATOM    740  O   CYS A  96      58.411  29.329 140.360  1.00 17.04           O
ATOM    741  CB  CYS A  96      55.408  28.153 139.629  1.00 17.53           C
ATOM    742  SG  CYS A  96      55.044  29.610 140.623  1.00 20.96           S
ATOM    743  N   ALA A  97      58.160  28.750 138.199  1.00 16.99           N
ATOM    744  CA  ALA A  97      59.236  29.617 137.746  1.00 16.00           C
ATOM    745  C   ALA A  97      58.943  30.067 136.320  1.00 18.06           C
ATOM    746  O   ALA A  97      58.458  29.284 135.504  1.00 18.27           O
ATOM    747  CB  ALA A  97      60.581  28.893 137.828  1.00 19.84           C
ATOM    748  N   ARG A  98      59.257  31.329 136.035  1.00 17.46           N
ATOM    749  CA  ARG A  98      58.998  31.980 134.758  1.00 16.53           C
ATOM    750  C   ARG A  98      60.189  31.860 133.811  1.00 17.15           C
ATOM    751  O   ARG A  98      61.343  31.879 134.242  1.00 20.57           O
ATOM    752  CB  ARG A  98      58.728  33.462 135.019  1.00 21.32           C
ATOM    753  CG  ARG A  98      58.368  34.271 133.817  1.00 23.46           C
ATOM    754  CD  ARG A  98      58.331  35.732 134.184  1.00 19.06           C
ATOM    755  NE  ARG A  98      59.625  36.380 133.959  1.00 20.67           N
ATOM    756  CZ  ARG A  98      59.743  37.672 133.691  1.00 22.66           C
ATOM    757  NH1 ARG A  98      58.656  38.430 133.638  1.00 20.78           N
ATOM    758  NH2 ARG A  98      60.933  38.201 133.470  1.00 22.85           N
ATOM    759  N   GLY A  99      59.906  31.790 132.506  1.00 18.54           N
ATOM    760  CA  GLY A  99      60.959  31.994 131.518  1.00 21.82           C
ATOM    761  C   GLY A  99      60.371  32.215 130.141  1.00 25.53           C
ATOM    762  O   GLY A  99      59.168  32.049 129.921  1.00 24.04           O
ATOM    763  N   ASP A 100      61.244  32.598 129.200  1.00 29.70           N
ATOM    764  CA  ASP A 100      60.796  32.747 127.818  1.00 28.90           C
ATOM    765  C   ASP A 100      61.847  32.272 126.823  1.00 40.04           C
ATOM    766  O   ASP A 100      61.797  32.662 125.647  1.00 37.23           O
ATOM    767  CB  ASP A 100      60.392  34.208 127.505  1.00 31.98           C
ATOM    768  CG  ASP A 100      61.577  35.188 127.480  1.00 37.64           C
ATOM    769  OD2 ASP A 100      61.331  36.386 127.184  1.00 35.23           O
ATOM    770  OD1 ASP A 100      62.736  34.796 127.758  1.00 37.48           O
ATOM    771  N   GLY A 101      62.803  31.455 127.262  1.00 36.06           N
ATOM    772  CA  GLY A 101      63.857  31.000 126.382  1.00 39.49           C
ATOM    773  C   GLY A 101      64.963  31.997 126.118  1.00 42.83           C
ATOM    774  O   GLY A 101      65.762  31.777 125.201  1.00 47.74           O
ATOM    775  N   SER A 102      65.041  33.092 126.880  1.00 39.71           N
ATOM    776  CA  SER A 102      66.136  34.045 126.742  1.00 35.45           C
ATOM    777  C   SER A 102      66.958  34.217 128.011  1.00 39.24           C
ATOM    778  O   SER A 102      68.122  34.632 127.923  1.00 37.76           O
ATOM    779  CB  SER A 102      65.605  35.424 126.312  1.00 42.97           C
ATOM    780  OG  SER A 102      64.971  36.101 127.393  1.00 43.55           O
ATOM    781  N   THR A 103      66.400  33.896 129.177  1.00 31.51           N
```

[2033]

```
ATOM    782  CA  THR A 103      67.052  34.132 130.457  1.00 31.55           C
ATOM    783  C   THR A 103      66.826  32.941 131.388  1.00 30.59           C
ATOM    784  O   THR A 103      66.808  33.100 132.613  1.00 27.54           O
ATOM    785  CB  THR A 103      66.532  35.438 131.080  1.00 31.13           C
ATOM    786  CG2 THR A 103      67.475  35.995 132.143  1.00 25.36           C
ATOM    787  OG1 THR A 103      66.398  36.426 130.050  1.00 40.39           O
ATOM    788  N   ASP A 104      66.632  31.747 130.815  1.00 28.12           N
ATOM    789  CA  ASP A 104      66.376  30.526 131.571  1.00 26.70           C
ATOM    790  C   ASP A 104      65.215  30.772 132.534  1.00 27.48           C
ATOM    791  O   ASP A 104      64.231  31.390 132.122  1.00 27.81           O
ATOM    792  CB  ASP A 104      67.660  30.051 132.245  1.00 27.81           C
ATOM    793  CG  ASP A 104      68.806  29.857 131.226  1.00 32.35           C
ATOM    794  OD2 ASP A 104      69.760  30.683 131.199  1.00 27.45           O
ATOM    795  OD1 ASP A 104      68.760  28.876 130.440  1.00 29.41           O
ATOM    796  N   LEU A 105      65.288  30.323 133.798  1.00 19.38           N
ATOM    797  CA  LEU A 105      64.160  30.460 134.735  1.00 21.97           C
ATOM    798  C   LEU A 105      64.428  31.661 135.639  1.00 18.84           C
ATOM    799  O   LEU A 105      65.042  31.538 136.699  1.00 18.92           O
ATOM    800  CB  LEU A 105      63.962  29.187 135.554  1.00 17.21           C
ATOM    801  CG  LEU A 105      63.689  27.925 134.743  1.00 20.06           C
ATOM    802  CD1 LEU A 105      63.685  26.708 135.669  1.00 20.61           C
ATOM    803  CD2 LEU A 105      62.364  28.067 133.983  1.00 23.35           C
ATOM    804  N   ASP A 106      63.942  32.835 135.238  1.00 17.28           N
ATOM    805  CA  ASP A 106      64.511  34.046 135.819  1.00 18.92           C
ATOM    806  C   ASP A 106      63.806  34.540 137.075  1.00 19.78           C
ATOM    807  O   ASP A 106      64.415  35.307 137.830  1.00 18.95           O
ATOM    808  CB  ASP A 106      64.595  35.169 134.769  1.00 20.84           C
ATOM    809  CG  ASP A 106      63.254  35.576 134.179  1.00 25.29           C
ATOM    810  OD1 ASP A 106      62.216  34.949 134.445  1.00 20.52           O
ATOM    811  OD2 ASP A 106      63.267  36.566 133.409  1.00 24.58           O
ATOM    812  N   TYR A 107      62.569  34.115 137.340  1.00 17.83           N
ATOM    813  CA  TYR A 107      61.870  34.468 138.567  1.00 17.84           C
ATOM    814  C   TYR A 107      61.135  33.241 139.080  1.00 16.29           C
ATOM    815  O   TYR A 107      60.583  32.461 138.294  1.00 17.00           O
ATOM    816  CB  TYR A 107      60.887  35.629 138.353  1.00 18.02           C
ATOM    817  CG  TYR A 107      61.583  36.949 138.152  1.00 18.05           C
ATOM    818  CD1 TYR A 107      61.963  37.719 139.245  1.00 20.22           C
ATOM    819  CD2 TYR A 107      61.883  37.415 136.877  1.00 21.05           C
ATOM    820  CE1 TYR A 107      62.607  38.931 139.077  1.00 23.63           C
ATOM    821  CE2 TYR A 107      62.542  38.622 136.702  1.00 21.85           C
ATOM    822  CZ  TYR A 107      62.896  39.368 137.806  1.00 26.94           C
ATOM    823  OH  TYR A 107      63.547  40.571 137.650  1.00 29.59           O
ATOM    824  N   TRP A 108      61.176  33.047 140.393  1.00 17.20           N
ATOM    825  CA  TRP A 108      60.646  31.856 141.036  1.00 16.01           C
ATOM    826  C   TRP A 108      59.612  32.251 142.076  1.00 16.18           C
ATOM    827  O   TRP A 108      59.768  33.274 142.768  1.00 16.13           O
ATOM    828  CB  TRP A 108      61.771  31.052 141.716  1.00 16.23           C
ATOM    829  CG  TRP A 108      62.754  30.412 140.781  1.00 16.55           C
ATOM    830  CD1 TRP A 108      63.574  31.035 139.891  1.00 15.99           C
ATOM    831  CD2 TRP A 108      63.027  29.012 140.675  1.00 14.47           C
ATOM    832  CE2 TRP A 108      64.019  28.852 139.690  1.00 16.72           C
ATOM    833  CE3 TRP A 108      62.526  27.873 141.329  1.00 16.49           C
ATOM    834  NE1 TRP A 108      64.340  30.098 139.223  1.00 16.95           N
ATOM    835  CZ2 TRP A 108      64.522  27.602 139.331  1.00 17.15           C
ATOM    836  CZ3 TRP A 108      63.019  26.620 140.953  1.00 18.35           C
ATOM    837  CH2 TRP A 108      64.014  26.503 139.970  1.00 18.12           C
ATOM    838  N   GLY A 109      58.567  31.423 142.207  1.00 14.60           N
ATOM    839  CA  GLY A 109      57.668  31.528 143.333  1.00 16.29           C
ATOM    840  C   GLY A 109      58.364  31.143 144.633  1.00 16.88           C
ATOM    841  O   GLY A 109      59.525  30.720 144.659  1.00 16.83           O
ATOM    842  N   GLN A 110      57.650  31.327 145.741  1.00 15.95           N
ATOM    843  CA  GLN A 110      58.227  31.071 147.057  1.00 18.56           C
ATOM    844  C   GLN A 110      58.108  29.612 147.480  1.00 18.59           C
ATOM    845  O   GLN A 110      58.687  29.229 148.509  1.00 19.18           O
ATOM    846  CB  GLN A 110      57.570  31.979 148.115  1.00 17.65           C
ATOM    847  CG  GLN A 110      56.291  31.436 148.758  1.00 21.74           C
ATOM    848  CD  GLN A 110      55.021  31.722 147.965  1.00 21.54           C
ATOM    849  NE2 GLN A 110      53.881  31.648 148.645  1.00 22.15           N
```

[2034]

```
ATOM    850  OE1 GLN A 110      55.057  31.997 146.763  1.00 19.67           O
ATOM    851  N   GLY A 111      57.395  28.795 146.712  1.00 17.78           N
ATOM    852  CA  GLY A 111      57.255  27.385 147.020  1.00 17.35           C
ATOM    853  C   GLY A 111      55.968  27.051 147.747  1.00 19.42           C
ATOM    854  O   GLY A 111      55.496  27.831 148.587  1.00 19.61           O
ATOM    855  N   THR A 112      55.391  25.896 147.423  1.00 16.13           N
ATOM    856  CA  THR A 112      54.256  25.313 148.132  1.00 16.61           C
ATOM    857  C   THR A 112      54.688  23.955 148.671  1.00 18.00           C
ATOM    858  O   THR A 112      55.113  23.085 147.898  1.00 18.47           O
ATOM    859  CB  THR A 112      53.041  25.134 147.209  1.00 16.48           C
ATOM    860  CG2 THR A 112      51.891  24.433 147.941  1.00 18.17           C
ATOM    861  OG1 THR A 112      52.588  26.393 146.714  1.00 19.16           O
ATOM    862  N   LEU A 113      54.568  23.765 149.984  1.00 17.37           N
ATOM    863  CA  LEU A 113      54.891  22.477 150.575  1.00 18.54           C
ATOM    864  C   LEU A 113      53.671  21.572 150.460  1.00 19.18           C
ATOM    865  O   LEU A 113      52.576  21.942 150.896  1.00 20.30           O
ATOM    866  CB  LEU A 113      55.290  22.632 152.043  1.00 20.36           C
ATOM    867  CG  LEU A 113      55.713  21.347 152.757  1.00 23.96           C
ATOM    868  CD1 LEU A 113      57.020  20.779 152.192  1.00 21.94           C
ATOM    869  CD2 LEU A 113      55.857  21.625 154.255  1.00 28.05           C
ATOM    870  N   VAL A 114      53.863  20.400 149.872  1.00 18.00           N
ATOM    871  CA  VAL A 114      52.824  19.373 149.758  1.00 19.66           C
ATOM    872  C   VAL A 114      53.293  18.155 150.539  1.00 19.30           C
ATOM    873  O   VAL A 114      54.348  17.586 150.229  1.00 18.37           O
ATOM    874  CB  VAL A 114      52.552  19.012 148.292  1.00 18.63           C
ATOM    875  CG1 VAL A 114      51.569  17.841 148.227  1.00 20.62           C
ATOM    876  CG2 VAL A 114      52.031  20.222 147.552  1.00 17.81           C
ATOM    877  N   THR A 115      52.536  17.765 151.565  1.00 17.17           N
ATOM    878  CA  THR A 115      52.871  16.596 152.365  1.00 19.63           C
ATOM    879  C   THR A 115      51.819  15.521 152.134  1.00 19.37           C
ATOM    880  O   THR A 115      50.622  15.788 152.284  1.00 22.81           O
ATOM    881  CB  THR A 115      52.943  16.938 153.857  1.00 22.26           C
ATOM    882  CG2 THR A 115      53.335  15.702 154.661  1.00 24.63           C
ATOM    883  OG1 THR A 115      53.918  17.967 154.069  1.00 23.03           O
ATOM    884  N   VAL A 116      52.270  14.314 151.785  1.00 20.33           N
ATOM    885  CA  VAL A 116      51.404  13.155 151.588  1.00 21.61           C
ATOM    886  C   VAL A 116      51.795  12.076 152.592  1.00 26.76           C
ATOM    887  O   VAL A 116      52.984  11.802 152.789  1.00 26.86           O
ATOM    888  CB  VAL A 116      51.501  12.619 150.140  1.00 22.13           C
ATOM    889  CG1 VAL A 116      50.451  11.528 149.907  1.00 20.70           C
ATOM    890  CG2 VAL A 116      51.340  13.744 149.115  1.00 18.22           C
ATOM    891  N   SER A 117      50.801  11.442 153.214  1.00 29.50           N
ATOM    892  CA  SER A 117      51.100  10.498 154.289  1.00 30.33           C
ATOM    893  C   SER A 117      51.588   9.159 153.722  1.00 35.42           C
ATOM    894  O   SER A 117      51.804   8.999 152.519  1.00 35.18           O
ATOM    895  CB  SER A 117      49.880  10.317 155.182  1.00 29.31           C
ATOM    896  OG  SER A 117      48.766   9.904 154.435  1.00 30.90           O
ATOM    897  O   ALA A 118      54.410   8.022 153.888  1.00 44.94           O
ATOM    898  N   ALA A 118      51.774   8.188 154.613  1.00 36.46           N
ATOM    899  CA  ALA A 118      52.324   6.865 154.262  1.00 43.23           C
ATOM    900  C   ALA A 118      53.782   6.961 153.794  1.00 40.93           C
ATOM    901  CB  ALA A 118      51.463   6.175 153.194  1.00 30.88           C
ATOM    902  O   GLY A 124      63.529   9.674 146.283  1.00 42.92           O
ATOM    903  N   GLY A 124      63.214   7.757 148.204  1.00 39.63           N
ATOM    904  CA  GLY A 124      64.549   8.250 147.910  1.00 37.96           C
ATOM    905  C   GLY A 124      64.574   9.253 146.772  1.00 37.90           C
ATOM    906  O   CYS A 125      66.576   8.859 143.854  1.00 31.43           O
ATOM    907  N   CYS A 125      65.760   9.633 146.340  1.00 34.24           N
ATOM    908  CA  CYS A 125      65.877  10.642 145.302  1.00 29.00           C
ATOM    909  C   CYS A 125      66.089   9.991 143.944  1.00 32.42           C
ATOM    910  CB  CYS A 125      67.047  11.582 145.616  1.00 29.15           C
ATOM    911  SG  CYS A 125      66.929  12.426 147.224  1.00 31.82           S
ATOM    912  O   PRO A 126      68.373  10.904 142.127  1.00 25.71           O
ATOM    913  N   PRO A 126      65.741  10.678 142.856  1.00 28.68           N
ATOM    914  CA  PRO A 126      66.150  10.194 141.544  1.00 28.90           C
ATOM    915  C   PRO A 126      67.661  10.133 141.457  1.00 30.01           C
ATOM    916  CB  PRO A 126      65.565  11.242 140.584  1.00 30.74           C
ATOM    917  CG  PRO A 126      65.409  12.458 141.389  1.00 33.09           C
```

[2035]

```
ATOM    918  CD  PRO A 126      65.077  11.991 142.777  1.00 27.40           C
ATOM    919  O   PRO A 127      69.961  10.755 139.039  1.00 26.89           O
ATOM    920  N   PRO A 127      68.195   9.213 140.659  1.00 30.53           N
ATOM    921  CA  PRO A 127      69.649   9.013 140.657  1.00 26.82           C
ATOM    922  C   PRO A 127      70.353  10.232 140.084  1.00 28.08           C
ATOM    923  CB  PRO A 127      69.833   7.773 139.774  1.00 26.33           C
ATOM    924  CG  PRO A 127      68.651   7.802 138.855  1.00 31.47           C
ATOM    925  CD  PRO A 127      67.511   8.347 139.683  1.00 30.55           C
ATOM    926  O   CYS A 128      73.081  12.537 138.224  1.00 26.89           O
ATOM    927  N   CYS A 128      71.390  10.695 140.784  1.00 21.57           N
ATOM    928  CA  CYS A 128      72.099  11.878 140.304  1.00 25.66           C
ATOM    929  C   CYS A 128      72.841  11.607 139.004  1.00 24.48           C
ATOM    930  CB  CYS A 128      73.075  12.384 141.360  1.00 23.25           C
ATOM    931  SG  CYS A 128      72.255  13.213 142.728  1.00 32.66           S
ATOM    932  O   GLY A 129      73.540   9.493 135.249  1.00 22.81           O
ATOM    933  N   GLY A 129      73.231  10.362 138.762  1.00 23.62           N
ATOM    934  CA  GLY A 129      73.930  10.031 137.535  1.00 20.78           C
ATOM    935  C   GLY A 129      73.040   9.802 136.336  1.00 25.03           C
ATOM    936  O   GLY A 130      70.607   7.473 135.887  1.00 23.82           O
ATOM    937  N   GLY A 130      71.730   9.949 136.507  1.00 22.69           N
ATOM    938  CA  GLY A 130      70.762   9.839 135.438  1.00 29.00           C
ATOM    939  C   GLY A 130      70.084   8.478 135.406  1.00 27.37           C
ATOM    940  O   GLY A 131      68.845   7.224 132.333  1.00 28.25           O
ATOM    941  N   GLY A 131      68.894   8.450 134.806  1.00 28.48           N
ATOM    942  CA  GLY A 131      68.132   7.242 134.637  1.00 30.73           C
ATOM    943  C   GLY A 131      68.074   6.783 133.195  1.00 30.12           C
ATOM    944  O   SER A 132      66.228   5.622 129.423  1.00 38.39           O
ATOM    945  N   SER A 132      67.131   5.883 132.922  1.00 35.38           N
ATOM    946  CA  SER A 132      67.050   5.234 131.619  1.00 34.68           C
ATOM    947  C   SER A 132      66.373   6.088 130.561  1.00 37.25           C
ATOM    948  CB  SER A 132      66.305   3.900 131.734  1.00 35.87           C
ATOM    949  OG  SER A 132      64.904   4.108 131.820  1.00 44.43           O
ATOM    950  O   GLY A 133      65.252   9.433 128.028  1.00 43.01           O
ATOM    951  N   GLY A 133      65.973   7.318 130.896  1.00 37.21           N
ATOM    952  CA  GLY A 133      65.169   8.126 130.001  1.00 35.21           C
ATOM    953  C   GLY A 133      65.909   8.853 128.898  1.00 38.34           C
ATOM    954  O   GLY A 134      68.500  11.740 127.101  1.00 34.01           O
ATOM    955  N   GLY A 134      67.242   8.854 128.903  1.00 34.32           N
ATOM    956  CA  GLY A 134      67.982   9.546 127.862  1.00 29.06           C
ATOM    957  C   GLY A 134      68.106  11.045 128.044  1.00 32.04           C
ATOM    958  N   GLU A 135      67.792  11.563 129.227  1.00 29.22           N
ATOM    959  CA  GLU A 135      67.884  12.988 129.501  1.00 26.42           C
ATOM    960  C   GLU A 135      69.345  13.435 129.570  1.00 26.07           C
ATOM    961  O   GLU A 135      70.261  12.633 129.795  1.00 25.94           O
ATOM    962  CB  GLU A 135      67.154  13.316 130.813  1.00 26.66           C
ATOM    963  CG  GLU A 135      67.876  12.874 132.106  1.00 27.46           C
ATOM    964  CD  GLU A 135      67.665  11.406 132.488  1.00 35.54           C
ATOM    965  OE1 GLU A 135      68.024  11.037 133.630  1.00 33.21           O
ATOM    966  OE2 GLU A 135      67.157  10.613 131.663  1.00 36.58           O
ATOM    967  N   ILE A 136      69.561  14.735 129.350  1.00 22.95           N
ATOM    968  CA  ILE A 136      70.884  15.342 129.499  1.00 21.36           C
ATOM    969  C   ILE A 136      71.216  15.429 130.982  1.00 24.17           C
ATOM    970  O   ILE A 136      70.477  16.044 131.764  1.00 21.48           O
ATOM    971  CB  ILE A 136      70.930  16.736 128.858  1.00 21.91           C
ATOM    972  CG1 ILE A 136      70.643  16.671 127.356  1.00 20.83           C
ATOM    973  CG2 ILE A 136      72.277  17.404 129.098  1.00 20.23           C
ATOM    974  CD1 ILE A 136      70.749  18.020 126.703  1.00 23.19           C
ATOM    975  N   VAL A 137      72.321  14.808 131.381  1.00 20.96           N
ATOM    976  CA  VAL A 137      72.707  14.742 132.786  1.00 21.04           C
ATOM    977  C   VAL A 137      73.755  15.806 133.053  1.00 21.19           C
ATOM    978  O   VAL A 137      74.761  15.900 132.337  1.00 21.14           O
ATOM    979  CB  VAL A 137      73.228  13.341 133.162  1.00 21.12           C
ATOM    980  CG1 VAL A 137      73.722  13.318 134.604  1.00 22.70           C
ATOM    981  CG2 VAL A 137      72.129  12.314 132.961  1.00 21.22           C
ATOM    982  N   LEU A 138      73.526  16.605 134.093  1.00 19.20           N
ATOM    983  CA  LEU A 138      74.483  17.598 134.552  1.00 19.32           C
ATOM    984  C   LEU A 138      75.110  17.091 135.845  1.00 19.67           C
[2036] ATOM    985  O   LEU A 138      74.403  16.873 136.838  1.00 21.93           O
```

```
ATOM    986  CB  LEU A 138      73.808  18.961 134.763  1.00 17.62           C
ATOM    987  CG  LEU A 138      73.035  19.468 133.540  1.00 16.90           C
ATOM    988  CD1 LEU A 138      72.387  20.805 133.846  1.00 18.30           C
ATOM    989  CD2 LEU A 138      73.954  19.575 132.380  1.00 20.06           C
ATOM    990  N   THR A 139      76.432  16.900 135.823  1.00 18.11           N
ATOM    991  CA  THR A 139      77.187  16.395 136.964  1.00 18.02           C
ATOM    992  C   THR A 139      77.915  17.560 137.613  1.00 20.12           C
ATOM    993  O   THR A 139      78.706  18.244 136.954  1.00 20.07           O
ATOM    994  CB  THR A 139      78.199  15.332 136.535  1.00 24.59           C
ATOM    995  CG2 THR A 139      79.019  14.860 137.731  1.00 25.53           C
ATOM    996  OG1 THR A 139      77.515  14.214 135.960  1.00 22.42           O
ATOM    997  N   GLN A 140      77.671  17.771 138.901  1.00 20.91           N
ATOM    998  CA  GLN A 140      78.293  18.859 139.641  1.00 20.22           C
ATOM    999  C   GLN A 140      79.347  18.321 140.597  1.00 24.13           C
ATOM   1000  O   GLN A 140      79.075  17.390 141.356  1.00 28.02           O
ATOM   1001  CB  GLN A 140      77.237  19.664 140.400  1.00 18.34           C
ATOM   1002  CG  GLN A 140      76.392  20.523 139.460  1.00 16.96           C
ATOM   1003  CD  GLN A 140      75.450  21.429 140.210  1.00 18.30           C
ATOM   1004  NE2 GLN A 140      75.998  22.459 140.859  1.00 17.34           N
ATOM   1005  OE1 GLN A 140      74.241  21.202 140.219  1.00 18.66           O
ATOM   1006  N   SER A 141      80.527  18.945 140.568  1.00 28.62           N
ATOM   1007  CA  SER A 141      81.686  18.598 141.390  1.00 31.90           C
ATOM   1008  C   SER A 141      82.213  19.794 142.175  1.00 35.17           C
ATOM   1009  O   SER A 141      82.224  20.941 141.675  1.00 34.00           O
ATOM   1010  CB  SER A 141      82.813  18.052 140.521  1.00 28.32           C
ATOM   1011  OG  SER A 141      82.455  16.785 139.988  1.00 44.78           O
ATOM   1012  N   PRO A 142      82.603  19.544 143.437  1.00 36.93           N
ATOM   1013  CA  PRO A 142      82.261  18.314 144.152  1.00 27.95           C
ATOM   1014  C   PRO A 142      80.853  18.470 144.694  1.00 28.34           C
ATOM   1015  O   PRO A 142      80.274  19.527 144.469  1.00 28.08           O
ATOM   1016  CB  PRO A 142      83.286  18.271 145.280  1.00 30.75           C
ATOM   1017  CG  PRO A 142      83.483  19.694 145.596  1.00 32.34           C
ATOM   1018  CD  PRO A 142      83.394  20.452 144.285  1.00 39.34           C
ATOM   1019  N   GLY A 143      80.311  17.476 145.398  1.00 24.95           N
ATOM   1020  CA  GLY A 143      78.977  17.636 145.949  1.00 23.18           C
ATOM   1021  C   GLY A 143      78.925  18.602 147.119  1.00 22.59           C
ATOM   1022  O   GLY A 143      77.887  19.229 147.366  1.00 19.52           O
ATOM   1023  N   THR A 144      80.030  18.726 147.855  1.00 23.59           N
ATOM   1024  CA  THR A 144      80.142  19.607 149.013  1.00 22.16           C
ATOM   1025  C   THR A 144      81.499  20.279 148.973  1.00 26.33           C
ATOM   1026  O   THR A 144      82.514  19.613 148.760  1.00 25.64           O
ATOM   1027  CB  THR A 144      79.996  18.836 150.332  1.00 23.73           C
ATOM   1028  CG2 THR A 144      80.036  19.783 151.538  1.00 26.65           C
ATOM   1029  OG1 THR A 144      78.767  18.104 150.331  1.00 29.36           O
ATOM   1030  N   LEU A 145      81.514  21.588 149.191  1.00 20.28           N
ATOM   1031  CA  LEU A 145      82.731  22.385 149.228  1.00 20.48           C
ATOM   1032  C   LEU A 145      82.802  23.066 150.585  1.00 21.84           C
ATOM   1033  O   LEU A 145      81.878  23.793 150.956  1.00 21.56           O
ATOM   1034  CB  LEU A 145      82.693  23.410 148.104  1.00 24.34           C
ATOM   1035  CG  LEU A 145      83.860  24.272 147.689  1.00 32.17           C
ATOM   1036  CD1 LEU A 145      85.115  23.431 147.449  1.00 34.96           C
ATOM   1037  CD2 LEU A 145      83.421  25.003 146.416  1.00 28.57           C
ATOM   1038  N   SER A 146      83.887  22.826 151.329  1.00 20.20           N
ATOM   1039  CA  SER A 146      84.089  23.415 152.650  1.00 20.78           C
ATOM   1040  C   SER A 146      85.228  24.413 152.549  1.00 22.66           C
ATOM   1041  O   SER A 146      86.381  24.022 152.332  1.00 24.59           O
ATOM   1042  CB  SER A 146      84.408  22.346 153.689  1.00 27.37           C
ATOM   1043  OG  SER A 146      83.416  21.346 153.672  1.00 34.46           O
ATOM   1044  N   LEU A 147      84.912  25.692 152.713  1.00 18.79           N
ATOM   1045  CA  LEU A 147      85.868  26.771 152.495  1.00 21.63           C
ATOM   1046  C   LEU A 147      85.714  27.790 153.610  1.00 25.84           C
ATOM   1047  O   LEU A 147      84.684  27.841 154.280  1.00 21.93           O
ATOM   1048  CB  LEU A 147      85.641  27.444 151.129  1.00 23.90           C
ATOM   1049  CG  LEU A 147      85.767  26.542 149.901  1.00 29.20           C
ATOM   1050  CD1 LEU A 147      85.277  27.285 148.654  1.00 25.71           C
ATOM   1051  CD2 LEU A 147      87.209  26.070 149.732  1.00 30.10           C
ATOM   1052  N   SER A 148      86.743  28.620 153.801  1.00 23.88           N
ATOM   1053  CA  SER A 148      86.569  29.661 154.799  1.00 26.55           C
```

[2037]

```
ATOM   1054  C   SER A 148      85.980  30.917 154.174  1.00 23.89           C
ATOM   1055  O   SER A 148      86.109  31.150 152.968  1.00 22.48           O
ATOM   1056  CB  SER A 148      87.904  29.984 155.464  1.00 30.65           C
ATOM   1057  OG  SER A 148      88.557  28.787 155.857  1.00 38.32           O
ATOM   1058  N   PRO A 149      85.314  31.748 154.973  1.00 25.99           N
ATOM   1059  CA  PRO A 149      84.830  33.032 154.457  1.00 24.08           C
ATOM   1060  C   PRO A 149      85.968  33.839 153.851  1.00 26.64           C
ATOM   1061  O   PRO A 149      87.095  33.838 154.355  1.00 24.10           O
ATOM   1062  CB  PRO A 149      84.247  33.715 155.701  1.00 28.07           C
ATOM   1063  CG  PRO A 149      83.900  32.589 156.603  1.00 32.63           C
ATOM   1064  CD  PRO A 149      84.954  31.555 156.392  1.00 32.22           C
ATOM   1065  N   GLY A 150      85.662  34.521 152.749  1.00 23.05           N
ATOM   1066  CA  GLY A 150      86.642  35.282 152.022  1.00 25.95           C
ATOM   1067  C   GLY A 150      87.368  34.511 150.940  1.00 24.10           C
ATOM   1068  O   GLY A 150      87.930  35.131 150.037  1.00 25.61           O
ATOM   1069  N   GLU A 151      87.390  33.182 151.016  1.00 19.26           N
ATOM   1070  CA  GLU A 151      88.078  32.377 150.020  1.00 20.63           C
ATOM   1071  C   GLU A 151      87.321  32.378 148.695  1.00 22.54           C
ATOM   1072  O   GLU A 151      86.112  32.621 148.633  1.00 20.65           O
ATOM   1073  CB  GLU A 151      88.234  30.928 150.492  1.00 22.94           C
ATOM   1074  CG  GLU A 151      89.206  30.655 151.640  1.00 29.83           C
ATOM   1075  CD  GLU A 151      89.251  29.141 151.990  1.00 40.88           C
ATOM   1076  OE1 GLU A 151      89.331  28.761 153.181  1.00 42.53           O
ATOM   1077  OE2 GLU A 151      89.159  28.295 151.064  1.00 45.32           O
ATOM   1078  N   ARG A 152      88.064  32.100 147.622  1.00 21.66           N
ATOM   1079  CA  ARG A 152      87.499  31.959 146.289  1.00 21.04           C
ATOM   1080  C   ARG A 152      86.926  30.561 146.119  1.00 21.21           C
ATOM   1081  O   ARG A 152      87.549  29.575 146.513  1.00 25.18           O
ATOM   1082  CB  ARG A 152      88.590  32.199 145.245  1.00 24.03           C
ATOM   1083  CG  ARG A 152      88.204  31.943 143.794  1.00 25.74           C
ATOM   1084  CD  ARG A 152      89.377  32.427 142.967  1.00 30.73           C
ATOM   1085  NE  ARG A 152      89.232  32.196 141.541  1.00 38.33           N
ATOM   1086  CZ  ARG A 152      88.931  33.144 140.655  1.00 43.97           C
ATOM   1087  NH1 ARG A 152      88.738  34.396 141.080  1.00 38.41           N
ATOM   1088  NH2 ARG A 152      88.847  32.824 139.369  1.00 48.92           N
ATOM   1089  N   ALA A 153      85.743  30.470 145.519  1.00 21.34           N
ATOM   1090  CA  ALA A 153      85.057  29.197 145.322  1.00 21.94           C
ATOM   1091  C   ALA A 153      84.885  28.926 143.830  1.00 21.19           C
ATOM   1092  O   ALA A 153      84.472  29.814 143.078  1.00 21.28           O
ATOM   1093  CB  ALA A 153      83.693  29.204 146.020  1.00 22.80           C
ATOM   1094  N   THR A 154      85.199  27.705 143.398  1.00 18.97           N
ATOM   1095  CA  THR A 154      85.054  27.313 141.998  1.00 20.76           C
ATOM   1096  C   THR A 154      84.214  26.048 141.927  1.00 21.68           C
ATOM   1097  O   THR A 154      84.578  25.021 142.509  1.00 24.04           O
ATOM   1098  CB  THR A 154      86.422  27.096 141.340  1.00 25.86           C
ATOM   1099  CG2 THR A 154      86.265  26.779 139.871  1.00 27.14           C
ATOM   1100  OG1 THR A 154      87.194  28.296 141.472  1.00 31.84           O
ATOM   1101  N   LEU A 155      83.098  26.125 141.219  1.00 19.32           N
ATOM   1102  CA  LEU A 155      82.133  25.042 141.125  1.00 20.41           C
ATOM   1103  C   LEU A 155      82.063  24.575 139.683  1.00 20.15           C
ATOM   1104  O   LEU A 155      82.080  25.392 138.758  1.00 19.09           O
ATOM   1105  CB  LEU A 155      80.744  25.487 141.585  1.00 17.28           C
ATOM   1106  CG  LEU A 155      80.479  25.644 143.086  1.00 20.52           C
ATOM   1107  CD1 LEU A 155      81.264  26.786 143.715  1.00 22.68           C
ATOM   1108  CD2 LEU A 155      78.999  25.852 143.276  1.00 19.54           C
ATOM   1109  N   SER A 156      81.946  23.268 139.492  1.00 19.49           N
ATOM   1110  CA  SER A 156      81.985  22.668 138.167  1.00 19.69           C
ATOM   1111  C   SER A 156      80.638  22.052 137.813  1.00 19.20           C
ATOM   1112  O   SER A 156      79.960  21.475 138.672  1.00 19.15           O
ATOM   1113  CB  SER A 156      83.090  21.608 138.099  1.00 27.79           C
ATOM   1114  OG  SER A 156      82.870  20.713 137.023  1.00 33.95           O
ATOM   1115  N   CYS A 157      80.261  22.164 136.539  1.00 18.36           N
ATOM   1116  CA  CYS A 157      79.060  21.523 136.006  1.00 18.04           C
ATOM   1117  C   CYS A 157      79.427  20.900 134.669  1.00 22.10           C
ATOM   1118  O   CYS A 157      79.807  21.623 133.749  1.00 22.86           O
ATOM   1119  CB  CYS A 157      77.929  22.545 135.830  1.00 20.99           C
ATOM   1120  SG  CYS A 157      76.385  21.922 135.091  1.00 23.36           S
ATOM   1121  N   ARG A 158      79.330  19.578 134.554  1.00 21.34           N
```

[2038]

```
ATOM   1122  CA  ARG A 158      79.654  18.891 133.308  1.00 20.88           C
ATOM   1123  C   ARG A 158      78.413  18.231 132.740  1.00 19.66           C
ATOM   1124  O   ARG A 158      77.694  17.524 133.452  1.00 21.91           O
ATOM   1125  CB  ARG A 158      80.749  17.849 133.514  1.00 23.52           C
ATOM   1126  CG  ARG A 158      82.088  18.480 133.802  1.00 31.79           C
ATOM   1127  CD  ARG A 158      83.153  17.452 134.018  1.00 41.37           C
ATOM   1128  NE  ARG A 158      84.462  18.102 134.013  1.00 48.48           N
ATOM   1129  CZ  ARG A 158      85.394  17.924 134.951  1.00 52.07           C
ATOM   1130  NH1 ARG A 158      85.142  17.103 135.964  1.00 52.90           N
ATOM   1131  NH2 ARG A 158      86.556  18.553 134.847  1.00 59.35           N
ATOM   1132  N   ALA A 159      78.205  18.408 131.443  1.00 21.75           N
ATOM   1133  CA  ALA A 159      77.004  17.935 130.789  1.00 22.40           C
ATOM   1134  C   ALA A 159      77.321  16.670 130.009  1.00 22.50           C
ATOM   1135  O   ALA A 159      78.394  16.556 129.413  1.00 25.33           O
ATOM   1136  CB  ALA A 159      76.442  19.014 129.860  1.00 23.22           C
ATOM   1137  N   SER A 160      76.374  15.730 130.007  1.00 21.01           N
ATOM   1138  CA  SER A 160      76.571  14.470 129.306  1.00 24.75           C
ATOM   1139  C   SER A 160      76.531  14.631 127.793  1.00 29.25           C
ATOM   1140  O   SER A 160      76.911  13.694 127.084  1.00 29.74           O
ATOM   1141  CB  SER A 160      75.526  13.451 129.745  1.00 23.54           C
ATOM   1142  OG  SER A 160      74.214  13.887 129.429  1.00 23.65           O
ATOM   1143  N   GLN A 161      76.085  15.777 127.286  1.00 23.62           N
ATOM   1144  CA  GLN A 161      76.193  16.085 125.866  1.00 25.51           C
ATOM   1145  C   GLN A 161      76.363  17.588 125.743  1.00 27.77           C
ATOM   1146  O   GLN A 161      76.059  18.333 126.677  1.00 24.51           O
ATOM   1147  CB  GLN A 161      74.977  15.580 125.085  1.00 26.06           C
ATOM   1148  CG  GLN A 161      73.727  16.422 125.244  1.00 31.28           C
ATOM   1149  CD  GLN A 161      72.599  15.950 124.331  1.00 34.86           C
ATOM   1150  NE2 GLN A 161      72.194  14.693 124.502  1.00 31.81           N
ATOM   1151  OE1 GLN A 161      72.107  16.708 123.473  1.00 35.56           O
ATOM   1152  N   SER A 162      76.886  18.030 124.601  1.00 23.04           N
ATOM   1153  CA  SER A 162      77.114  19.455 124.394  1.00 24.83           C
ATOM   1154  C   SER A 162      75.803  20.228 124.504  1.00 27.53           C
ATOM   1155  O   SER A 162      74.778  19.830 123.940  1.00 28.09           O
ATOM   1156  CB  SER A 162      77.765  19.702 123.028  1.00 26.16           C
ATOM   1157  OG  SER A 162      78.094  21.074 122.867  1.00 32.49           O
ATOM   1158  N   VAL A 163      75.827  21.322 125.256  1.00 27.60           N
ATOM   1159  CA  VAL A 163      74.677  22.211 125.368  1.00 27.47           C
ATOM   1160  C   VAL A 163      75.103  23.603 124.914  1.00 28.34           C
ATOM   1161  O   VAL A 163      76.182  24.086 125.276  1.00 29.97           O
ATOM   1162  CB  VAL A 163      74.095  22.240 126.801  1.00 30.92           C
ATOM   1163  CG1 VAL A 163      73.769  20.828 127.291  1.00 30.29           C
ATOM   1164  CG2 VAL A 163      75.033  22.893 127.745  1.00 29.07           C
ATOM   1165  N   SER A 164      74.268  24.239 124.097  1.00 29.94           N
ATOM   1166  CA  SER A 164      74.555  25.613 123.711  1.00 29.19           C
ATOM   1167  C   SER A 164      74.639  26.497 124.950  1.00 29.90           C
ATOM   1168  O   SER A 164      73.808  26.406 125.860  1.00 29.84           O
ATOM   1169  CB  SER A 164      73.488  26.133 122.753  1.00 32.27           C
ATOM   1170  OG  SER A 164      73.171  25.136 121.797  1.00 44.77           O
ATOM   1171  N   SER A 165      75.664  27.346 124.978  1.00 28.50           N
ATOM   1172  CA  SER A 165      75.934  28.171 126.151  1.00 29.96           C
ATOM   1173  C   SER A 165      74.758  29.072 126.497  1.00 29.19           C
ATOM   1174  O   SER A 165      74.597  29.456 127.660  1.00 25.09           O
ATOM   1175  CB ASER A 165      77.191  29.009 125.924  0.46 30.77           C
ATOM   1176  OG ASER A 165      78.337  28.191 125.816  0.46 29.94           O
ATOM   1177  CB BSER A 165      77.193  29.004 125.914  0.54 30.80           C
ATOM   1178  OG BSER A 165      77.006  29.887 124.819  0.54 31.20           O
ATOM   1179  N   SER A 166      73.921  29.414 125.514  1.00 24.24           N
ATOM   1180  CA  SER A 166      72.745  30.232 125.790  1.00 25.16           C
ATOM   1181  C   SER A 166      71.741  29.547 126.706  1.00 22.02           C
ATOM   1182  O   SER A 166      70.843  30.221 127.223  1.00 24.66           O
ATOM   1183  CB  SER A 166      72.036  30.598 124.487  1.00 29.77           C
ATOM   1184  OG  SER A 166      72.848  31.445 123.706  1.00 36.94           O
ATOM   1185  N   TYR A 167      71.854  28.235 126.914  1.00 23.06           N
ATOM   1186  CA  TYR A 167      70.812  27.488 127.611  1.00 23.83           C
ATOM   1187  C   TYR A 167      71.325  26.793 128.868  1.00 21.88           C
ATOM   1188  O   TYR A 167      70.719  25.812 129.313  1.00 20.28           O
ATOM   1189  CB  TYR A 167      70.173  26.478 126.653  1.00 26.51           C
```

[2039]

```
ATOM   1190  CG  TYR A 167      69.558  27.167 125.461  1.00 28.46           C
ATOM   1191  CD2 TYR A 167      70.163  27.114 124.209  1.00 33.26           C
ATOM   1192  CD1 TYR A 167      68.397  27.917 125.604  1.00 31.48           C
ATOM   1193  CE2 TYR A 167      69.599  27.775 123.107  1.00 30.52           C
ATOM   1194  CE1 TYR A 167      67.826  28.581 124.523  1.00 37.51           C
ATOM   1195  CZ  TYR A 167      68.430  28.510 123.278  1.00 39.04           C
ATOM   1196  OH  TYR A 167      67.843  29.179 122.216  1.00 38.65           O
ATOM   1197  N   LEU A 168      72.416  27.293 129.448  1.00 19.15           N
ATOM   1198  CA  LEU A 168      72.998  26.765 130.679  1.00 18.12           C
ATOM   1199  C   LEU A 168      72.913  27.857 131.736  1.00 20.31           C
ATOM   1200  O   LEU A 168      73.427  28.960 131.528  1.00 19.52           O
ATOM   1201  CB  LEU A 168      74.454  26.343 130.463  1.00 19.87           C
ATOM   1202  CG  LEU A 168      75.194  25.480 131.499  1.00 21.18           C
ATOM   1203  CD1 LEU A 168      75.559  26.225 132.795  1.00 18.52           C
ATOM   1204  CD2 LEU A 168      74.415  24.209 131.794  1.00 22.16           C
ATOM   1205  N   ALA A 169      72.292  27.545 132.877  1.00 16.40           N
ATOM   1206  CA  ALA A 169      72.071  28.528 133.926  1.00 16.39           C
ATOM   1207  C   ALA A 169      72.591  28.002 135.258  1.00 17.01           C
ATOM   1208  O   ALA A 169      72.772  26.794 135.446  1.00 17.35           O
ATOM   1209  CB  ALA A 169      70.579  28.880 134.057  1.00 17.98           C
ATOM   1210  N   TRP A 170      72.835  28.933 136.188  1.00 16.33           N
ATOM   1211  CA  TRP A 170      73.162  28.615 137.575  1.00 16.11           C
ATOM   1212  C   TRP A 170      72.130  29.266 138.482  1.00 14.91           C
ATOM   1213  O   TRP A 170      71.716  30.403 138.232  1.00 15.60           O
ATOM   1214  CB  TRP A 170      74.557  29.119 137.984  1.00 16.54           C
ATOM   1215  CG  TRP A 170      75.683  28.423 137.291  1.00 17.11           C
ATOM   1216  CD1 TRP A 170      76.228  28.740 136.081  1.00 17.79           C
ATOM   1217  CD2 TRP A 170      76.407  27.289 137.779  1.00 16.77           C
ATOM   1218  CE2 TRP A 170      77.375  26.960 136.811  1.00 15.83           C
ATOM   1219  CE3 TRP A 170      76.333  26.524 138.949  1.00 16.77           C
ATOM   1220  NE1 TRP A 170      77.254  27.857 135.779  1.00 17.46           N
ATOM   1221  CZ2 TRP A 170      78.264  25.905 136.982  1.00 19.22           C
ATOM   1222  CZ3 TRP A 170      77.213  25.483 139.116  1.00 19.45           C
ATOM   1223  CH2 TRP A 170      78.166  25.179 138.135  1.00 17.94           C
ATOM   1224  N   TYR A 171      71.743  28.550 139.541  1.00 13.77           N
ATOM   1225  CA  TYR A 171      70.787  29.005 140.543  1.00 13.85           C
ATOM   1226  C   TYR A 171      71.427  28.893 141.911  1.00 16.11           C
ATOM   1227  O   TYR A 171      72.199  27.967 142.172  1.00 15.76           O
ATOM   1228  CB  TYR A 171      69.485  28.168 140.524  1.00 14.91           C
ATOM   1229  CG  TYR A 171      68.847  28.278 139.180  1.00 15.49           C
ATOM   1230  CD1 TYR A 171      67.942  29.303 138.908  1.00 16.71           C
ATOM   1231  CD2 TYR A 171      69.201  27.410 138.146  1.00 17.74           C
ATOM   1232  CE1 TYR A 171      67.393  29.453 137.652  1.00 15.77           C
ATOM   1233  CE2 TYR A 171      68.656  27.542 136.898  1.00 16.42           C
ATOM   1234  CZ  TYR A 171      67.742  28.564 136.655  1.00 16.70           C
ATOM   1235  OH  TYR A 171      67.214  28.705 135.389  1.00 19.63           O
ATOM   1236  N   GLN A 172      71.089  29.833 142.784  1.00 15.23           N
ATOM   1237  CA  GLN A 172      71.482  29.783 144.183  1.00 14.42           C
ATOM   1238  C   GLN A 172      70.246  29.496 145.020  1.00 13.50           C
ATOM   1239  O   GLN A 172      69.217  30.164 144.855  1.00 14.88           O
ATOM   1240  CB  GLN A 172      72.105  31.107 144.612  1.00 15.99           C
ATOM   1241  CG  GLN A 172      72.484  31.195 146.079  1.00 15.80           C
ATOM   1242  CD  GLN A 172      72.804  32.630 146.481  1.00 19.05           C
ATOM   1243  NE2 GLN A 172      74.014  32.861 146.974  1.00 17.52           N
ATOM   1244  OE1 GLN A 172      71.968  33.525 146.328  1.00 19.56           O
ATOM   1245  N   GLN A 173      70.345  28.531 145.924  1.00 13.45           N
ATOM   1246  CA  GLN A 173      69.284  28.255 146.894  1.00 14.53           C
ATOM   1247  C   GLN A 173      69.873  28.434 148.290  1.00 14.95           C
ATOM   1248  O   GLN A 173      70.596  27.571 148.794  1.00 14.74           O
ATOM   1249  CB  GLN A 173      68.697  26.856 146.704  1.00 13.64           C
ATOM   1250  CG  GLN A 173      67.497  26.582 147.620  1.00 16.51           C
ATOM   1251  CD  GLN A 173      66.792  25.266 147.320  1.00 19.46           C
ATOM   1252  NE2 GLN A 173      65.469  25.259 147.467  1.00 17.71           N
ATOM   1253  OE1 GLN A 173      67.430  24.264 146.975  1.00 18.93           O
ATOM   1254  N   LYS A 174      69.596  29.576 148.893  1.00 15.33           N
ATOM   1255  CA  LYS A 174      70.013  29.811 150.263  1.00 16.84           C
ATOM   1256  C   LYS A 174      69.183  28.928 151.181  1.00 20.99           C
ATOM   1257  O   LYS A 174      68.064  28.554 150.829  1.00 19.94           O
```

[2040]

```
ATOM   1258  CB  LYS A 174      69.823  31.277 150.625  1.00 20.75           C
ATOM   1259  CG  LYS A 174      70.558  32.233 149.701  1.00 20.89           C
ATOM   1260  CD  LYS A 174      70.514  33.658 150.259  1.00 22.97           C
ATOM   1261  CE  LYS A 174      71.428  34.596 149.499  1.00 27.23           C
ATOM   1262  NZ  LYS A 174      71.298  35.995 150.017  1.00 30.07           N
ATOM   1263  N   PRO A 175      69.705  28.591 152.360  1.00 20.26           N
ATOM   1264  CA  PRO A 175      68.996  27.667 153.254  1.00 21.11           C
ATOM   1265  C   PRO A 175      67.577  28.128 153.553  1.00 22.11           C
ATOM   1266  O   PRO A 175      67.346  29.268 153.975  1.00 24.33           O
ATOM   1267  CB  PRO A 175      69.873  27.668 154.510  1.00 21.05           C
ATOM   1268  CG  PRO A 175      71.260  27.944 153.963  1.00 22.26           C
ATOM   1269  CD  PRO A 175      71.033  28.962 152.883  1.00 20.70           C
ATOM   1270  N   GLY A 176      66.623  27.234 153.307  1.00 21.65           N
ATOM   1271  CA  GLY A 176      65.235  27.484 153.614  1.00 26.16           C
ATOM   1272  C   GLY A 176      64.503  28.389 152.650  1.00 28.80           C
ATOM   1273  O   GLY A 176      63.345  28.734 152.919  1.00 26.14           O
ATOM   1274  N   GLN A 177      65.134  28.791 151.545  1.00 23.23           N
ATOM   1275  CA  GLN A 177      64.543  29.714 150.580  1.00 23.02           C
ATOM   1276  C   GLN A 177      64.342  29.021 149.240  1.00 19.43           C
ATOM   1277  O   GLN A 177      64.892  27.949 148.979  1.00 19.46           O
ATOM   1278  CB  GLN A 177      65.425  30.952 150.368  1.00 19.84           C
ATOM   1279  CG  GLN A 177      65.717  31.773 151.616  1.00 25.42           C
ATOM   1280  CD  GLN A 177      66.286  33.134 151.262  1.00 35.25           C
ATOM   1281  NE2 GLN A 177      67.210  33.630 152.082  1.00 35.81           N
ATOM   1282  OE1 GLN A 177      65.906  33.728 150.252  1.00 36.78           O
ATOM   1283  N   ALA A 178      63.559  29.663 148.382  1.00 20.76           N
ATOM   1284  CA  ALA A 178      63.424  29.210 147.005  1.00 18.63           C
ATOM   1285  C   ALA A 178      64.709  29.475 146.220  1.00 15.64           C
ATOM   1286  O   ALA A 178      65.438  30.428 146.518  1.00 17.31           O
ATOM   1287  CB  ALA A 178      62.275  29.937 146.316  1.00 21.15           C
ATOM   1288  N   PRO A 179      64.978  28.688 145.169  1.00 15.82           N
ATOM   1289  CA  PRO A 179      66.093  29.021 144.272  1.00 14.18           C
ATOM   1290  C   PRO A 179      65.874  30.377 143.627  1.00 15.83           C
ATOM   1291  O   PRO A 179      64.740  30.829 143.466  1.00 17.91           O
ATOM   1292  CB  PRO A 179      66.065  27.894 143.226  1.00 18.93           C
ATOM   1293  CG  PRO A 179      65.279  26.776 143.880  1.00 17.51           C
ATOM   1294  CD  PRO A 179      64.261  27.478 144.733  1.00 16.18           C
ATOM   1295  N   ARG A 180      66.975  31.048 143.285  1.00 15.39           N
ATOM   1296  CA  ARG A 180      66.911  32.241 142.452  1.00 16.35           C
ATOM   1297  C   ARG A 180      67.960  32.154 141.354  1.00 17.55           C
ATOM   1298  O   ARG A 180      69.002  31.510 141.512  1.00 16.63           O
ATOM   1299  CB  ARG A 180      67.120  33.511 143.278  1.00 17.62           C
ATOM   1300  CG  ARG A 180      68.521  33.637 143.877  1.00 21.39           C
ATOM   1301  CD  ARG A 180      68.744  35.037 144.479  1.00 25.87           C
ATOM   1302  NE  ARG A 180      70.055  35.136 145.108  1.00 23.72           N
ATOM   1303  CZ  ARG A 180      70.677  36.283 145.359  1.00 26.53           C
ATOM   1304  NH1 ARG A 180      70.104  37.432 145.022  1.00 26.61           N
ATOM   1305  NH2 ARG A 180      71.873  36.277 145.928  1.00 23.90           N
ATOM   1306  N   LEU A 181      67.676  32.801 140.230  1.00 16.75           N
ATOM   1307  CA  LEU A 181      68.610  32.803 139.115  1.00 16.43           C
ATOM   1308  C   LEU A 181      69.852  33.600 139.474  1.00 15.58           C
ATOM   1309  O   LEU A 181      69.764  34.716 139.999  1.00 18.07           O
ATOM   1310  CB  LEU A 181      67.954  33.401 137.880  1.00 17.26           C
ATOM   1311  CG  LEU A 181      68.855  33.505 136.659  1.00 16.80           C
ATOM   1312  CD1 LEU A 181      69.258  32.119 136.156  1.00 16.88           C
ATOM   1313  CD2 LEU A 181      68.148  34.273 135.571  1.00 17.95           C
ATOM   1314  N   LEU A 182      71.010  33.014 139.201  1.00 16.82           N
ATOM   1315  CA  LEU A 182      72.305  33.637 139.436  1.00 17.64           C
ATOM   1316  C   LEU A 182      72.972  34.042 138.128  1.00 19.55           C
ATOM   1317  O   LEU A 182      73.293  35.219 137.931  1.00 18.52           O
ATOM   1318  CB  LEU A 182      73.177  32.641 140.210  1.00 21.28           C
ATOM   1319  CG  LEU A 182      74.273  33.119 141.129  1.00 23.16           C
ATOM   1320  CD2 LEU A 182      75.051  31.894 141.615  1.00 19.08           C
ATOM   1321  CD1 LEU A 182      73.674  33.872 142.303  1.00 20.57           C
ATOM   1322  N   ILE A 183      73.161  33.078 137.221  1.00 16.46           N
ATOM   1323  CA  ILE A 183      73.832  33.251 135.935  1.00 17.84           C
ATOM   1324  C   ILE A 183      72.927  32.631 134.888  1.00 18.56           C
ATOM   1325  O   ILE A 183      72.449  31.509 135.083  1.00 17.43           O
```

[2041]

```
ATOM   1326  CB  ILE A 183      75.206  32.550 135.898  1.00 18.75           C
ATOM   1327  CG1 ILE A 183      76.144  33.044 137.008  1.00 21.42           C
ATOM   1328  CG2 ILE A 183      75.852  32.679 134.525  1.00 19.91           C
ATOM   1329  CD1 ILE A 183      76.722  34.403 136.763  1.00 23.35           C
ATOM   1330  N   TYR A 184      72.690  33.343 133.790  1.00 19.10           N
ATOM   1331  CA  TYR A 184      71.986  32.765 132.654  1.00 21.02           C
ATOM   1332  C   TYR A 184      72.896  32.768 131.435  1.00 19.94           C
ATOM   1333  O   TYR A 184      73.860  33.531 131.363  1.00 19.94           O
ATOM   1334  CB  TYR A 184      70.674  33.511 132.351  1.00 20.61           C
ATOM   1335  CG  TYR A 184      70.827  34.946 131.891  1.00 23.82           C
ATOM   1336  CD1 TYR A 184      70.946  35.986 132.808  1.00 23.13           C
ATOM   1337  CD2 TYR A 184      70.829  35.261 130.537  1.00 24.39           C
ATOM   1338  CE1 TYR A 184      71.074  37.299 132.382  1.00 26.21           C
ATOM   1339  CE2 TYR A 184      70.958  36.562 130.103  1.00 27.17           C
ATOM   1340  CZ  TYR A 184      71.083  37.579 131.022  1.00 25.88           C
ATOM   1341  OH  TYR A 184      71.219  38.879 130.579  1.00 30.40           O
ATOM   1342  N   GLY A 185      72.581  31.903 130.477  1.00 19.94           N
ATOM   1343  CA  GLY A 185      73.380  31.835 129.261  1.00 20.64           C
ATOM   1344  C   GLY A 185      74.851  31.646 129.543  1.00 24.29           C
ATOM   1345  O   GLY A 185      75.700  32.271 128.889  1.00 23.27           O
ATOM   1346  N   ALA A 186      75.166  30.828 130.556  1.00 19.47           N
ATOM   1347  CA  ALA A 186      76.509  30.408 130.962  1.00 19.54           C
ATOM   1348  C   ALA A 186      77.335  31.507 131.623  1.00 19.12           C
ATOM   1349  O   ALA A 186      78.109  31.216 132.545  1.00 19.80           O
ATOM   1350  CB  ALA A 186      77.291  29.832 129.775  1.00 22.83           C
ATOM   1351  N   SER A 187      77.198  32.766 131.183  1.00 20.99           N
ATOM   1352  CA  SER A 187      78.119  33.804 131.636  1.00 20.57           C
ATOM   1353  C   SER A 187      77.478  35.149 131.973  1.00 22.38           C
ATOM   1354  O   SER A 187      78.211  36.087 132.312  1.00 23.63           O
ATOM   1355  CB  SER A 187      79.202  34.044 130.575  1.00 24.32           C
ATOM   1356  OG  SER A 187      78.608  34.464 129.357  1.00 24.89           O
ATOM   1357  N   SER A 188      76.162  35.294 131.874  1.00 20.87           N
ATOM   1358  CA  SER A 188      75.502  36.563 132.152  1.00 23.20           C
ATOM   1359  C   SER A 188      74.961  36.573 133.574  1.00 22.03           C
ATOM   1360  O   SER A 188      74.218  35.667 133.961  1.00 21.27           O
ATOM   1361  CB  SER A 188      74.369  36.806 131.156  1.00 24.65           C
ATOM   1362  OG  SER A 188      74.885  37.039 129.853  1.00 26.09           O
ATOM   1363  N   ARG A 189      75.325  37.600 134.344  1.00 22.93           N
ATOM   1364  CA  ARG A 189      74.757  37.779 135.675  1.00 21.92           C
ATOM   1365  C   ARG A 189      73.319  38.272 135.596  1.00 23.15           C
ATOM   1366  O   ARG A 189      73.017  39.233 134.879  1.00 26.46           O
ATOM   1367  CB  ARG A 189      75.584  38.783 136.470  1.00 24.06           C
ATOM   1368  CG  ARG A 189      76.533  38.180 137.465  1.00 28.52           C
ATOM   1369  CD  ARG A 189      77.153  39.281 138.305  1.00 30.64           C
ATOM   1370  NE  ARG A 189      77.700  40.322 137.445  1.00 32.92           N
ATOM   1371  CZ  ARG A 189      78.889  40.240 136.861  1.00 39.09           C
ATOM   1372  NH1 ARG A 189      79.658  39.164 137.061  1.00 40.39           N
ATOM   1373  NH2 ARG A 189      79.313  41.233 136.086  1.00 45.53           N
ATOM   1374  N   ALA A 190      72.436  37.648 136.367  1.00 22.67           N
ATOM   1375  CA  ALA A 190      71.059  38.103 136.426  1.00 23.14           C
ATOM   1376  C   ALA A 190      70.981  39.439 137.163  1.00 25.82           C
ATOM   1377  O   ALA A 190      71.900  39.840 137.890  1.00 22.55           O
ATOM   1378  CB  ALA A 190      70.177  37.058 137.107  1.00 22.48           C
ATOM   1379  N   THR A 191      69.872  40.143 136.965  1.00 27.21           N
ATOM   1380  CA  THR A 191      69.785  41.490 137.514  1.00 31.16           C
ATOM   1381  C   THR A 191      69.822  41.449 139.039  1.00 29.46           C
ATOM   1382  O   THR A 191      69.204  40.591 139.675  1.00 29.42           O
ATOM   1383  CB  THR A 191      68.530  42.204 137.006  1.00 35.99           C
ATOM   1384  CG2 THR A 191      68.551  42.250 135.486  1.00 40.27           C
ATOM   1385  OG1 THR A 191      67.354  41.516 137.449  1.00 41.15           O
ATOM   1386  N   GLY A 192      70.600  42.361 139.621  1.00 25.58           N
ATOM   1387  CA  GLY A 192      70.761  42.440 141.056  1.00 25.69           C
ATOM   1388  C   GLY A 192      71.785  41.502 141.666  1.00 27.97           C
ATOM   1389  O   GLY A 192      72.088  41.643 142.857  1.00 29.48           O
ATOM   1390  N   ILE A 193      72.330  40.557 140.908  1.00 22.70           N
ATOM   1391  CA  ILE A 193      73.249  39.560 141.474  1.00 23.37           C
ATOM   1392  C   ILE A 193      74.617  40.203 141.688  1.00 25.25           C
ATOM   1393  O   ILE A 193      75.122  40.877 140.775  1.00 25.75           O
```

[2042]

```
ATOM   1394  CB  ILE A 193      73.343  38.343 140.545  1.00 23.74           C
ATOM   1395  CG1 ILE A 193      72.003  37.592 140.518  1.00 22.09           C
ATOM   1396  CG2 ILE A 193      74.478  37.415 140.951  1.00 21.03           C
ATOM   1397  CD1 ILE A 193      71.489  37.246 141.883  1.00 20.85           C
ATOM   1398  N   PRO A 194      75.259  40.001 142.847  1.00 24.60           N
ATOM   1399  CA  PRO A 194      76.574  40.618 143.099  1.00 26.43           C
ATOM   1400  C   PRO A 194      77.616  40.212 142.065  1.00 24.21           C
ATOM   1401  O   PRO A 194      77.634  39.082 141.582  1.00 22.62           O
ATOM   1402  CB  PRO A 194      76.950  40.091 144.489  1.00 23.47           C
ATOM   1403  CG  PRO A 194      75.639  39.742 145.130  1.00 28.54           C
ATOM   1404  CD  PRO A 194      74.767  39.248 144.012  1.00 24.49           C
ATOM   1405  N   ASP A 195      78.527  41.132 141.739  1.00 23.95           N
ATOM   1406  CA  ASP A 195      79.442  40.767 140.666  1.00 25.61           C
ATOM   1407  C   ASP A 195      80.612  39.899 141.128  1.00 20.49           C
ATOM   1408  O   ASP A 195      81.457  39.553 140.300  1.00 23.71           O
ATOM   1409  CB  ASP A 195      79.950  42.005 139.918  1.00 32.82           C
ATOM   1410  CG  ASP A 195      80.472  43.065 140.828  1.00 33.66           C
ATOM   1411  OD2 ASP A 195      80.435  44.252 140.423  1.00 40.20           O
ATOM   1412  OD1 ASP A 195      80.923  42.724 141.943  1.00 34.49           O
ATOM   1413  N   ARG A 196      80.666  39.485 142.397  1.00 20.48           N
ATOM   1414  CA  ARG A 196      81.608  38.427 142.745  1.00 21.04           C
ATOM   1415  C   ARG A 196      81.212  37.077 142.153  1.00 19.40           C
ATOM   1416  O   ARG A 196      82.034  36.157 142.160  1.00 20.41           O
ATOM   1417  CB  ARG A 196      81.760  38.305 144.267  1.00 20.29           C
ATOM   1418  CG  ARG A 196      80.500  37.932 144.996  1.00 19.19           C
ATOM   1419  CD  ARG A 196      80.741  37.930 146.505  1.00 19.88           C
ATOM   1420  NE  ARG A 196      79.521  37.595 147.219  1.00 19.27           N
ATOM   1421  CZ  ARG A 196      78.629  38.495 147.612  1.00 26.74           C
ATOM   1422  NH1 ARG A 196      78.848  39.780 147.369  1.00 23.94           N
ATOM   1423  NH2 ARG A 196      77.526  38.111 148.253  1.00 24.21           N
ATOM   1424  N   PHE A 197      79.991  36.942 141.632  1.00 18.42           N
ATOM   1425  CA  PHE A 197      79.582  35.745 140.910  1.00 17.35           C
ATOM   1426  C   PHE A 197      79.872  35.893 139.422  1.00 19.36           C
ATOM   1427  O   PHE A 197      79.513  36.907 138.810  1.00 21.49           O
ATOM   1428  CB  PHE A 197      78.093  35.470 141.111  1.00 16.93           C
ATOM   1429  CG  PHE A 197      77.725  35.154 142.520  1.00 18.93           C
ATOM   1430  CD2 PHE A 197      77.193  36.124 143.348  1.00 21.06           C
ATOM   1431  CD1 PHE A 197      77.880  33.868 143.017  1.00 20.39           C
ATOM   1432  CE2 PHE A 197      76.847  35.827 144.658  1.00 20.13           C
ATOM   1433  CE1 PHE A 197      77.533  33.572 144.319  1.00 20.37           C
ATOM   1434  CZ  PHE A 197      77.007  34.559 145.138  1.00 20.48           C
ATOM   1435  N   SER A 198      80.492  34.871 138.834  1.00 19.29           N
ATOM   1436  CA  SER A 198      80.684  34.868 137.390  1.00 20.44           C
ATOM   1437  C   SER A 198      80.644  33.440 136.870  1.00 20.92           C
ATOM   1438  O   SER A 198      81.033  32.499 137.562  1.00 21.70           O
ATOM   1439  CB  SER A 198      81.998  35.536 136.984  1.00 24.72           C
ATOM   1440  OG  SER A 198      83.099  34.798 137.458  1.00 30.41           O
ATOM   1441  N   GLY A 199      80.173  33.286 135.641  1.00 21.99           N
ATOM   1442  CA  GLY A 199      80.082  31.982 135.012  1.00 18.47           C
ATOM   1443  C   GLY A 199      80.866  31.961 133.716  1.00 22.00           C
ATOM   1444  O   GLY A 199      81.024  32.988 133.055  1.00 19.34           O
ATOM   1445  N   SER A 200      81.361  30.782 133.357  1.00 20.80           N
ATOM   1446  CA  SER A 200      82.075  30.621 132.098  1.00 25.93           C
ATOM   1447  C   SER A 200      81.905  29.189 131.618  1.00 26.99           C
ATOM   1448  O   SER A 200      81.389  28.327 132.331  1.00 23.12           O
ATOM   1449  CB ASER A 200      83.563  30.970 132.243  0.86 26.43           C
ATOM   1450  OG ASER A 200      84.161  30.189 133.262  0.86 31.46           O
ATOM   1451  CB BSER A 200      83.561  30.971 132.240  0.14 26.49           C
ATOM   1452  OG BSER A 200      84.257  30.732 131.029  0.14 29.15           O
ATOM   1453  N   GLY A 201      82.349  28.943 130.396  1.00 30.42           N
ATOM   1454  CA  GLY A 201      82.342  27.612 129.828  1.00 27.70           C
ATOM   1455  C   GLY A 201      81.464  27.520 128.597  1.00 28.99           C
ATOM   1456  O   GLY A 201      80.726  28.438 128.244  1.00 26.63           O
ATOM   1457  N   SER A 202      81.575  26.371 127.942  1.00 27.22           N
ATOM   1458  CA  SER A 202      80.804  26.066 126.746  1.00 27.71           C
ATOM   1459  C   SER A 202      80.878  24.565 126.536  1.00 26.08           C
ATOM   1460  O   SER A 202      81.696  23.873 127.149  1.00 27.94           O
ATOM   1461  CB  SER A 202      81.345  26.789 125.517  1.00 35.61           C
```

[2043]

```
ATOM   1462  OG  SER A 202      82.624  26.264 125.192  1.00 36.24           O
ATOM   1463  N   GLY A 203      80.022  24.074 125.647  1.00 28.46           N
ATOM   1464  CA  GLY A 203      80.035  22.677 125.272  1.00 26.80           C
ATOM   1465  C   GLY A 203      79.540  21.796 126.398  1.00 28.17           C
ATOM   1466  O   GLY A 203      78.340  21.770 126.684  1.00 25.72           O
ATOM   1467  N   THR A 204      80.451  21.073 127.048  1.00 26.62           N
ATOM   1468  CA  THR A 204      80.086  20.196 128.148  1.00 27.32           C
ATOM   1469  C   THR A 204      80.695  20.610 129.479  1.00 27.65           C
ATOM   1470  O   THR A 204      80.464  19.923 130.475  1.00 27.77           O
ATOM   1471  CB  THR A 204      80.504  18.743 127.862  1.00 31.06           C
ATOM   1472  CG2 THR A 204      79.876  18.229 126.562  1.00 28.69           C
ATOM   1473  OG1 THR A 204      81.932  18.665 127.770  1.00 30.53           O
ATOM   1474  N   ASP A 205      81.462  21.696 129.541  1.00 26.76           N
ATOM   1475  CA  ASP A 205      82.200  22.033 130.757  1.00 25.11           C
ATOM   1476  C   ASP A 205      81.933  23.478 131.154  1.00 26.09           C
ATOM   1477  O   ASP A 205      82.325  24.407 130.441  1.00 23.13           O
ATOM   1478  CB  ASP A 205      83.697  21.792 130.570  1.00 29.67           C
ATOM   1479  CG  ASP A 205      84.056  20.324 130.670  1.00 45.91           C
ATOM   1480  OD2 ASP A 205      83.571  19.521 129.826  1.00 49.85           O
ATOM   1481  OD1 ASP A 205      84.808  19.944 131.599  1.00 53.85           O
ATOM   1482  N   PHE A 206      81.314  23.663 132.319  1.00 20.60           N
ATOM   1483  CA  PHE A 206      80.894  24.976 132.783  1.00 20.96           C
ATOM   1484  C   PHE A 206      81.379  25.193 134.207  1.00 18.34           C
ATOM   1485  O   PHE A 206      81.538  24.246 134.981  1.00 21.36           O
ATOM   1486  CB  PHE A 206      79.370  25.124 132.690  1.00 18.73           C
ATOM   1487  CG  PHE A 206      78.845  24.981 131.289  1.00 19.74           C
ATOM   1488  CD1 PHE A 206      78.516  23.729 130.789  1.00 21.20           C
ATOM   1489  CD2 PHE A 206      78.680  26.099 130.469  1.00 21.14           C
ATOM   1490  CE1 PHE A 206      78.031  23.580 129.486  1.00 20.59           C
ATOM   1491  CE2 PHE A 206      78.203  25.958 129.163  1.00 21.19           C
ATOM   1492  CZ  PHE A 206      77.875  24.696 128.676  1.00 20.28           C
ATOM   1493  N   THR A 207      81.625  26.457 134.541  1.00 19.12           N
ATOM   1494  CA  THR A 207      82.202  26.823 135.824  1.00 18.62           C
ATOM   1495  C   THR A 207      81.467  28.023 136.395  1.00 21.62           C
ATOM   1496  O   THR A 207      81.168  28.977 135.673  1.00 20.17           O
ATOM   1497  CB  THR A 207      83.695  27.150 135.690  1.00 25.20           C
ATOM   1498  CG2 THR A 207      84.279  27.591 137.024  1.00 26.05           C
ATOM   1499  OG1 THR A 207      84.388  25.982 135.247  1.00 26.41           O
ATOM   1500  N   LEU A 208      81.168  27.954 137.688  1.00 16.57           N
ATOM   1501  CA  LEU A 208      80.718  29.095 138.468  1.00 18.93           C
ATOM   1502  C   LEU A 208      81.831  29.469 139.434  1.00 20.30           C
ATOM   1503  O   LEU A 208      82.345  28.606 140.149  1.00 21.23           O
ATOM   1504  CB  LEU A 208      79.438  28.761 139.237  1.00 18.91           C
ATOM   1505  CG  LEU A 208      78.932  29.879 140.154  1.00 18.75           C
ATOM   1506  CD1 LEU A 208      78.398  31.058 139.341  1.00 20.59           C
ATOM   1507  CD2 LEU A 208      77.866  29.343 141.101  1.00 19.16           C
ATOM   1508  N   THR A 209      82.202  30.750 139.457  1.00 17.76           N
ATOM   1509  CA  THR A 209      83.226  31.248 140.360  1.00 19.85           C
ATOM   1510  C   THR A 209      82.616  32.284 141.295  1.00 18.55           C
ATOM   1511  O   THR A 209      81.798  33.113 140.880  1.00 20.37           O
ATOM   1512  CB  THR A 209      84.400  31.850 139.572  1.00 22.38           C
ATOM   1513  CG2 THR A 209      85.480  32.359 140.519  1.00 24.37           C
ATOM   1514  OG1 THR A 209      84.961  30.844 138.710  1.00 26.41           O
ATOM   1515  N   ILE A 210      82.985  32.207 142.569  1.00 17.58           N
ATOM   1516  CA  ILE A 210      82.624  33.199 143.575  1.00 16.09           C
ATOM   1517  C   ILE A 210      83.949  33.800 144.040  1.00 19.47           C
ATOM   1518  O   ILE A 210      84.758  33.114 144.675  1.00 19.18           O
ATOM   1519  CB  ILE A 210      81.830  32.568 144.736  1.00 16.94           C
ATOM   1520  CG1 ILE A 210      80.717  31.656 144.195  1.00 20.62           C
ATOM   1521  CG2 ILE A 210      81.224  33.633 145.636  1.00 17.58           C
ATOM   1522  CD1 ILE A 210      79.898  30.927 145.288  1.00 19.97           C
ATOM   1523  N   SER A 211      84.206  35.062 143.681  1.00 19.84           N
ATOM   1524  CA  SER A 211      85.564  35.576 143.863  1.00 19.57           C
ATOM   1525  C   SER A 211      85.950  35.637 145.337  1.00 20.97           C
ATOM   1526  O   SER A 211      87.126  35.453 145.685  1.00 21.15           O
ATOM   1527  CB  SER A 211      85.711  36.944 143.188  1.00 17.72           C
ATOM   1528  OG  SER A 211      84.901  37.932 143.794  1.00 19.15           O
ATOM   1529  N   ARG A 212      84.979  35.851 146.220  1.00 20.34           N
```

[2044]

```
ATOM   1530  CA  ARG A 212      85.210  35.740 147.656  1.00 20.07           C
ATOM   1531  C   ARG A 212      83.902  35.302 148.294  1.00 17.19           C
ATOM   1532  O   ARG A 212      82.836  35.799 147.918  1.00 20.32           O
ATOM   1533  CB  ARG A 212      85.707  37.068 148.258  1.00 19.45           C
ATOM   1534  CG  ARG A 212      84.811  38.273 147.934  1.00 24.35           C
ATOM   1535  CD  ARG A 212      84.794  39.327 149.041  1.00 27.83           C
ATOM   1536  NE  ARG A 212      86.099  39.939 149.257  1.00 29.72           N
ATOM   1537  CZ  ARG A 212      86.316  40.981 150.065  1.00 29.27           C
ATOM   1538  NH1 ARG A 212      85.312  41.543 150.731  1.00 27.09           N
ATOM   1539  NH2 ARG A 212      87.541  41.469 150.195  1.00 31.24           N
ATOM   1540  N   LEU A 213      83.979  34.365 149.244  1.00 19.46           N
ATOM   1541  CA  LEU A 213      82.773  33.853 149.886  1.00 18.63           C
ATOM   1542  C   LEU A 213      82.362  34.817 150.988  1.00 25.49           C
ATOM   1543  O   LEU A 213      83.057  34.955 152.000  1.00 24.10           O
ATOM   1544  CB  LEU A 213      83.008  32.454 150.441  1.00 19.91           C
ATOM   1545  CG  LEU A 213      83.028  31.341 149.396  1.00 20.35           C
ATOM   1546  CD1 LEU A 213      83.554  30.083 150.044  1.00 24.53           C
ATOM   1547  CD2 LEU A 213      81.628  31.079 148.797  1.00 20.48           C
ATOM   1548  N   GLU A 214      81.268  35.478 150.789  1.00 17.66           N
ATOM   1549  CA  GLU A 214      80.685  36.323 151.815  1.00 19.02           C
ATOM   1550  C   GLU A 214      79.754  35.485 152.681  1.00 22.05           C
ATOM   1551  O   GLU A 214      79.384  34.371 152.296  1.00 20.50           O
ATOM   1552  CB  GLU A 214      79.936  37.476 151.161  1.00 23.66           C
ATOM   1553  CG  GLU A 214      80.815  38.372 150.271  1.00 25.17           C
ATOM   1554  CD  GLU A 214      81.562  39.446 151.036  1.00 33.42           C
ATOM   1555  OE1 GLU A 214      81.728  39.302 152.264  1.00 36.58           O
ATOM   1556  OE2 GLU A 214      81.967  40.461 150.407  1.00 42.48           O
ATOM   1557  N   PRO A 215      79.393  35.963 153.878  1.00 20.13           N
ATOM   1558  CA  PRO A 215      78.558  35.140 154.773  1.00 18.67           C
ATOM   1559  C   PRO A 215      77.254  34.691 154.146  1.00 18.90           C
ATOM   1560  O   PRO A 215      76.810  33.565 154.405  1.00 19.26           O
ATOM   1561  CB  PRO A 215      78.313  36.071 155.969  1.00 20.04           C
ATOM   1562  CG  PRO A 215      79.587  36.893 156.009  1.00 25.22           C
ATOM   1563  CD  PRO A 215      79.940  37.148 154.567  1.00 23.82           C
ATOM   1564  N   GLU A 216      76.646  35.518 153.306  1.00 19.50           N
ATOM   1565  CA  GLU A 216      75.369  35.176 152.685  1.00 19.61           C
ATOM   1566  C   GLU A 216      75.506  34.192 151.520  1.00 20.13           C
ATOM   1567  O   GLU A 216      74.480  33.750 150.985  1.00 18.54           O
ATOM   1568  CB  GLU A 216      74.661  36.457 152.224  1.00 24.04           C
ATOM   1569  CG  GLU A 216      75.417  37.298 151.163  1.00 24.78           C
ATOM   1570  CD  GLU A 216      76.392  38.354 151.745  1.00 29.46           C
ATOM   1571  OE1 GLU A 216      76.922  38.170 152.873  1.00 25.37           O
ATOM   1572  OE2 GLU A 216      76.632  39.380 151.055  1.00 27.38           O
ATOM   1573  N   ASP A 217      76.729  33.829 151.121  1.00 17.34           N
ATOM   1574  CA  ASP A 217      76.969  32.942 149.975  1.00 18.47           C
ATOM   1575  C   ASP A 217      76.989  31.461 150.337  1.00 18.04           C
ATOM   1576  O   ASP A 217      77.073  30.614 149.433  1.00 17.56           O
ATOM   1577  CB  ASP A 217      78.302  33.273 149.300  1.00 18.25           C
ATOM   1578  CG  ASP A 217      78.367  34.695 148.779  1.00 21.70           C
ATOM   1579  OD1 ASP A 217      77.304  35.318 148.588  1.00 18.02           O
ATOM   1580  OD2 ASP A 217      79.497  35.188 148.544  1.00 19.49           O
ATOM   1581  N   PHE A 218      76.951  31.122 151.621  1.00 16.35           N
ATOM   1582  CA  PHE A 218      76.919  29.721 152.035  1.00 17.81           C
ATOM   1583  C   PHE A 218      75.510  29.188 151.797  1.00 17.11           C
ATOM   1584  O   PHE A 218      74.544  29.627 152.432  1.00 18.45           O
ATOM   1585  CB  PHE A 218      77.406  29.597 153.479  1.00 15.19           C
ATOM   1586  CG  PHE A 218      78.878  29.942 153.599  1.00 16.00           C
ATOM   1587  CD2 PHE A 218      79.293  31.210 153.989  1.00 19.78           C
ATOM   1588  CD1 PHE A 218      79.840  29.019 153.198  1.00 14.88           C
ATOM   1589  CE2 PHE A 218      80.652  31.529 154.039  1.00 21.75           C
ATOM   1590  CE1 PHE A 218      81.203  29.324 153.247  1.00 18.66           C
ATOM   1591  CZ  PHE A 218      81.612  30.587 153.655  1.00 20.16           C
ATOM   1592  N   ALA A 219      75.389  28.287 150.838  1.00 16.06           N
ATOM   1593  CA  ALA A 219      74.119  27.953 150.193  1.00 14.58           C
ATOM   1594  C   ALA A 219      74.357  26.705 149.343  1.00 16.68           C
ATOM   1595  O   ALA A 219      75.430  26.088 149.404  1.00 16.86           O
ATOM   1596  CB  ALA A 219      73.617  29.127 149.348  1.00 15.14           C
ATOM   1597  N   VAL A 220      73.373  26.351 148.520  1.00 13.91           N
```

[2045]

```
ATOM   1598  CA  VAL A 220      73.519  25.283 147.537  1.00 12.51           C
ATOM   1599  C   VAL A 220      73.369  25.910 146.165  1.00 15.57           C
ATOM   1600  O   VAL A 220      72.522  26.788 145.977  1.00 17.18           O
ATOM   1601  CB  VAL A 220      72.481  24.158 147.741  1.00 13.90           C
ATOM   1602  CG1 VAL A 220      72.617  23.090 146.649  1.00 16.32           C
ATOM   1603  CG2 VAL A 220      72.637  23.530 149.121  1.00 13.52           C
ATOM   1604  N   TYR A 221      74.195  25.474 145.209  1.00 12.75           N
ATOM   1605  CA  TYR A 221      74.210  26.016 143.856  1.00 14.82           C
ATOM   1606  C   TYR A 221      73.911  24.896 142.877  1.00 15.36           C
ATOM   1607  O   TYR A 221      74.523  23.827 142.953  1.00 17.26           O
ATOM   1608  CB  TYR A 221      75.563  26.664 143.544  1.00 12.35           C
ATOM   1609  CG  TYR A 221      75.828  27.841 144.459  1.00 15.00           C
ATOM   1610  CD1 TYR A 221      76.408  27.668 145.728  1.00 15.81           C
ATOM   1611  CD2 TYR A 221      75.473  29.123 144.064  1.00 15.92           C
ATOM   1612  CE1 TYR A 221      76.634  28.764 146.570  1.00 15.27           C
ATOM   1613  CE2 TYR A 221      75.689  30.217 144.893  1.00 15.65           C
ATOM   1614  CZ  TYR A 221      76.270  30.030 146.132  1.00 15.24           C
ATOM   1615  OH  TYR A 221      76.457  31.124 146.941  1.00 17.79           O
ATOM   1616  N   TYR A 222      72.960  25.143 141.977  1.00 15.07           N
ATOM   1617  CA  TYR A 222      72.500  24.189 140.976  1.00 15.62           C
ATOM   1618  C   TYR A 222      72.777  24.723 139.583  1.00 17.09           C
ATOM   1619  O   TYR A 222      72.549  25.907 139.303  1.00 17.35           O
ATOM   1620  CB  TYR A 222      70.984  23.941 141.090  1.00 15.63           C
ATOM   1621  CG  TYR A 222      70.561  23.270 142.351  1.00 17.15           C
ATOM   1622  CD2 TYR A 222      70.060  24.006 143.420  1.00 15.28           C
ATOM   1623  CD1 TYR A 222      70.624  21.884 142.471  1.00 19.77           C
ATOM   1624  CE2 TYR A 222      69.660  23.371 144.594  1.00 17.31           C
ATOM   1625  CE1 TYR A 222      70.223  21.246 143.624  1.00 20.12           C
ATOM   1626  CZ  TYR A 222      69.745  21.995 144.682  1.00 20.85           C
ATOM   1627  OH  TYR A 222      69.364  21.363 145.835  1.00 21.41           O
ATOM   1628  N   CYS A 223      73.277  23.866 138.706  1.00 15.63           N
ATOM   1629  CA  CYS A 223      73.263  24.222 137.298  1.00 15.46           C
ATOM   1630  C   CYS A 223      72.063  23.567 136.627  1.00 16.44           C
ATOM   1631  O   CYS A 223      71.410  22.677 137.182  1.00 16.08           O
ATOM   1632  CB  CYS A 223      74.567  23.835 136.610  1.00 18.20           C
ATOM   1633  SG  CYS A 223      75.014  22.090 136.668  1.00 21.39           S
ATOM   1634  N   GLN A 224      71.746  24.053 135.435  1.00 15.56           N
ATOM   1635  CA  GLN A 224      70.503  23.667 134.789  1.00 14.76           C
ATOM   1636  C   GLN A 224      70.655  23.929 133.303  1.00 17.53           C
ATOM   1637  O   GLN A 224      71.356  24.860 132.901  1.00 17.21           O
ATOM   1638  CB  GLN A 224      69.311  24.442 135.377  1.00 15.58           C
ATOM   1639  CG  GLN A 224      67.988  24.230 134.654  1.00 17.18           C
ATOM   1640  CD  GLN A 224      67.639  25.364 133.708  1.00 20.52           C
ATOM   1641  NE2 GLN A 224      66.912  25.044 132.641  1.00 23.97           N
ATOM   1642  OE1 GLN A 224      68.027  26.517 133.926  1.00 22.06           O
ATOM   1643  N   GLN A 225      70.014  23.086 132.492  1.00 15.94           N
ATOM   1644  CA  GLN A 225      70.008  23.281 131.046  1.00 17.13           C
ATOM   1645  C   GLN A 225      68.575  23.247 130.543  1.00 19.57           C
ATOM   1646  O   GLN A 225      67.758  22.449 131.009  1.00 18.29           O
ATOM   1647  CB  GLN A 225      70.864  22.223 130.301  1.00 19.27           C
ATOM   1648  CG  GLN A 225      70.375  20.764 130.379  1.00 17.98           C
ATOM   1649  CD  GLN A 225      69.235  20.418 129.411  1.00 20.35           C
ATOM   1650  NE2 GLN A 225      68.432  19.421 129.770  1.00 18.21           N
ATOM   1651  OE1 GLN A 225      69.092  21.031 128.357  1.00 19.75           O
ATOM   1652  N   ASP A 226      68.274  24.122 129.583  1.00 18.80           N
ATOM   1653  CA  ASP A 226      66.999  24.071 128.881  1.00 19.89           C
ATOM   1654  C   ASP A 226      67.230  24.018 127.379  1.00 21.75           C
ATOM   1655  O   ASP A 226      66.439  24.552 126.597  1.00 23.20           O
ATOM   1656  CB  ASP A 226      66.103  25.246 129.261  1.00 19.56           C
ATOM   1657  CG  ASP A 226      66.846  26.550 129.356  1.00 26.82           C
ATOM   1658  OD1 ASP A 226      67.467  26.968 128.371  1.00 27.39           O
ATOM   1659  OD2 ASP A 226      66.823  27.150 130.444  1.00 29.71           O
ATOM   1660  N   TYR A 227      68.316  23.369 126.975  1.00 18.79           N
ATOM   1661  CA  TYR A 227      68.604  23.134 125.564  1.00 21.13           C
ATOM   1662  C   TYR A 227      67.792  21.967 125.002  1.00 22.33           C
ATOM   1663  O   TYR A 227      67.373  22.001 123.835  1.00 21.55           O
ATOM   1664  CB  TYR A 227      70.095  22.884 125.397  1.00 23.12           C
ATOM   1665  CG  TYR A 227      70.520  22.546 123.987  1.00 24.75           C
```

[2046]

```
ATOM   1666  CD1 TYR A 227      70.441  23.496 122.977  1.00 28.26           C
ATOM   1667  CD2 TYR A 227      71.009  21.284 123.669  1.00 25.50           C
ATOM   1668  CE1 TYR A 227      70.828  23.200 121.687  1.00 29.39           C
ATOM   1669  CE2 TYR A 227      71.406  20.974 122.374  1.00 25.39           C
ATOM   1670  CZ  TYR A 227      71.315  21.944 121.389  1.00 31.79           C
ATOM   1671  OH  TYR A 227      71.697  21.676 120.091  1.00 37.95           O
ATOM   1672  N   GLY A 228      67.575  20.921 125.798  1.00 20.10           N
ATOM   1673  CA  GLY A 228      66.814  19.776 125.339  1.00 23.03           C
ATOM   1674  C   GLY A 228      65.866  19.280 126.411  1.00 21.53           C
ATOM   1675  O   GLY A 228      66.036  19.553 127.604  1.00 20.00           O
ATOM   1676  N   PHE A 229      64.855  18.542 125.968  1.00 20.10           N
ATOM   1677  CA  PHE A 229      63.854  18.007 126.891  1.00 19.47           C
ATOM   1678  C   PHE A 229      64.214  16.599 127.364  1.00 19.37           C
ATOM   1679  O   PHE A 229      64.824  15.836 126.614  1.00 20.90           O
ATOM   1680  CB  PHE A 229      62.475  18.012 126.237  1.00 19.02           C
ATOM   1681  CG  PHE A 229      61.921  19.387 126.053  1.00 17.57           C
ATOM   1682  CD1 PHE A 229      61.178  19.988 127.054  1.00 18.31           C
ATOM   1683  CD2 PHE A 229      62.212  20.110 124.906  1.00 20.63           C
ATOM   1684  CE1 PHE A 229      60.679  21.271 126.893  1.00 20.61           C
ATOM   1685  CE2 PHE A 229      61.724  21.389 124.743  1.00 21.34           C
ATOM   1686  CZ  PHE A 229      60.951  21.969 125.743  1.00 20.56           C
ATOM   1687  N   PRO A 230      63.873  16.262 128.619  1.00 21.53           N
ATOM   1688  CA  PRO A 230      63.311  17.180 129.619  1.00 18.51           C
ATOM   1689  C   PRO A 230      64.388  18.147 130.100  1.00 18.77           C
ATOM   1690  O   PRO A 230      65.558  17.781 130.086  1.00 19.32           O
ATOM   1691  CB  PRO A 230      62.859  16.241 130.751  1.00 18.07           C
ATOM   1692  CG  PRO A 230      63.851  15.104 130.667  1.00 22.91           C
ATOM   1693  CD  PRO A 230      64.110  14.916 129.179  1.00 18.91           C
ATOM   1694  N   TRP A 231      64.021  19.367 130.489  1.00 17.34           N
ATOM   1695  CA  TRP A 231      65.014  20.220 131.126  1.00 17.12           C
ATOM   1696  C   TRP A 231      65.522  19.523 132.384  1.00 15.59           C
ATOM   1697  O   TRP A 231      64.794  18.749 133.021  1.00 18.55           O
ATOM   1698  CB  TRP A 231      64.415  21.582 131.469  1.00 17.71           C
ATOM   1699  CG  TRP A 231      63.968  22.329 130.250  1.00 18.65           C
ATOM   1700  CD1 TRP A 231      64.085  21.922 128.946  1.00 18.26           C
ATOM   1701  CD2 TRP A 231      63.316  23.597 130.223  1.00 21.49           C
ATOM   1702  CE2 TRP A 231      63.068  23.908 128.872  1.00 22.79           C
ATOM   1703  CE3 TRP A 231      62.932  24.510 131.211  1.00 21.50           C
ATOM   1704  NE1 TRP A 231      63.556  22.878 128.111  1.00 21.06           N
ATOM   1705  CZ2 TRP A 231      62.448  25.093 128.484  1.00 24.82           C
ATOM   1706  CZ3 TRP A 231      62.310  25.676 130.823  1.00 22.68           C
ATOM   1707  CH2 TRP A 231      62.081  25.958 129.470  1.00 23.47           C
ATOM   1708  N   THR A 232      66.785  19.770 132.730  1.00 17.50           N
ATOM   1709  CA  THR A 232      67.374  19.057 133.860  1.00 17.50           C
ATOM   1710  C   THR A 232      68.233  19.989 134.697  1.00 18.11           C
ATOM   1711  O   THR A 232      68.755  20.993 134.206  1.00 17.05           O
ATOM   1712  CB  THR A 232      68.225  17.848 133.421  1.00 17.85           C
ATOM   1713  CG2 THR A 232      67.333  16.725 132.817  1.00 18.23           C
ATOM   1714  OG1 THR A 232      69.202  18.261 132.471  1.00 17.96           O
ATOM   1715  N   PHE A 233      68.370  19.628 135.975  1.00 16.91           N
ATOM   1716  CA  PHE A 233      69.256  20.284 136.930  1.00 16.07           C
ATOM   1717  C   PHE A 233      70.369  19.330 137.338  1.00 16.32           C
ATOM   1718  O   PHE A 233      70.160  18.115 137.394  1.00 18.78           O
ATOM   1719  CB  PHE A 233      68.498  20.686 138.202  1.00 15.02           C
ATOM   1720  CG  PHE A 233      67.479  21.770 138.006  1.00 14.26           C
ATOM   1721  CD1 PHE A 233      66.190  21.466 137.599  1.00 17.13           C
ATOM   1722  CD2 PHE A 233      67.803  23.102 138.250  1.00 15.02           C
ATOM   1723  CE1 PHE A 233      65.243  22.475 137.428  1.00 16.10           C
ATOM   1724  CE2 PHE A 233      66.858  24.108 138.082  1.00 15.91           C
ATOM   1725  CZ  PHE A 233      65.580  23.791 137.674  1.00 17.54           C
ATOM   1726  N   GLY A 234      71.537  19.885 137.681  1.00 16.76           N
ATOM   1727  CA  GLY A 234      72.520  19.124 138.430  1.00 17.91           C
ATOM   1728  C   GLY A 234      72.020  18.846 139.839  1.00 18.73           C
ATOM   1729  O   GLY A 234      71.000  19.375 140.279  1.00 16.99           O
ATOM   1730  N   CYS A 235      72.719  17.952 140.551  1.00 17.64           N
ATOM   1731  CA  CYS A 235      72.287  17.593 141.899  1.00 17.86           C
ATOM   1732  C   CYS A 235      72.745  18.593 142.951  1.00 20.33           C
ATOM   1733  O   CYS A 235      72.382  18.440 144.125  1.00 21.34           O
```

[2047]

```
ATOM   1734  CB  CYS A 235      72.775  16.188 142.261  1.00 22.08           C
ATOM   1735  SG  CYS A 235      71.510  14.947 141.896  1.00 30.60           S
ATOM   1736  N   GLY A 236      73.507  19.603 142.559  1.00 15.99           N
ATOM   1737  CA  GLY A 236      73.849  20.699 143.441  1.00 18.40           C
ATOM   1738  C   GLY A 236      75.208  20.522 144.096  1.00 21.27           C
ATOM   1739  O   GLY A 236      75.689  19.403 144.322  1.00 18.36           O
ATOM   1740  N   THR A 237      75.846  21.650 144.400  1.00 16.01           N
ATOM   1741  CA  THR A 237      77.034  21.686 145.245  1.00 14.97           C
ATOM   1742  C   THR A 237      76.699  22.520 146.474  1.00 15.44           C
ATOM   1743  O   THR A 237      76.301  23.681 146.340  1.00 17.14           O
ATOM   1744  CB  THR A 237      78.247  22.285 144.512  1.00 17.50           C
ATOM   1745  CG2 THR A 237      79.423  22.471 145.474  1.00 18.93           C
ATOM   1746  OG1 THR A 237      78.651  21.409 143.447  1.00 19.77           O
ATOM   1747  N   LYS A 238      76.843  21.925 147.657  1.00 15.96           N
ATOM   1748  CA  LYS A 238      76.639  22.635 148.914  1.00 13.88           C
ATOM   1749  C   LYS A 238      77.940  23.316 149.323  1.00 17.50           C
ATOM   1750  O   LYS A 238      78.973  22.655 149.476  1.00 21.49           O
ATOM   1751  CB  LYS A 238      76.165  21.688 150.012  1.00 15.37           C
ATOM   1752  CG  LYS A 238      75.863  22.386 151.341  1.00 15.95           C
ATOM   1753  CD  LYS A 238      75.442  21.379 152.383  1.00 20.69           C
ATOM   1754  CE  LYS A 238      75.253  22.043 153.742  1.00 18.76           C
ATOM   1755  NZ  LYS A 238      74.713  21.042 154.727  1.00 22.01           N
ATOM   1756  N   VAL A 239      77.897  24.636 149.470  1.00 14.71           N
ATOM   1757  CA  VAL A 239      79.042  25.416 149.922  1.00 13.44           C
ATOM   1758  C   VAL A 239      78.827  25.705 151.402  1.00 18.99           C
ATOM   1759  O   VAL A 239      77.825  26.328 151.782  1.00 16.94           O
ATOM   1760  CB  VAL A 239      79.190  26.708 149.103  1.00 15.45           C
ATOM   1761  CG1 VAL A 239      80.432  27.478 149.540  1.00 15.91           C
ATOM   1762  CG2 VAL A 239      79.292  26.376 147.604  1.00 15.29           C
ATOM   1763  N   GLU A 240      79.746  25.235 152.237  1.00 18.08           N
ATOM   1764  CA  GLU A 240      79.626  25.347 153.690  1.00 18.50           C
ATOM   1765  C   GLU A 240      80.929  25.876 154.287  1.00 18.59           C
ATOM   1766  O   GLU A 240      81.993  25.821 153.664  1.00 19.77           O
ATOM   1767  CB  GLU A 240      79.282  23.995 154.315  1.00 21.49           C
ATOM   1768  CG  GLU A 240      80.365  22.959 154.093  1.00 23.48           C
ATOM   1769  CD  GLU A 240      80.037  21.584 154.671  1.00 31.39           C
ATOM   1770  OE1 GLU A 240      78.843  21.212 154.715  1.00 27.63           O
ATOM   1771  OE2 GLU A 240      80.993  20.870 155.053  1.00 35.28           O
ATOM   1772  N   ILE A 241      80.835  26.385 155.513  1.00 17.48           N
ATOM   1773  CA  ILE A 241      81.982  27.003 156.176  1.00 18.54           C
ATOM   1774  C   ILE A 241      82.895  25.927 156.751  1.00 19.87           C
ATOM   1775  O   ILE A 241      82.445  25.028 157.472  1.00 21.19           O
ATOM   1776  CB  ILE A 241      81.524  27.959 157.284  1.00 19.36           C
ATOM   1777  CG1 ILE A 241      80.746  29.127 156.716  1.00 23.06           C
ATOM   1778  CG2 ILE A 241      82.748  28.505 157.999  1.00 24.63           C
ATOM   1779  CD1 ILE A 241      80.569  30.251 157.748  1.00 25.51           C
ATOM   1780  N   LYS A 242      84.187  26.047 156.458  1.00 19.92           N
ATOM   1781  CA  LYS A 242      85.194  25.141 156.992  1.00 22.73           C
ATOM   1782  C   LYS A 242      85.298  25.288 158.508  1.00 22.51           C
ATOM   1783  O   LYS A 242      85.273  26.399 159.039  1.00 26.76           O
ATOM   1784  CB  LYS A 242      86.541  25.454 156.343  1.00 25.36           C
ATOM   1785  CG  LYS A 242      87.655  24.478 156.654  1.00 31.92           C
ATOM   1786  CD  LYS A 242      88.950  24.925 155.964  1.00 35.82           C
ATOM   1787  CE  LYS A 242      90.120  23.997 156.310  1.00 42.51           C
ATOM   1788  NZ  LYS A 242      91.451  24.590 155.959  1.00 48.75           N
ATOM   1789  O   GLY A 243      87.915  24.721 160.332  1.00 33.25           O
ATOM   1790  N   GLY A 243      85.416  24.160 159.203  1.00 24.76           N
ATOM   1791  CA  GLY A 243      85.586  24.214 160.645  1.00 27.52           C
ATOM   1792  C   GLY A 243      86.901  24.877 161.016  1.00 33.16           C
ATOM   1793  O   HIS A 244      87.324  27.030 164.696  1.00 40.82           O
ATOM   1794  N   HIS A 244      86.878  25.630 162.111  1.00 31.43           N
ATOM   1795  CA  HIS A 244      88.055  26.372 162.547  1.00 36.27           C
ATOM   1796  C   HIS A 244      88.127  26.365 164.054  1.00 37.57           C
ATOM   1797  CB  HIS A 244      88.019  27.818 162.027  1.00 39.70           C
TER
HETATM 1798  S   SO4 A   1      56.870  42.079 129.764  1.00 42.35           S
HETATM 1799  O1  SO4 A   1      58.251  41.812 130.187  1.00 42.58           O
HETATM 1800  O2  SO4 A   1      56.781  43.397 129.138  1.00 49.48           O
```

[2048]

```
HETATM 1801  O3   SO4 A   1      56.456  41.086 128.770  1.00 46.43           O
HETATM 1802  O4   SO4 A   1      55.988  42.032 130.922  1.00 32.04           O
HETATM 1803  S    SO4 A   2      83.318  20.288 124.960  1.00 58.80           S
HETATM 1804  O1   SO4 A   2      84.249  20.508 123.842  1.00 52.11           O
HETATM 1805  O2   SO4 A   2      82.102  20.432 124.141  1.00 53.74           O
HETATM 1806  O3   SO4 A   2      83.460  19.070 125.777  1.00 53.72           O
HETATM 1807  O4   SO4 A   2      83.538  21.221 126.076  1.00 52.11           O
TER
HETATM 1808  O    HOH S   1      77.785  26.801 156.616  1.00 11.68           O
HETATM 1809  O    HOH S   2      56.347  22.807 121.009  1.00 20.41           O
HETATM 1810  O    HOH S   3      67.294  16.253 128.491  1.00 20.02           O
HETATM 1811  O    HOH S   4      65.477  34.599 140.219  1.00 17.70           O
HETATM 1812  O    HOH S   5      78.721  28.675 133.403  1.00 18.70           O
HETATM 1813  O    HOH S   6      63.200  34.611 141.869  1.00 19.18           O
HETATM 1814  O    HOH S   7      45.012  25.522 130.712  1.00 19.62           O
HETATM 1815  O    HOH S   8      46.128  38.835 136.840  1.00 22.83           O
HETATM 1816  O    HOH S   9      63.316  16.235 144.070  1.00 20.90           O
HETATM 1817  O    HOH S  10      63.643  33.242 144.263  1.00 18.54           O
HETATM 1818  O    HOH S  11      81.606  41.354 146.744  1.00 25.37           O
HETATM 1819  O    HOH S  12      71.074  16.139 135.850  1.00 22.58           O
HETATM 1820  O    HOH S  13      53.919  33.645 132.727  1.00 19.53           O
HETATM 1821  O    HOH S  14      67.658  36.384 140.726  1.00 20.99           O
HETATM 1822  O    HOH S  15      57.924  43.388 133.817  1.00 26.11           O
HETATM 1823  O    HOH S  16      74.672  35.531 147.960  1.00 22.19           O
HETATM 1824  O    HOH S  17      61.027  33.409 145.404  1.00 22.44           O
HETATM 1825  O    HOH S  18      42.987  30.784 141.050  1.00 27.57           O
HETATM 1826  O    HOH S  19      78.857  22.682 141.021  1.00 19.67           O
HETATM 1827  O    HOH S  20      45.803  29.580 128.048  1.00 29.22           O
HETATM 1828  O    HOH S  21      53.253  28.337 150.089  1.00 21.05           O
HETATM 1829  O    HOH S  22      51.162  17.898 126.525  1.00 25.50           O
HETATM 1830  O    HOH S  23      53.937  26.063 151.622  1.00 23.16           O
HETATM 1831  O    HOH S  24      68.808  17.965 140.924  1.00 20.80           O
HETATM 1832  O    HOH S  25      51.734  26.286 144.103  1.00 21.76           O
HETATM 1833  O    HOH S  26      59.799  16.801 128.328  1.00 23.22           O
HETATM 1834  O    HOH S  27      51.300  11.493 141.315  1.00 25.82           O
HETATM 1835  O    HOH S  28      68.976  40.180 142.377  1.00 33.11           O
HETATM 1836  O    HOH S  29      54.745  42.202 141.420  1.00 25.28           O
HETATM 1837  O    HOH S  30      59.028  41.050 132.592  1.00 28.98           O
HETATM 1838  O    HOH S  31      77.078  14.408 133.253  1.00 25.19           O
HETATM 1839  O    HOH S  32      67.828  31.474 147.434  1.00 20.26           O
HETATM 1840  O    HOH S  33      67.432  24.746 151.832  1.00 25.74           O
HETATM 1841  O    HOH S  34      52.269  37.534 142.110  1.00 25.07           O
HETATM 1842  O    HOH S  35      41.323  16.198 147.641  1.00 30.37           O
HETATM 1843  O    HOH S  36      58.749  35.830 142.912  1.00 25.39           O
HETATM 1844  O    HOH S  37      49.758  20.646 124.927  1.00 26.19           O
HETATM 1845  O    HOH S  38      62.845  37.296 142.809  1.00 26.37           O
HETATM 1846  O    HOH S  39      43.990  30.341 129.964  1.00 24.59           O
HETATM 1847  O    HOH S  40      53.765  13.120 140.500  1.00 28.51           O
HETATM 1848  O    HOH S  41      44.912  33.113 141.288  1.00 24.86           O
HETATM 1849  O    HOH S  42      78.210  24.097 158.021  1.00 20.89           O
HETATM 1850  O    HOH S  43      75.863  13.167 137.572  1.00 29.10           O
HETATM 1851  O    HOH S  44      46.196  21.895 136.422  1.00 24.82           O
HETATM 1852  O    HOH S  45      49.328  38.585 129.647  1.00 23.43           O
HETATM 1853  O    HOH S  46      43.686  35.864 141.424  1.00 30.27           O
HETATM 1854  O    HOH S  47      59.050  12.533 148.531  1.00 24.49           O
HETATM 1855  O    HOH S  48      80.170  41.479 144.662  1.00 30.44           O
HETATM 1856  O    HOH S  49      41.190  12.715 140.694  1.00 23.76           O
HETATM 1857  O    HOH S  50      48.376  11.787 140.129  1.00 27.99           O
HETATM 1858  O    HOH S  51      72.998  31.946 152.412  1.00 22.64           O
HETATM 1859  O    HOH S  52      79.781  36.002 134.513  1.00 26.03           O
HETATM 1860  O    HOH S  53      49.585   8.507 141.111  1.00 26.49           O
HETATM 1861  O    HOH S  54      42.821  24.882 135.615  1.00 28.66           O
HETATM 1862  O    HOH S  55      48.152  25.045 147.794  1.00 24.32           O
HETATM 1863  O    HOH S  56      64.838  25.754 150.831  1.00 30.67           O
HETATM 1864  O    HOH S  57      90.954  31.881 147.749  1.00 27.80           O
HETATM 1865  O    HOH S  58      72.261  15.035 138.195  1.00 29.18           O
HETATM 1866  O    HOH S  59      50.456  14.730 131.983  1.00 26.03           O
HETATM 1867  O    HOH S  60      55.138   9.157 133.793  1.00 34.53           O
```

[2049]

```
HETATM 1868  O   HOH S  61      56.734  35.172 146.017  1.00 26.97           O
HETATM 1869  O   HOH S  62      44.323  23.539 146.769  1.00 30.31           O
HETATM 1870  O   HOH S  63      83.825  35.551 140.095  1.00 21.82           O
HETATM 1871  O   HOH S  64      63.007  22.739 149.574  1.00 31.33           O
HETATM 1872  O   HOH S  65      65.234  35.083 145.831  1.00 35.48           O
HETATM 1873  O   HOH S  66      68.923  14.487 144.340  1.00 30.19           O
HETATM 1874  O   HOH S  67      41.599  14.640 138.622  1.00 32.77           O
HETATM 1875  O   HOH S  68      69.840  25.296 150.356  1.00 22.65           O
HETATM 1876  O   HOH S  69      59.600  28.210 132.396  1.00 22.16           O
HETATM 1877  O   HOH S  70      67.235  38.636 139.461  1.00 29.75           O
HETATM 1878  O   HOH S  71      62.285  20.058 149.892  1.00 27.32           O
HETATM 1879  O   HOH S  72      86.883  25.953 145.118  1.00 27.76           O
HETATM 1880  O   HOH S  73      80.670  31.283 128.798  1.00 29.83           O
HETATM 1881  O   HOH S  74      70.412  33.100 127.493  1.00 32.48           O
HETATM 1882  O   HOH S  75      66.221  37.493 137.323  1.00 25.47           O
HETATM 1883  O   HOH S  76      83.738  31.038 136.173  1.00 28.79           O
HETATM 1884  O   HOH S  77      81.348  18.378 137.617  1.00 28.86           O
HETATM 1885  O   HOH S  78      56.100  13.495 128.446  1.00 29.00           O
HETATM 1886  O   HOH S  79      79.025  32.756 127.203  1.00 37.75           O
HETATM 1887  O   HOH S  80      76.729  42.491 137.944  1.00 40.17           O
HETATM 1888  O   HOH S  81      67.335  33.996 147.745  1.00 31.21           O
HETATM 1889  O   HOH S  82      76.629  11.660 132.567  1.00 30.29           O
HETATM 1890  O   HOH S  83      64.841  33.351 146.979  1.00 31.15           O
HETATM 1891  O   HOH S  84      82.487  34.950 132.284  1.00 36.65           O
HETATM 1892  O   HOH S  85      55.354  35.059 148.678  1.00 29.74           O
HETATM 1893  O   HOH S  86      67.188  23.649 121.804  1.00 28.63           O
HETATM 1894  O   HOH S  87      39.286  14.439 141.766  1.00 30.90           O
HETATM 1895  O   HOH S  88      78.972  11.448 131.435  1.00 36.14           O
HETATM 1896  O   HOH S  89      52.442  20.512 153.930  1.00 25.00           O
HETATM 1897  O   HOH S  90      48.161  18.675 129.583  1.00 30.41           O
HETATM 1898  O   HOH S  91      43.041  19.224 152.283  1.00 40.13           O
HETATM 1899  O   HOH S  92      67.782  37.954 143.165  1.00 26.61           O
HETATM 1900  O   HOH S  93      40.415  13.837 146.478  1.00 26.09           O
HETATM 1901  O   HOH S  94      45.662  20.525 152.584  1.00 28.43           O
HETATM 1902  O   HOH S  95      74.994  34.899 128.027  1.00 31.31           O
HETATM 1903  O   HOH S  96      71.204  32.792 153.987  1.00 29.46           O
HETATM 1904  O   HOH S  97      57.561  44.757 137.075  1.00 28.19           O
HETATM 1905  O   HOH S  98      56.308  10.700 142.870  1.00 26.89           O
HETATM 1906  O   HOH S  99      72.506  34.695 126.613  1.00 29.37           O
HETATM 1907  O   HOH S 100      76.090  16.975 143.082  1.00 23.47           O
HETATM 1908  O   HOH S 101      68.462  36.232 148.204  1.00 33.07           O
HETATM 1909  O   HOH S 102      52.232   8.360 156.990  1.00 35.82           O
HETATM 1910  O   HOH S 103      89.197  35.737 143.906  1.00 29.69           O
HETATM 1911  O   HOH S 104      65.671  40.630 140.462  1.00 35.21           O
HETATM 1912  O   HOH S 105      85.893  21.185 150.241  1.00 31.54           O
HETATM 1913  O   HOH S 106      50.292  38.017 143.948  1.00 32.23           O
HETATM 1914  O   HOH S 107      77.474  21.817 156.620  1.00 29.60           O
HETATM 1915  O   HOH S 108      74.161  18.257 122.068  1.00 31.54           O
HETATM 1916  O   HOH S 109      86.317  35.916 139.748  1.00 32.80           O
HETATM 1917  O   HOH S 110      44.813  27.868 144.733  1.00 35.06           O
HETATM 1918  O   HOH S 111      78.164  25.707 124.586  1.00 32.65           O
HETATM 1919  O   HOH S 112      66.968  19.307 149.255  1.00 30.32           O
HETATM 1920  O   HOH S 113      53.939  32.637 125.278  1.00 29.85           O
HETATM 1921  O   HOH S 114      46.517  14.889 136.467  1.00 31.82           O
HETATM 1922  O   HOH S 115      38.824  14.797 144.773  1.00 33.24           O
HETATM 1923  O   HOH S 116      42.839  20.933 145.554  1.00 28.05           O
HETATM 1924  O   HOH S 117      77.117  39.757 133.307  1.00 30.16           O
HETATM 1925  O   HOH S 118      77.355  16.804 121.933  1.00 32.94           O
HETATM 1926  O   HOH S 119      57.127  28.306 151.016  1.00 27.82           O
HETATM 1927  O   HOH S 120      68.478  31.690 154.031  1.00 31.57           O
HETATM 1928  O   HOH S 121      86.403  28.623 158.341  1.00 30.84           O
HETATM 1929  O   HOH S 122      58.465  39.872 127.029  1.00 34.31           O
HETATM 1930  O   HOH S 123      84.370  39.425 141.049  1.00 28.68           O
HETATM 1931  O   HOH S 124      73.187  38.043 148.292  1.00 35.55           O
HETATM 1932  O   HOH S 125      61.106  29.196 130.102  1.00 30.20           O
HETATM 1933  O   HOH S 126      44.141  29.614 125.878  1.00 33.41           O
HETATM 1934  O   HOH S 127      63.941  23.891 125.433  1.00 28.76           O
HETATM 1935  O   HOH S 128      63.028  12.421 149.984  1.00 31.01           O
```

[2050]

```
HETATM 1936  O   HOH S 129      59.074  37.237 126.687  1.00 32.26           O
HETATM 1937  O   HOH S 130      79.117  15.445 149.326  1.00 40.29           O
HETATM 1938  O   HOH S 131      53.216  27.242 122.166  1.00 36.01           O
HETATM 1939  O   HOH S 132      73.413  40.255 132.472  1.00 34.27           O
HETATM 1940  O   HOH S 133      77.115  19.217 154.809  1.00 33.92           O
HETATM 1941  O   HOH S 134      77.881  37.034 128.941  1.00 35.93           O
HETATM 1942  O   HOH S 135      60.260  37.873 142.858  1.00 33.97           O
HETATM 1943  O   HOH S 136      56.223  30.244 152.433  1.00 35.97           O
HETATM 1944  O   HOH S 137      64.965  19.230 150.823  1.00 30.77           O
HETATM 1945  O   HOH S 138      44.409  25.947 143.287  1.00 31.99           O
HETATM 1946  O   HOH S 139      39.446  17.021 140.962  1.00 36.65           O
HETATM 1947  O   HOH S 140      40.877  29.507 137.316  1.00 35.30           O
HETATM 1948  O   HOH S 141      52.016  38.101 134.965  1.00 31.63           O
HETATM 1949  O   HOH S 142      81.097  15.637 130.155  1.00 29.81           O
HETATM 1950  O   HOH S 143      63.010  13.720 137.659  1.00 31.78           O
HETATM 1951  O   HOH S 144      62.052  41.111 133.361  1.00 40.76           O
HETATM 1952  O   HOH S 145      70.633  19.396 146.677  1.00 32.06           O
HETATM 1953  O   HOH S 146      61.325  11.170 148.377  1.00 37.20           O
HETATM 1954  O   HOH S 147      55.466  30.787 122.953  1.00 34.12           O
HETATM 1955  O   HOH S 148      43.061  29.099 143.337  1.00 38.99           O
HETATM 1956  O   HOH S 149      82.505  22.448 156.884  1.00 30.48           O
HETATM 1957  O   HOH S 150      56.895  33.322 125.260  1.00 33.02           O
HETATM 1958  O   HOH S 151      48.636  32.595 144.687  1.00 34.36           O
HETATM 1959  O   HOH S 152      59.704   8.310 149.520  1.00 43.05           O
HETATM 1960  O   HOH S 153      55.069   6.642 146.776  1.00 27.48           O
HETATM 1961  O   HOH S 154      57.047   6.255 148.979  1.00 36.30           O
HETATM 1962  O   HOH S 155      63.807  33.267 130.216  1.00 28.63           O
HETATM 1963  O   HOH S 156      63.446  29.804 129.356  1.00 31.94           O
HETATM 1964  O   HOH S 157      61.141  33.222 148.101  1.00 32.15           O
HETATM 1965  O   HOH S 158      85.316  21.657 158.127  1.00 33.07           O
HETATM 1966  O   HOH S 159      60.484  29.270 127.657  1.00 33.13           O
HETATM 1967  O   HOH S 160      61.989  32.279 149.511  1.00 31.48           O
HETATM 1968  O   HOH S 161      39.555  13.161 149.044  1.00 28.97           O
HETATM 1969  O   HOH S 162      55.797   6.410 144.745  1.00 34.63           O
HETATM 1970  O   HOH S 163      50.917  15.308 127.449  1.00 36.34           O
HETATM 1971  O   HOH S 164      45.605   8.719 138.457  1.00 31.50           O
HETATM 1972  O   HOH S 165      69.198  14.639 135.193  1.00 33.31           O
HETATM 1973  O   HOH S 166      66.522  17.388 136.914  1.00 27.81           O
HETATM 1974  O   HOH S 167      47.807   9.261 138.533  1.00 32.28           O
HETATM 1975  O   HOH S 168      68.385  13.733 142.001  1.00 37.20           O
HETATM 1976  O   HOH S 169      47.900  22.905 155.308  1.00 37.49           O
HETATM 1977  O   HOH S 170      46.558  32.295 143.647  1.00 34.87           O
HETATM 1978  O   HOH S 171      82.031  16.319 147.877  1.00 33.42           O
HETATM 1979  O   HOH S 172      65.813   8.967 133.393  1.00 40.31           O
HETATM 1980  O   HOH S 173      53.763  30.573 151.464  1.00 34.14           O
HETATM 1981  O   HOH S 174      62.270   8.408 150.169  1.00 48.24           O
HETATM 1982  O   HOH S 175      65.852  13.306 137.732  1.00 39.42           O
HETATM 1983  O   HOH S 176      43.956  21.106 131.481  1.00 39.57           O
HETATM 1984  O   HOH S 177      75.089  18.181 146.919  1.00 34.03           O
HETATM 1985  O   HOH S 178      41.293  21.244 137.271  1.00 38.84           O
HETATM 1986  O   HOH S 179      51.951   8.227 135.124  1.00 42.64           O
HETATM 1987  O   HOH S 180      73.681  42.079 136.498  1.00 34.84           O
HETATM 1988  O   HOH S 181      80.421  10.538 133.368  1.00 34.95           O
HETATM 1989  O   HOH S 182      78.347  43.492 145.324  1.00 48.29           O
HETATM 1990  O   HOH S 183      68.498   3.834 133.688  1.00 37.62           O
HETATM 1991  O   HOH S 184      50.149  31.751 149.785  1.00 38.53           O
HETATM 1992  O   HOH S 185      68.204  12.298 135.647  1.00 44.66           O
HETATM 1993  O   HOH S 186      65.498  30.257 122.867  1.00 40.41           O
HETATM 1994  O   HOH S 187      50.396  22.315 156.776  1.00 43.59           O
HETATM 1995  O   HOH S 188      73.607  43.335 144.132  1.00 41.66           O
HETATM 1996  O   HOH S 189      78.948  14.567 142.235  1.00 37.66           O
HETATM 1997  O   HOH S 190      89.017  28.308 143.623  1.00 36.43           O
HETATM 1998  O   HOH S 191      69.434  15.711 139.135  1.00 39.08           O
HETATM 1999  O   HOH S 192      41.749  27.261 134.749  1.00 40.01           O
HETATM 2000  O   HOH S 193      67.617  11.163 137.529  1.00 38.38           O
HETATM 2001  O   HOH S 194      72.315   9.589 143.351  1.00 34.95           O
HETATM 2002  O   HOH S 195      77.222  17.561 152.550  1.00 38.97           O
HETATM 2003  O   HOH S 196      42.778  20.639 133.415  1.00 41.71           O
```

[2051]

```
HETATM 2004  O   HOH S 197      85.846  30.588 159.967  1.00 38.58           O
HETATM 2005  O   HOH S 198      46.584  21.417 130.396  1.00 37.09           O
HETATM 2006  O   HOH S 199      78.718  40.906 151.342  1.00 35.84           O
HETATM 2007  O   HOH S 200      91.786  36.395 145.676  1.00 46.49           O
HETATM 2008  O   HOH S 201      59.177  32.613 124.264  1.00 34.90           O
HETATM 2009  O   HOH S 202      48.256  35.931 145.035  1.00 35.53           O
HETATM 2010  O   HOH S 203      68.758  30.776 156.289  1.00 39.79           O
HETATM 2011  O   HOH S 204      89.735  28.804 147.504  1.00 39.10           O
HETATM 2012  O   HOH S 205      56.379  17.651 154.839  1.00 35.27           O
HETATM 2013  O   HOH S 206      67.186  32.697 157.621  1.00 42.45           O
HETATM 2014  O   HOH S 207      43.865  20.353 136.073  1.00 35.15           O
HETATM 2015  O   HOH S 208      63.033  35.610 130.765  1.00 42.20           O
HETATM 2016  O   HOH S 209      84.429  29.684 128.137  1.00 41.06           O
HETATM 2017  O   HOH S 210      81.531  45.920 140.758  1.00 37.12           O
HETATM 2018  O   HOH S 211      74.269  42.831 138.986  1.00 48.73           O
HETATM 2019  O   HOH S 212      88.118  34.154 157.172  1.00 39.01           O
HETATM 2020  O   HOH S 213      49.988  14.520 129.227  1.00 41.22           O
HETATM 2021  O   HOH S 214      52.699   7.903 131.120  1.00 43.09           O
HETATM 2022  O   HOH S 215      76.785  14.970 147.482  1.00 43.66           O
HETATM 2023  O   HOH S 216      84.381  23.529 126.557  1.00 40.71           O
HETATM 2024  O   HOH S 217      86.842  21.103 143.840  1.00 43.28           O
HETATM 2025  O   HOH S 218      70.194  10.465 144.561  1.00 36.97           O
HETATM 2026  O   HOH S 219      65.453  13.172 126.204  1.00 46.45           O
HETATM 2027  O   HOH S 220      86.747  23.916 144.004  1.00 42.01           O
HETATM 2028  O   HOH S 221      65.598   9.804 136.498  1.00 40.88           O
HETATM 2029  O   HOH S 222      85.497  19.250 148.256  1.00 37.83           O
HETATM 2030  O   HOH S 223      42.230  20.371 148.069  1.00 43.98           O
HETATM 2031  O   HOH S 224      40.479  21.734 149.176  1.00 52.76           O
HETATM 2032  O   HOH S 225      76.655  35.820 126.141  1.00 45.86           O
HETATM 2033  O   HOH S 226      67.641   5.707 127.083  1.00 41.52           O
HETATM 2034  O   HOH S 227      69.228  11.041 124.572  1.00 39.24           O
HETATM 2035  O   HOH S 228      68.926   8.000 124.000  1.00 40.05           O
HETATM 2036  O   HOH S 229      82.468  15.374 141.699  1.00 35.64           O
HETATM 2037  O   HOH S 230      76.519  43.413 146.072  1.00 44.22           O
HETATM 2038  O   HOH S 231      82.464  15.904 136.942  1.00 38.05           O
HETATM 2039  O   HOH S 232      47.946   7.182 155.017  1.00 45.19           O
HETATM 2040  O   HOH S 233      79.543  14.330 132.377  1.00 32.46           O
HETATM 2041  O   HOH S 234      76.201  45.797 146.797  1.00 40.71           O
HETATM 2042  O   HOH S 235      90.457  28.088 149.726  1.00 42.31           O
HETATM 2043  O   HOH S 236      62.214  36.425 145.714  1.00 40.48           O
HETATM 2044  O   HOH S 237      76.047  22.485 121.376  1.00 39.02           O
HETATM 2045  O   HOH S 238      85.236  20.425 140.805  1.00 37.49           O
HETATM 2046  O   HOH S 239      60.411  30.469 150.230  1.00 47.38           O
HETATM 2047  O   HOH S 240      66.890  42.989 141.702  1.00 40.22           O
HETATM 2048  O   HOH S 241      59.654  37.037 123.920  1.00 44.56           O
HETATM 2049  O   HOH S 242      47.560  26.099 153.726  1.00 39.29           O
HETATM 2050  O   HOH S 243      88.692  21.846 159.176  1.00 42.42           O
HETATM 2051  O   HOH S 244      41.064  28.550 132.302  1.00 41.67           O
HETATM 2052  O   HOH S 245      64.623  17.624 135.755  1.00 27.84           O
HETATM 2053  O   HOH S 246      61.497  26.966 149.968  1.00 27.61           O
HETATM 2054  O   HOH S 247      62.470  15.458 135.513  1.00 29.52           O
HETATM 2055  O   HOH S 248      82.319  48.220 141.303  1.00 31.37           O
HETATM 2056  O   HOH S 249      43.146  14.688 153.445  1.00 34.45           O
HETATM 2057  O   HOH S 250      73.385  12.006 127.796  1.00 33.56           O
HETATM 2058  O   HOH S 251      83.799  22.107 134.798  1.00 36.06           O
HETATM 2059  O   HOH S 252      64.794  38.691 133.056  1.00 36.44           O
HETATM 2060  O   HOH S 253      41.459  32.966 124.618  1.00 46.56           O
HETATM 2061  O   HOH S 254      43.796  16.685 154.101  1.00 36.93           O
HETATM 2062  O   HOH S 255      68.724  36.698 151.348  1.00 47.24           O
HETATM 2063  O   HOH S 256      70.431  16.128 151.489  1.00 46.68           O
HETATM 2064  O   HOH S 257      39.397  28.261 134.469  1.00 47.04           O
HETATM 2065  O   HOH S 258      91.825  37.639 144.017  1.00 46.19           O
HETATM 2066  O   HOH S 259      72.965  39.258 128.065  1.00 42.19           O
HETATM 2067  O   HOH S 260      88.461  38.387 151.854  1.00 33.48           O
HETATM 2068  O   HOH S 261      61.622  42.660 138.530  1.00 29.92           O
HETATM 2069  O   HOH S 262      83.149  17.595 130.255  1.00 37.68           O
HETATM 2070  O   HOH S 263      59.372  47.955 139.792  1.00 46.78           O
HETATM 2071  O   HOH S 264      42.091  36.566 142.564  1.00 40.91           O
```

[2052]

```
HETATM 2072  O   HOH S 265      44.992  26.100 122.614  1.00 39.25           O
HETATM 2073  O   HOH S 266      71.532  12.267 123.634  1.00 41.50           O
HETATM 2074  O   HOH S 267      70.979  40.102 145.170  1.00 37.72           O
HETATM 2075  O   HOH S 268      64.003  28.450 123.976  1.00 42.58           O
HETATM 2076  O   HOH S 269      41.039  32.559 130.785  1.00 39.35           O
HETATM 2077  O   HOH S 270      49.873  14.201 125.098  1.00 40.87           O
HETATM 2078  O   HOH S 271      87.392  20.437 146.347  1.00 48.32           O
HETATM 2079  O   HOH S 272      69.187  22.808 148.747  1.00 27.13           O
HETATM 2080  O   HOH S 273      44.007  16.493 130.653  1.00 46.76           O
HETATM 2081  O   HOH S 274      84.493  25.823 132.466  1.00 32.52           O
HETATM 2082  O   HOH S 275      76.439  32.227 126.136  1.00 35.88           O
HETATM 2083  O   HOH S 276      43.531  16.088 133.140  1.00 43.94           O
HETATM 2084  O   HOH S 277      56.724   7.713 152.930  1.00 52.46           O
HETATM 2085  O   HOH S 278      60.924  19.733 152.452  1.00 41.00           O
HETATM 2086  O   HOH S 279      89.001  27.335 167.066  1.00 48.98           O
HETATM 2087  O   HOH S 280      40.588  26.255 139.597  1.00 42.79           O
HETATM 2088  O   HOH S 281      64.038  11.258 131.554  1.00 37.59           O
HETATM 2089  O   HOH S 282      55.680  10.925 152.175  1.00 48.21           O
HETATM 2090  O   HOH S 283      59.121  16.244 155.053  1.00 40.08           O
HETATM 2091  O   HOH S 284      60.790   8.745 145.726  1.00 42.46           O
HETATM 2092  O   HOH S 285      41.952  26.465 142.164  1.00 42.63           O
HETATM 2093  O   HOH S 286      47.846  21.371 127.235  1.00 49.27           O
HETATM 2094  O   HOH S 287      59.481   6.562 144.673  1.00 48.69           O
HETATM 2095  O   HOH S 288      84.996  27.366 126.165  1.00 44.93           O
HETATM 2096  O   HOH S 289      63.119  10.992 152.757  1.00 51.09           O
TER
END
```

[2053]

[2054] [표 21]

CATspFv_HL(mscg379)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3 정밀화.
REMARK   3   프로그램      : PHENIX (1.18_3855: ???)
REMARK   3   저자          : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                 : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                 : Hintze,Hung,Ioerger,Liebschner,McCoy,McKee,Moriarty,
REMARK   3                 : Oeffner,Poon,Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,
REMARK   3                 : Sauter,Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  X선 데이터.
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)       : 2.40
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)      : 34.86
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)   : 1.37
REMARK   3   범위의 완전성          (%) : 97.36
REMARK   3   반사 수                  : 9682
REMARK   3   반사 수 (비이상)         : 9682
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값      (작업 + 시험 세트)     : 0.2650
REMARK   3   R값             (작업 세트)     : 0.2620
REMARK   3   자유 R값                       : 0.3279
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈   (%) : 5.03
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트       : 487
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3  BIN       분해능 범위    COMPL.    NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWORK CCFREE
REMARK   3    1   34.86 -    3.46    0.99     3231   169  0.2114 0.2740   0.934  0.886
REMARK   3    2    3.46 -    2.75    0.97     2996   160  0.3410 0.4133   0.894  0.783
REMARK   3    3    2.75 -    2.40    0.96     2968   158  0.5068 0.6227   0.859  0.850
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법        : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경          : 1.11
REMARK   3   수축 반경          : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자   : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)       : 0.53
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반)   : 52.98
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  기하학적 구조 제한 라이브러리: GEOSTD + 모노머 라이브러리 + CDL V1.2
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3    결합    :  0.002   0.035   1781
REMARK   3    각도    :  0.494   4.171   2420
REMARK   3    키랄성  :  0.040   0.140    266
REMARK   3    평면성  :  0.004   0.035    314
REMARK   3    이면각  : 13.059 179.966    623
REMARK   3    최소 비결합 거리 : 2.253
REMARK   3
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3    모든 원자 충돌 점수 : 7.08
```

[2055]

```
REMARK   3    라마찬드란 플롯:
REMARK   3      이상치 :  0.00 %
REMARK   3      허용   :  6.58 %
REMARK   3      선호   : 93.42 %
REMARK   3    회전 이성질체 이상치 :  2.65 %
REMARK   3    CBETA 편차          :  0.00 %
REMARK   3    펩티드 평면:
REMARK   3      CIS-프롤린     : 0.00 %
REMARK   3      CIS-전반       : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 프롤린 : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 전반   : 0.00 %
REMARK   3
REMARK   3  RAMA-Z (라마찬드란 플롯 Z 점수):
REMARK   3  해석: 불량 |RAMA-Z| > 3; 의심 2 < |RAMA-Z| < 3; 양호 |RAMA-Z| < 2.
REMARK   3  전체/나선/시트/루프에 대한 점수는 독립적으로 스케일링됨;
REMARK   3  따라서, 값은 단순하게 관련되어 있지 않음.
REMARK   3    전체: -1.55 (0.56), 잔기: 228
REMARK   3    나선:  없음  (없음), 잔기: 0
REMARK   3    시트: -1.66 (0.46), 잔기: 106
REMARK   3    루프: -0.23 (0.60), 잔기: 122
REMARK   3
REMARK   3                  min    max    평균 <Bi,j>   iso aniso
REMARK   3     전체   :   77.25 191.24 123.29   4.64  1743  1743
REMARK   3     단백질 :   77.25 191.24 123.29   4.64  1743  1743
REMARK   3     사슬  A:   77.25 191.24 123.29    N/A  1743  1743
REMARK   3     히스토그램:
REMARK   3            값            원자 수
REMARK   3      77.25 - 88.65         9
REMARK   3      88.65 - 100.05      177
REMARK   3     100.05 - 111.45      404
REMARK   3     111.45 - 122.84      339
REMARK   3     122.84 - 134.24      285
REMARK   3     134.24 - 145.64      275
REMARK   3     145.64 - 157.04      165
REMARK   3     157.04 - 168.44       55
REMARK   3     168.44 - 179.84       24
REMARK   3     179.84 - 191.24       10
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  TLS 세부사항.
REMARK   3   TLS 군의 수: 5
REMARK   3   원점: 질량 중심
REMARK   3   TLS 군 : 1
REMARK   3    선택: 사슬 'A' 및 (resid    1  내지   17 )
REMARK   3    군 (A)의 원점:  42.6735 -18.0194 -15.4614
REMARK   3    T 텐서
REMARK   3      T11:   1.4571 T22:   1.4676
REMARK   3      T33:   1.0463 T12:   0.3247
REMARK   3      T13:  -0.0832 T23:  -0.0706
REMARK   3    L 텐서
REMARK   3      L11:   5.3712 L22:   3.1185
REMARK   3      L33:   2.1570 L12:   4.1278
REMARK   3      L13:   0.7760 L23:   1.1510
REMARK   3    S 텐서
REMARK   3      S11:   0.0868 S12:   1.4087 S13:   0.2219
REMARK   3      S21:   0.2414 S22:   0.7862 S23:   0.2854
REMARK   3      S31:   0.7046 S32:   1.1336 S33:  -1.0491
REMARK   3   TLS 군 : 2
REMARK   3    선택: 사슬 'A' 및 (resid   18  내지   60 )
REMARK   3    군 (A)의 원점:  41.1434 -17.2045  -4.4167
REMARK   3    T 텐서
REMARK   3      T11:   1.5997 T22:   1.2431
```

[2056]

```
REMARK   3      T33:   0.9800 T12:   0.6084
REMARK   3      T13:  -0.1821 T23:  -0.1470
REMARK   3    L 텐서
REMARK   3      L11:   6.4741 L22:   3.4692
REMARK   3      L33:   7.1871 L12:   0.2297
REMARK   3      L13:  -1.1308 L23:   1.7220
REMARK   3    S 텐서
REMARK   3      S11:   0.1665 S12:   0.6541 S13:  -0.6716
REMARK   3      S21:   0.6860 S22:   0.7379 S23:  -0.6052
REMARK   3      S31:   0.7909 S32:   2.0787 S33:  -0.5233
REMARK   3   TLS 군 : 3
REMARK   3    선택: 사슬 'A' 및 (resid   61  내지  114 )
REMARK   3    군 (A)의 원점:  41.3754 -19.7610  -6.7985
REMARK   3    T 텐서
REMARK   3      T11:   1.6856 T22:   1.3801
REMARK   3      T33:   1.0564 T12:   0.6118
REMARK   3      T13:  -0.2336 T23:  -0.1321
REMARK   3    L 텐서
REMARK   3      L11:   4.1271 L22:   1.9038
REMARK   3      L33:   5.9156 L12:  -1.3538
REMARK   3      L13:  -0.6625 L23:   3.1940
REMARK   3    S 텐서
REMARK   3      S11:   0.1679 S12:  -0.2636 S13:  -0.1481
REMARK   3      S21:   1.3081 S22:   0.6690 S23:  -0.5505
REMARK   3      S31:   2.4204 S32:   1.8013 S33:  -0.1677
REMARK   3   TLS 군 : 4
REMARK   3    선택: 사슬 'A' 및 (resid  115  내지  147 )
REMARK   3    군 (A)의 원점:  23.3003 -25.0639  -5.5452
REMARK   3    T 텐서
REMARK   3      T11:   2.0172 T22:   1.1479
REMARK   3      T33:   1.2240 T12:  -0.0060
REMARK   3      T13:  -0.0971 T23:  -0.0726
REMARK   3    L 텐서
REMARK   3      L11:   7.9974 L22:   0.0941
REMARK   3      L33:   8.0429 L12:   1.1341
REMARK   3      L13:  -1.7771 L23:  -0.8410
REMARK   3    S 텐서
REMARK   3      S11:   0.3446 S12:  -0.1036 S13:  -1.8402
REMARK   3      S21:  -0.3470 S22:   0.2411 S23:   0.8233
REMARK   3      S31:   3.3149 S32:  -2.4306 S33:  10.6198
REMARK   3   TLS 군 : 5
REMARK   3    선택: 사슬 'A' 및 (resid  148  내지  245 )
REMARK   3    군 (A)의 원점:  21.7529 -12.7274   0.2387
REMARK   3    T 텐서
REMARK   3      T11:   1.3823 T22:   1.1398
REMARK   3      T33:   1.2360 T12:   0.0131
REMARK   3      T13:   0.1655 T23:  -0.1571
REMARK   3    L 텐서
REMARK   3      L11:   9.2345 L22:   2.0128
REMARK   3      L33:   9.4448 L12:   0.4299
REMARK   3      L13:   4.2174 L23:   0.7936
REMARK   3    S 텐서
REMARK   3      S11:   0.6320 S12:  -0.8348 S13:   1.2133
REMARK   3      S21:   0.3143 S22:  -0.5659 S23:   0.4470
REMARK   3      S31:   0.4670 S32:  -1.1786 S33:   0.0432
REMARK   3
CRYST1   63.340   63.340  104.580  90.00  90.00 120.00 P 31 2 1
SCALE1      0.015788  0.009115  0.000000        0.00000
SCALE2      0.000000  0.018230  0.000000        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.009562        0.00000
ATOM      1  N   GLU A   1      37.529   0.949  -7.884  1.00149.98           N
ANISOU    1  N   GLU A   1    16876  14642  25467    -91   3925   1988       N
ATOM      2  CA  GLU A   1      38.927   0.959  -8.301  1.00148.83           C
ANISOU    2  CA  GLU A   1    16838  15161  24551    -45   3725   1989       C
ATOM      3  C   GLU A   1      39.563  -0.415  -8.102  1.00145.69           C
```

[2057]

```
ANISOU    3  C   GLU A   1    16934  15315  23106    185   3537   1667       C
ATOM      4  O   GLU A   1      40.504  -0.782  -8.809  1.00148.32           O
ANISOU    4  O   GLU A   1    17348  16258  22749    292   3224   1740       O
ATOM      5  CB  GLU A   1      39.709   2.027  -7.530  1.00149.99           C
ANISOU    5  CB  GLU A   1    16862  15231  24894   -223   4111   1705       C
ATOM      6  CG  GLU A   1      41.184   2.111  -7.895  1.00149.05           C
ANISOU    6  CG  GLU A   1    16826  15801  24006   -198   3939   1669       C
ATOM      7  CD  GLU A   1      41.408   2.362  -9.377  1.00156.01           C
ANISOU    7  CD  GLU A   1    17459  17013  24805   -228   3499   2243       C
ATOM      8  OE1 GLU A   1      40.706   3.223  -9.949  1.00153.87           O
ANISOU    8  OE1 GLU A   1    16804  16322  25336   -393   3446   2708       O
ATOM      9  OE2 GLU A   1      42.282   1.693  -9.971  1.00156.73           O
ANISOU    9  OE2 GLU A   1    17725  17785  24041   -111   3196   2224       O
ATOM     10  N   VAL A   2      39.038  -1.174  -7.141  1.00130.04           N
ANISOU   10  N   VAL A   2    15266  13107  21036    240   3722   1301       N
ATOM     11  CA  VAL A   2      39.530  -2.518  -6.855  1.00121.70           C
ANISOU   11  CA  VAL A   2    14689  12464  19087    453   3522   1009       C
ATOM     12  C   VAL A   2      39.330  -3.405  -8.078  1.00119.82           C
ANISOU   12  C   VAL A   2    14497  12538  18491    650   3040   1339       C
ATOM     13  O   VAL A   2      38.195  -3.724  -8.447  1.00121.68           O
ANISOU   13  O   VAL A   2    14680  12467  19087    653   2953   1576       O
ATOM     14  CB  VAL A   2      38.825  -3.112  -5.622  1.00111.41           C
ANISOU   14  CB  VAL A   2    13702  10793  17837    399   3795    629       C
ATOM     15  CG1 VAL A   2      39.404  -4.476  -5.285  1.00104.42           C
ANISOU   15  CG1 VAL A   2    13320  10300  16054    606   3542    361       C
ATOM     16  CG2 VAL A   2      38.943  -2.164  -4.438  1.00111.97           C
ANISOU   16  CG2 VAL A   2    13685  10558  18300    127   4317    280       C
ATOM     17  N   GLN A   3      40.428  -3.809  -8.716  1.00108.66           N
ANISOU   17  N   GLN A   3    13162  11751  16372    794   2739   1324       N
ATOM     18  CA  GLN A   3      40.382  -4.625  -9.922  1.00110.68           C
ANISOU   18  CA  GLN A   3    13702  12387  16230    938   2306   1571       C
ATOM     19  C   GLN A   3      41.005  -5.987  -9.653  1.00102.96           C
ANISOU   19  C   GLN A   3    12883  11776  14461   1209   2102   1188       C
ATOM     20  O   GLN A   3      42.104  -6.075  -9.096  1.00102.42           O
ANISOU   20  O   GLN A   3    12959  12003  13953   1293   2139    842       O
ATOM     21  CB  GLN A   3      41.105  -3.939 -11.089  1.00113.25           C
ANISOU   21  CB  GLN A   3    13430  13168  16433    828   2104   1886       C
ATOM     22  CG  GLN A   3      40.413  -2.686 -11.607  1.00113.93           C
ANISOU   22  CG  GLN A   3    13078  12886  17325    556   2173   2392       C
ATOM     23  CD  GLN A   3      41.078  -2.115 -12.849  1.00118.46           C
ANISOU   23  CD  GLN A   3    13358  13951  17698    388   1905   2764       C
ATOM     24  OE1 GLN A   3      41.823  -2.808 -13.544  1.00109.63           O
ANISOU   24  OE1 GLN A   3    12342  13470  15844    469   1638   2675       O
ATOM     25  NE2 GLN A   3      40.811  -0.844 -13.131  1.00120.55           N
ANISOU   25  NE2 GLN A   3    13246  13919  18637    126   1975   3168       N
ATOM     26  N   LEU A   4      40.300  -7.042 -10.055  1.00103.59           N
ANISOU   26  N   LEU A   4    13146  11820  14395   1342   1868   1257       N
ATOM     27  CA  LEU A   4      40.805  -8.410 -10.006  1.00106.91           C
ANISOU   27  CA  LEU A   4    13932  12556  14132   1614   1603    945       C
ATOM     28  C   LEU A   4      40.645  -9.012 -11.394  1.00102.22           C
ANISOU   28  C   LEU A   4    13234  12313  13291   1682   1248   1177       C
ATOM     29  O   LEU A   4      39.518  -9.179 -11.869  1.00102.51           O
ANISOU   29  O   LEU A   4    13215  12094  13639   1605   1185   1479       O
ATOM     30  CB  LEU A   4      40.053  -9.242  -8.961  1.00100.96           C
ANISOU   30  CB  LEU A   4    13575  11368  13416   1677   1689    733       C
ATOM     31  CG  LEU A   4      39.962  -8.653  -7.551  1.00102.49           C
ANISOU   31  CG  LEU A   4    13874  11176  13891   1506   2084    508       C
ATOM     32  CD1 LEU A   4      38.976  -9.432  -6.694  1.00100.61           C
ANISOU   32  CD1 LEU A   4    13987  10505  13734   1470   2168    374       C
ATOM     33  CD2 LEU A   4      41.328  -8.621  -6.892  1.00104.75           C
ANISOU   33  CD2 LEU A   4    14296  11799  13706   1578   2095    163       C
ATOM     34  N   LEU A   5      41.760  -9.780 -13.436  1.00105.13           C
ANISOU   34  N   LEU A   5    13403  13721  12820   1783    728   1189       C
ATOM     35  CA  LEU A   5      42.335 -11.189 -13.509  1.00102.12           C
ANISOU   36  C   LEU A   5    13305  13648  11848   2089    480    763       C
ATOM     36  C   LEU A   5      43.538 -11.383 -13.311  1.00104.27           O
```

[2058]

```
ANISOU   37  O   LEU A   5    13606  14286  11727   2247    428    392       O
ATOM     38  CB  LEU A   5      42.553  -8.814 -14.315  1.00104.19           C
ANISOU   38  CB  LEU A   5    12899  14087  12602   1566    702   1370       C
ATOM     39  CG  LEU A   5      42.104  -7.353 -14.220  1.00105.16           C
ANISOU   39  CG  LEU A   5    12722  13871  13363   1268    924   1792       C
ATOM     40  CD1 LEU A   5      43.174  -6.408 -14.741  1.00106.62           C
ANISOU   40  CD1 LEU A   5    12608  14529  13374   1076    932   1856       C
ATOM     41  CD2 LEU A   5      40.791  -7.143 -14.959  1.00108.13           C
ANISOU   41  CD2 LEU A   5    12917  13954  14214   1066    821   2331       C
ATOM     42  N   GLU A   6      41.479 -12.165 -13.801  1.00101.83           N
ANISOU   42  N   GLU A   6    13454  13451  11785   2172    318    809       N
ATOM     43  CA  GLU A   6      41.909 -13.550 -13.928  1.00101.80           C
ANISOU   43  CA  GLU A   6    13706  13668  11303   2461     64    417       C
ATOM     44  C   GLU A   6      42.532 -13.802 -15.298  1.00104.61           C
ANISOU   44  C   GLU A   6    13805  14686  11255   2420   -146    352       C
ATOM     45  O   GLU A   6      42.152 -13.191 -16.301  1.00104.57           O
ANISOU   45  O   GLU A   6    13501  14894  11336   2125   -162    729       O
ATOM     46  CB  GLU A   6      40.729 -14.502 -13.723  1.00101.07           C
ANISOU   46  CB  GLU A   6    13919  13142  11339   2534    -18    482       C
ATOM     47  CG  GLU A   6      40.003 -14.360 -12.389  1.00 99.81           C
ANISOU   47  CG  GLU A   6    14029  12349  11545   2513    200    512       C
ATOM     48  CD  GLU A   6      38.984 -13.233 -12.379  1.00 99.85           C
ANISOU   48  CD  GLU A   6    13791  11999  12149   2214    456    945       C
ATOM     49  OE1 GLU A   6      39.209 -12.205 -13.051  1.00100.77           O
ANISOU   49  OE1 GLU A   6    13523  12334  12432   2028    513   1209       O
ATOM     50  OE2 GLU A   6      37.947 -13.379 -11.700  1.00 99.30           O
ANISOU   50  OE2 GLU A   6    13900  11419  12409   2152    592   1018       O
ATOM     51  N   SER A   7      43.491 -14.725 -15.335  1.00104.05           N
ANISOU   51  N   SER A   7    13840  14942  10753   2695   -320   -140       N
ATOM     52  CA  SER A   7      44.158 -15.088 -16.575  1.00106.05           C
ANISOU   52  CA  SER A   7    13791  15854  10594   2656   -489   -337       C
ATOM     53  C   SER A   7      44.579 -16.549 -16.500  1.00110.58           C
ANISOU   53  C   SER A   7    14651  16486  10880   3021   -713   -863       C
ATOM     54  O   SER A   7      44.418 -17.212 -15.473  1.00107.31           O
ANISOU   54  O   SER A   7    14592  15608  10571   3291   -767  -1020       O
ATOM     55  CB  SER A   7      45.369 -14.187 -16.845  1.00107.18           C
ANISOU   55  CB  SER A   7    13664  16520  10541   2534   -402   -452       C
ATOM     56  OG  SER A   7      46.586 -14.885 -16.630  1.00108.07           O
ANISOU   56  OG  SER A   7    13805  16943  10314   2843   -513  -1046       O
ATOM     57  N   GLY A   8      45.119 -17.049 -17.612  1.00112.37           N
ANISOU   57  N   GLY A   8    14660  17286  10751   2996   -849  -1140       N
ATOM     58  CA  GLY A   8      45.667 -18.387 -17.675  1.00112.09           C
ANISOU   58  CA  GLY A   8    14750  17354  10485   3342  -1061  -1709       C
ATOM     59  C   GLY A   8      44.690 -19.486 -18.034  1.00110.44           C
ANISOU   59  C   GLY A   8    14765  16899  10296   3398  -1209  -1700       C
ATOM     60  O   GLY A   8      45.108 -20.645 -18.154  1.00112.00           O
ANISOU   60  O   GLY A   8    15054  17152  10347   3682  -1396  -2187       O
ATOM     61  N   GLY A   9      43.408 -19.171 -18.206  1.00109.18           N
ANISOU   61  N   GLY A   9    14681  16453  10348   3142  -1139  -1177       N
ATOM     62  CA  GLY A   9      42.432 -20.199 -18.535  1.00109.35           C
ANISOU   62  CA  GLY A   9    14922  16244  10383   3170  -1272  -1153       C
ATOM     63  C   GLY A   9      42.515 -20.610 -19.999  1.00111.96           C
ANISOU   63  C   GLY A   9    14983  17179  10378   2955  -1358  -1304       C
ATOM     64  O   GLY A   9      42.704 -19.784 -20.892  1.00113.17           O
ANISOU   64  O   GLY A   9    14781  17842  10375   2589  -1284  -1098       O
ATOM     65  N   GLY A  10      42.370 -21.908 -20.236  1.00113.15           N
ANISOU   65  N   GLY A  10    15311  17271  10410   3151  -1520  -1673       N
ATOM     66  CA  GLY A  10      42.447 -22.417 -21.590  1.00116.00           C
ANISOU   66  CA  GLY A  10    15431  18209  10436   2931  -1581  -1906       C
ATOM     67  C   GLY A  10      41.972 -23.850 -21.672  1.00116.92           C
ANISOU   67  C   GLY A  10    15818  18067  10539   3145  -1740  -2226       C
ATOM     68  O   GLY A  10      41.448 -24.410 -20.708  1.00115.20           O
ANISOU   68  O   GLY A  10    15995  17201  10575   3424  -1820  -2174       O
ATOM     69  N   LEU A  11      42.155 -24.437 -22.852  1.00123.54           N
ANISOU   69  N   LEU A  11    16438  19438  11065   2968  -1779  -2569       N
ATOM     70  CA  LEU A  11      41.760 -25.817 -23.093  1.00121.45           C
ANISOU   70  CA  LEU A  11    16381  18993  10773   3132  -1916  -2935       C
ATOM     71  C   LEU A  11      42.869 -26.764 -22.658  1.00123.37           C
```

[2059]

```
ANISOU   71  C   LEU A  11    16668  19147  11060   3627  -2045  -3686       C
ATOM     72  O   LEU A  11      44.050 -26.525 -22.928  1.00125.34           O
ANISOU   72  O   LEU A  11    16593  19866  11163   3677  -2002  -4110       O
ATOM     73  CB  LEU A  11      41.432 -26.038 -24.568  1.00124.31           C
ANISOU   73  CB  LEU A  11    16474  19977  10782   2673  -1882  -3000       C
ATOM     74  CG  LEU A  11      40.851 -27.408 -24.919  1.00126.29           C
ANISOU   74  CG  LEU A  11    16931  20051  11002   2759  -1994  -3328       C
ATOM     75  CD1 LEU A  11      39.516 -27.627 -24.226  1.00123.03           C
ANISOU   75  CD1 LEU A  11    16941  18928  10875   2821  -2060  -2808       C
ATOM     76  CD2 LEU A  11      40.706 -27.550 -26.430  1.00129.36           C
ANISOU   76  CD2 LEU A  11    16997  21183  10972   2238  -1931  -3463       C
ATOM     77  N   VAL A  12      42.481 -27.845 -21.979  1.00123.10           N
ANISOU   77  N   VAL A  12    17027  18494  11253   3981  -2222  -3841       N
ATOM     78  CA  VAL A  12      43.432 -28.798 -21.421  1.00125.14           C
ANISOU   78  CA  VAL A  12    17370  18513  11664   4488  -2419  -4474       C
ATOM     79  C   VAL A  12      42.771 -30.167 -21.354  1.00126.33           C
ANISOU   79  C   VAL A  12    17860  18183  11956   4681  -2612  -4674       C
ATOM     80  O   VAL A  12      41.544 -30.291 -21.335  1.00124.53           O
ANISOU   80  O   VAL A  12    17906  17659  11752   4488  -2596  -4237       O
ATOM     81  CB  VAL A  12      43.927 -28.360 -20.022  1.00128.58           C
ANISOU   81  CB  VAL A  12    18011  18503  12339   4805  -2495  -4315       C
ATOM     82  CG1 VAL A  12      42.894 -28.708 -18.956  1.00127.26           C
ANISOU   82  CG1 VAL A  12    18382  17557  12413   4910  -2607  -3889       C
ATOM     83  CG2 VAL A  12      45.277 -28.985 -19.706  1.00138.87           C
ANISOU   83  CG2 VAL A  12    19189  19829  13748   5251  -2684  -4984       C
ATOM     84  N   GLN A  13      43.602 -31.202 -21.314  1.00132.73           N
ANISOU   84  N   GLN A  13    18634  18901  12896   5068  -2802  -5353       N
ATOM     85  CA  GLN A  13      43.201 -32.598 -21.300  1.00134.85           C
ANISOU   85  CA  GLN A  13    19175  18718  13342   5296  -3016  -5668       C
ATOM     86  C   GLN A  13      43.189 -33.140 -19.879  1.00135.47           C
ANISOU   86  C   GLN A  13    19728  17976  13770   5719  -3312  -5543       C
ATOM     87  O   GLN A  13      43.816 -32.571 -18.980  1.00137.31           O
ANISOU   87  O   GLN A  13    19991  18076  14104   5897  -3369  -5411       O
ATOM     88  CB  GLN A  13      44.153 -33.432 -22.168  1.00140.90           C
ANISOU   88  CB  GLN A  13    19565  19862  14107   5453  -3057  -6542       C
ATOM     89  CG  GLN A  13      45.620 -33.321 -21.780  1.00142.08           C
ANISOU   89  CG  GLN A  13    19429  20135  14419   5823  -3153  -7030       C
ATOM     90  CD  GLN A  13      46.315 -32.139 -22.432  1.00141.95           C
ANISOU   90  CD  GLN A  13    18925  20935  14075   5508  -2870  -7060       C
ATOM     91  OE1 GLN A  13      46.416 -32.062 -23.659  1.00144.31           O
ANISOU   91  OE1 GLN A  13    18848  21912  14071   5150  -2661  -7368       O
ATOM     92  NE2 GLN A  13      46.799 -31.209 -21.612  1.00139.45           N
ANISOU   92  NE2 GLN A  13    18618  20572  13794   5598  -2862  -6740       N
ATOM     93  N   PRO A  14      42.470 -34.238 -19.635  1.00142.29           N
ANISOU   93  N   PRO A  14    20980  18283  14801   5844  -3515  -5563       N
ATOM     94  CA  PRO A  14      42.461 -34.827 -18.291  1.00136.32           C
ANISOU   94  CA  PRO A  14    20700  16747  14349   6191  -3842  -5430       C
ATOM     95  C   PRO A  14      43.860 -35.208 -17.826  1.00137.78           C
ANISOU   95  C   PRO A  14    20724  16838  14789   6655  -4111  -5938       C
ATOM     96  O   PRO A  14      44.667 -35.742 -18.591  1.00138.47           O
ANISOU   96  O   PRO A  14    20434  17220  14957   6835  -4150  -6603       O
ATOM     97  CB  PRO A  14      41.566 -36.060 -18.454  1.00134.05           C
ANISOU   97  CB  PRO A  14    20759  16007  14168   6210  -4008  -5504       C
ATOM     98  CG  PRO A  14      40.662 -35.710 -19.582  1.00140.88           C
ANISOU   98  CG  PRO A  14    21454  17345  14730   5751  -3693  -5332       C
ATOM     99  CD  PRO A  14      41.501 -34.898 -20.529  1.00138.19           C
ANISOU   99  CD  PRO A  14    20524  17819  14162   5594  -3447  -5603       C
ATOM    100  N   GLY A  15      44.142 -34.920 -16.555  1.00143.74           N
ANISOU  100  N   GLY A  15    21747  17190  15679   6824  -4294  -5633       N
ATOM    101  CA  GLY A  15      45.427 -35.237 -15.967  1.00136.06           C
ANISOU  101  CA  GLY A  15    20652  16075  14969   7254  -4601  -6016       C
ATOM    102  C   GLY A  15      46.534 -34.253 -16.263  1.00136.10           C
ANISOU  102  C   GLY A  15    20142  16721  14850   7259  -4403  -6237       C
ATOM    103  O   GLY A  15      47.702 -34.564 -16.003  1.00139.33           O
ANISOU  103  O   GLY A  15    20333  17116  15491   7627  -4642  -6676       O
ATOM    104  N   GLY A  16      46.211 -33.077 -16.804  1.00132.93           N
ANISOU  104  N   GLY A  16    19526  16871  14112   6856  -3993  -5941       N
ATOM    105  CA  GLY A  16      47.200 -32.069 -17.107  1.00132.88           C
```

[2060]

```
ANISOU  105  CA  GLY A  16    19048  17491  13947   6795  -3786  -6102       C
ATOM    106  C   GLY A  16      47.290 -31.006 -16.022  1.00141.72           C
ANISOU  106  C   GLY A  16    20333  18492  15022   6714  -3722  -5583       C
ATOM    107  O   GLY A  16      46.574 -31.019 -15.023  1.00136.05           O
ANISOU  107  O   GLY A  16    20085  17227  14379   6675  -3817  -5107       O
ATOM    108  N   SER A  17      48.205 -30.068 -16.241  1.00137.36           N
ANISOU  108  N   SER A  17    19371  18489  14329   6653  -3539  -5713       N
ATOM    109  CA  SER A  17      48.414 -28.961 -15.324  1.00135.65           C
ANISOU  109  CA  SER A  17    19232  18254  14056   6546  -3429  -5294       C
ATOM    110  C   SER A  17      48.067 -27.645 -16.004  1.00132.80           C
ANISOU  110  C   SER A  17    18609  18429  13419   6088  -3006  -4961       C
ATOM    111  O   SER A  17      48.174 -27.507 -17.226  1.00137.87           O
ANISOU  111  O   SER A  17    18878  19635  13871   5894  -2834  -5189       O
ATOM    112  CB  SER A  17      49.860 -28.923 -14.811  1.00140.34           C
ANISOU  112  CB  SER A  17    19592  18974  14758   6876  -3618  -5685       C
ATOM    113  OG  SER A  17      50.113 -29.987 -13.907  1.00135.16           O
ANISOU  113  OG  SER A  17    19242  17706  14405   7271  -4067  -5818       O
ATOM    114  N   LEU A  18      47.638 -26.684 -15.192  1.00147.89           N
ANISOU  114  N   LEU A  18    18157  22325  15709   9821  -2441  -7689       N
ATOM    115  CA  LEU A  18      47.287 -25.353 -15.667  1.00143.37           C
ANISOU  115  CA  LEU A  18    17382  22304  14786   9095  -2131  -7362       C
ATOM    116  C   LEU A  18      47.299 -24.418 -14.472  1.00140.32           C
ANISOU  116  C   LEU A  18    17167  21730  14419   8874  -2193  -6756       C
ATOM    117  O   LEU A  18      46.688 -24.724 -13.445  1.00136.81           O
ANISOU  117  O   LEU A  18    17298  20452  14232   9036  -2384  -6367       O
ATOM    118  CB  LEU A  18      45.909 -25.345 -16.333  1.00139.90           C
ANISOU  118  CB  LEU A  18    17325  21516  14316   8625  -1962  -7100       C
ATOM    119  CG  LEU A  18      45.486 -24.019 -16.965  1.00136.12           C
ANISOU  119  CG  LEU A  18    16657  21590  13471   7862  -1649  -6685       C
ATOM    120  CD1 LEU A  18      46.260 -23.779 -18.259  1.00140.23           C
ANISOU  120  CD1 LEU A  18    16514  23168  13598   7712  -1416  -7175       C
ATOM    121  CD2 LEU A  18      43.988 -23.996 -17.216  1.00132.19           C
ANISOU  121  CD2 LEU A  18    16636  20575  13015   7482  -1576  -6276       C
ATOM    122  N   ARG A  19      47.989 -23.289 -14.595  1.00141.24           N
ANISOU  122  N   ARG A  19    16796  22613  14257   8482  -2014  -6692       N
ATOM    123  CA  ARG A  19      48.060 -22.321 -13.509  1.00137.90           C
ANISOU  123  CA  ARG A  19    16492  22071  13832   8215  -2043  -6193       C
ATOM    124  C   ARG A  19      47.390 -21.028 -13.943  1.00133.42           C
ANISOU  124  C   ARG A  19    15969  21674  13050   7405  -1698  -5696       C
ATOM    125  O   ARG A  19      47.827 -20.387 -14.906  1.00135.02           O
ANISOU  125  O   ARG A  19    15699  22642  12960   7021  -1421  -5847       O
ATOM    126  CB  ARG A  19      49.504 -22.060 -13.077  1.00142.08           C
ANISOU  126  CB  ARG A  19    16432  23287  14266   8448  -2152  -6543       C
ATOM    127  CG  ARG A  19      49.603 -21.376 -11.716  1.00139.68           C
ANISOU  127  CG  ARG A  19    16326  22729  14014   8344  -2294  -6124       C
ATOM    128  CD  ARG A  19      51.042 -21.180 -11.263  1.00144.54           C
ANISOU  128  CD  ARG A  19    16312  24080  14526   8589  -2443  -6526       C
ATOM    129  NE  ARG A  19      51.762 -20.238 -12.114  1.00149.92           N
ANISOU  129  NE  ARG A  19    16324  25717  14922   8037  -2104  -6760       N
ATOM    130  CZ  ARG A  19      52.905 -19.649 -11.776  1.00152.32           C
ANISOU  130  CZ  ARG A  19    16034  26755  15087   7936  -2112  -7025       C
ATOM    131  NH1 ARG A  19      53.458 -19.898 -10.597  1.00151.97           N
ANISOU  131  NH1 ARG A  19    15963  26641  15138   8388  -2479  -7095       N
ATOM    132  NH2 ARG A  19      53.492 -18.807 -12.615  1.00165.56           N
ANISOU  132  NH2 ARG A  19    17137  29261  16505   7362  -1749  -7215       N
ATOM    133  N   LEU A  20      46.334 -20.653 -13.235  1.00127.65           N
ANISOU  133  N   LEU A  20    15811  20230  12460   7165  -1704  -5097       N
ATOM    134  CA  LEU A  20      45.697 -19.360 -13.401  1.00121.95           C
ANISOU  134  CA  LEU A  20    15193  19551  11591   6475  -1410  -4560       C
ATOM    135  C   LEU A  20      46.419 -18.308 -12.564  1.00123.82           C
ANISOU  135  C   LEU A  20    15258  20396  11396   6224  -1364  -4396       C
ATOM    136  O   LEU A  20      47.137 -18.619 -11.611  1.00123.46           O
ANISOU  136  O   LEU A  20    15149  19933  11828   6595  -1618  -4583       O
ATOM    137  CB  LEU A  20      44.226 -19.428 -12.994  1.00117.19           C
ANISOU  137  CB  LEU A  20    15243  18103  11179   6355  -1426  -4033       C
ATOM    138  CG  LEU A  20      43.441 -20.649 -13.473  1.00117.72           C
ANISOU  138  CG  LEU A  20    15579  17756  11393   6647  -1542  -4213       C
ATOM    139  CD1 LEU A  20      41.980 -20.507 -13.100  1.00113.21           C
```

[2061]

```
ANISOU  139  CD1 LEU A  20    15564  16473  10977   6402  -1501  -3669       C
ATOM    140  CD2 LEU A  20       43.595 -20.838 -14.970  1.00120.57           C
ANISOU  140  CD2 LEU A  20    15537  18770  11506   6537  -1380  -4600       C
ATOM    141  N   SER A  21       46.217 -17.048 -12.937  1.00119.90           N
ANISOU  141  N   SER A  21    14696  19756  11106   5587  -1039  -4047       N
ATOM    142  CA  SER A  21       46.783 -15.917 -12.220  1.00119.76           C
ANISOU  142  CA  SER A  21    14559  19899  11048   5219   -930  -3879       C
ATOM    143  C   SER A  21       45.697 -14.873 -12.003  1.00116.65           C
ANISOU  143  C   SER A  21    14626  18994  10702   4717   -702  -3219       C
ATOM    144  O   SER A  21       44.585 -14.981 -12.528  1.00112.63           O
ANISOU  144  O   SER A  21    14434  18145  10217   4645   -621  -2906       O
ATOM    145  CB  SER A  21       47.965 -15.302 -12.978  1.00124.18           C
ANISOU  145  CB  SER A  21    14447  21398  11340   4896   -692  -4220       C
ATOM    146  OG  SER A  21       47.510 -14.514 -14.062  1.00123.62           O
ANISOU  146  OG  SER A  21    14359  21552  11061   4352   -316  -3921       O
ATOM    147  N   CYS A  22       46.036 -13.848 -11.218  1.00117.27           N
ANISOU  147  N   CYS A  22    14717  19042  10799   4375   -600  -3041       N
ATOM    148  CA  CYS A  22       45.094 -12.767 -10.933  1.00113.71           C
ANISOU  148  CA  CYS A  22    14695  18087  10423   3920   -365  -2449       C
ATOM    149  C   CYS A  22       45.897 -11.549 -10.477  1.00116.78           C
ANISOU  149  C   CYS A  22    14881  18733  10758   3436   -161  -2452       C
ATOM    150  O   CYS A  22       46.349 -11.501  -9.329  1.00116.01           O
ANISOU  150  O   CYS A  22    14808  18524  10749   3539   -341  -2597       O
ATOM    151  CB  CYS A  22       44.077 -13.183  -9.882  1.00111.19           C
ANISOU  151  CB  CYS A  22    14954  16950  10345   4197   -572  -2156       C
ATOM    152  SG  CYS A  22       43.089 -11.814  -9.234  1.00112.57           S
ANISOU  152  SG  CYS A  22    15608  16518  10644   3711   -302  -1527       S
ATOM    153  N   ALA A  23       46.055 -10.577 -11.373  1.00114.88           N
ANISOU  153  N   ALA A  23    14459  18831  10359   2897    215  -2290       N
ATOM    154  CA  ALA A  23       46.718  -9.323 -11.032  1.00117.13           C
ANISOU  154  CA  ALA A  23    14607  19275  10621   2328    481  -2255       C
ATOM    155  C   ALA A  23       45.711  -8.401 -10.353  1.00116.65           C
ANISOU  155  C   ALA A  23    15129  18432  10759   2061    632  -1706       C
ATOM    156  O   ALA A  23       44.805  -7.870 -11.006  1.00116.38           O
ANISOU  156  O   ALA A  23    15385  18107  10728   1852    872  -1218       O
ATOM    157  CB  ALA A  23       47.312  -8.668 -12.273  1.00121.05           C
ANISOU  157  CB  ALA A  23    14711  20417  10867   1836    858  -2277       C
ATOM    158  N   ALA A  24       45.871  -8.208  -9.048  1.00113.13           N
ANISOU  158  N   ALA A  24    14841  17681  10462   2093    488  -1798       N
ATOM    159  CA  ALA A  24       44.992  -7.353  -8.268  1.00112.77           C
ANISOU  159  CA  ALA A  24    15327  16909  10612   1869    630  -1370       C
ATOM    160  C   ALA A  24       45.539  -5.931  -8.198  1.00113.60           C
ANISOU  160  C   ALA A  24    15360  17074  10726   1188   1003  -1329       C
ATOM    161  O   ALA A  24       46.731  -5.686  -8.397  1.00117.88           O
ANISOU  161  O   ALA A  24    15418  18237  11136    900   1081  -1720       O
ATOM    162  CB  ALA A  24       44.813  -7.912  -6.856  1.00108.52           C
ANISOU  162  CB  ALA A  24    15039  16001  10194   2256    289  -1494       C
ATOM    163  N   SER A  25       44.644  -4.990  -7.907  1.00111.89           N
ANISOU  163  N   SER A  25    15632  16193  10687    926   1249   -867       N
ATOM    164  CA  SER A  25       45.016  -3.589  -7.749  1.00115.70           C
ANISOU  164  CA  SER A  25    16173  16541  11247    273   1632   -791       C
ATOM    165  C   SER A  25       43.962  -2.903  -6.887  1.00112.54           C
ANISOU  165  C   SER A  25    16371  15287  11103    236   1740   -423       C
ATOM    166  O   SER A  25       42.956  -3.504  -6.501  1.00115.96           O
ANISOU  166  O   SER A  25    17125  15308  11627    688   1540   -212       O
ATOM    167  CB  SER A  25       45.160  -2.893  -9.106  1.00118.01           C
ANISOU  167  CB  SER A  25    16344  17074  11422   -163   2027   -509       C
ATOM    168  OG  SER A  25       43.890  -2.555  -9.634  1.00115.57           O
ANISOU  168  OG  SER A  25    16492  16219  11201    -84   2188    123       O
ATOM    169  N   GLY A  26       44.200  -1.627  -6.591  1.00117.74           N
ANISOU  169  N   GLY A  26    17172  15676  11889   -327   2086   -372       N
ATOM    170  CA  GLY A  26       43.259  -0.832  -5.833  1.00118.38           C
ANISOU  170  CA  GLY A  26    17808  14943  12229   -401   2256    -60       C
ATOM    171  C   GLY A  26       43.275  -1.055  -4.337  1.00116.65           C
ANISOU  171  C   GLY A  26    17721  14528  12074   -230   2012   -395       C
ATOM    172  O   GLY A  26       42.434  -0.479  -3.636  1.00115.29           O
ANISOU  172  O   GLY A  26    18009  13693  12104   -241   2143   -179       O
ATOM    173  N   PHE A  27       44.193  -1.874  -3.827  1.00113.73           N
```

[2062]

```
ANISOU  173  N   PHE A  27    16961  14733  11518    -44   1659   -912       N
ATOM    174  CA  PHE A  27      44.309  -2.123  -2.397  1.00113.41           C
ANISOU  174  CA  PHE A  27    17021  14611  11457    131   1393  -1232       C
ATOM    175  C   PHE A  27      45.668  -2.747  -2.123  1.00116.50           C
ANISOU  175  C   PHE A  27    16839  15814  11613    196   1074  -1827       C
ATOM    176  O   PHE A  27      46.333  -3.256  -3.029  1.00117.80           O
ANISOU  176  O   PHE A  27    16556  16557  11646    263   1005  -1970       O
ATOM    177  CB  PHE A  27      43.187  -3.033  -1.883  1.00108.54           C
ANISOU  177  CB  PHE A  27    16780  13589  10873    742   1129   -967       C
ATOM    178  CG  PHE A  27      43.252  -4.442  -2.411  1.00106.54           C
ANISOU  178  CG  PHE A  27    16295  13709  10475   1287    775  -1000       C
ATOM    179  CD1 PHE A  27      42.742  -4.752  -3.664  1.00109.80           C
ANISOU  179  CD1 PHE A  27    16678  14130  10911   1400    868   -684       C
ATOM    180  CD2 PHE A  27      43.818  -5.456  -1.654  1.00106.96           C
ANISOU  180  CD2 PHE A  27    16178  14099  10364   1700    348  -1352       C
ATOM    181  CE1 PHE A  27      42.795  -6.046  -4.154  1.00103.44           C
ANISOU  181  CE1 PHE A  27    15676  13634   9991   1878    562   -774       C
ATOM    182  CE2 PHE A  27      43.876  -6.751  -2.134  1.00105.74           C
ANISOU  182  CE2 PHE A  27    15855  14202  10120   2218     41  -1396       C
ATOM    183  CZ  PHE A  27      43.364  -7.047  -3.394  1.00109.80           C
ANISOU  183  CZ  PHE A  27    16340  14694  10683   2289    160  -1134       C
ATOM    184  N   GLY A  28      46.075  -2.692  -0.860  1.00118.16           N
ANISOU  184  N   GLY A  28    17046  16100  11749    193    877  -2189       N
ATOM    185  CA  GLY A  28      47.281  -3.372  -0.435  1.00121.32           C
ANISOU  185  CA  GLY A  28    16911  17281  11906    379    494  -2742       C
ATOM    186  C   GLY A  28      47.102  -4.875  -0.481  1.00118.92           C
ANISOU  186  C   GLY A  28    16561  17143  11480   1162     50  -2689       C
ATOM    187  O   GLY A  28      46.472  -5.457   0.408  1.00119.63           O
ANISOU  187  O   GLY A  28    17020  16891  11542   1592   -201  -2555       O
ATOM    188  N   PHE A  29      47.656  -5.508  -1.519  1.00119.44           N
ANISOU  188  N   PHE A  29    16191  17719  11473   1337    -26  -2802       N
ATOM    189  CA  PHE A  29      47.410  -6.929  -1.747  1.00117.13           C
ANISOU  189  CA  PHE A  29    15899  17485  11122   2066   -389  -2737       C
ATOM    190  C   PHE A  29      47.850  -7.774  -0.557  1.00120.58           C
ANISOU  190  C   PHE A  29    16292  18125  11398   2588   -879  -3017       C
ATOM    191  O   PHE A  29      47.183  -8.753  -0.202  1.00122.85           O
ANISOU  191  O   PHE A  29    16929  18054  11695   3152  -1140  -2794       O
ATOM    192  CB  PHE A  29      48.122  -7.380  -3.025  1.00119.09           C
ANISOU  192  CB  PHE A  29    15609  18348  11293   2123   -368  -2940       C
ATOM    193  CG  PHE A  29      47.827  -8.800  -3.414  1.00117.14           C
ANISOU  193  CG  PHE A  29    15386  18096  11027   2833   -683  -2898       C
ATOM    194  CD1 PHE A  29      46.553  -9.171  -3.816  1.00112.54           C
ANISOU  194  CD1 PHE A  29    15290  16890  10580   3025   -611  -2429       C
ATOM    195  CD2 PHE A  29      48.823  -9.762  -3.386  1.00121.35           C
ANISOU  195  CD2 PHE A  29    15442  19244  11422   3309  -1046  -3353       C
ATOM    196  CE1 PHE A  29      46.277 -10.478  -4.173  1.00111.30           C
ANISOU  196  CE1 PHE A  29    15173  16687  10429   3621   -879  -2433       C
ATOM    197  CE2 PHE A  29      48.554 -11.071  -3.746  1.00119.32           C
ANISOU  197  CE2 PHE A  29    15250  18901  11186   3965  -1315  -3338       C
ATOM    198  CZ  PHE A  29      47.279 -11.430  -4.138  1.00114.72           C
ANISOU  198  CZ  PHE A  29    15184  17657  10748   4091  -1222  -2887       C
ATOM    199  N   SER A  30      48.961  -7.403   0.082  1.00123.35           N
ANISOU  199  N   SER A  30    16223  19056  11586   2396  -1008  -3494       N
ATOM    200  CA  SER A  30      49.464  -8.167   1.219  1.00125.71           C
ANISOU  200  CA  SER A  30    16441  19647  11676   2918  -1507  -3756       C
ATOM    201  C   SER A  30      48.574  -8.048   2.450  1.00123.43           C
ANISOU  201  C   SER A  30    16788  18745  11364   3001  -1574  -3478       C
ATOM    202  O   SER A  30      48.704  -8.860   3.372  1.00124.66           O
ANISOU  202  O   SER A  30    17043  18992  11329   3538  -1995  -3529       O
ATOM    203  CB  SER A  30      50.881  -7.710   1.565  1.00132.01           C
ANISOU  203  CB  SER A  30    16565  21314  12281   2641  -1625  -4371       C
ATOM    204  OG  SER A  30      50.919  -6.311   1.782  1.00133.33           O
ANISOU  204  OG  SER A  30    16770  21377  12512   1826  -1236  -4459       O
ATOM    205  N   SER A  31      47.673  -7.070   2.484  1.00120.63           N
ANISOU  205  N   SER A  31    16870  17776  11186   2510  -1164  -3175       N
ATOM    206  CA  SER A  31      46.861  -6.790   3.659  1.00119.12           C
ANISOU  206  CA  SER A  31    17238  17056  10967   2503  -1155  -2976       C
ATOM    207  C   SER A  31      45.506  -7.487   3.642  1.00114.01           C
```

[2063]

```
ANISOU  207  C   SER A  31    17177  15696  10447   2906  -1148  -2432       C
ATOM    208  O   SER A  31      44.685  -7.230   4.528  1.00112.53           O
ANISOU  208  O   SER A  31    17473  15029  10254   2875  -1070  -2222       O
ATOM    209  CB  SER A  31      46.653  -5.280   3.803  1.00119.84           C
ANISOU  209  CB  SER A  31    17473  16861  11201   1753   -696  -3011       C
ATOM    210  OG  SER A  31      47.884  -4.609   3.997  1.00129.07           O
ANISOU  210  OG  SER A  31    18129  18667  12245   1308   -696  -3559       O
ATOM    211  N   TYR A  32      45.246  -8.358   2.667  1.00111.72           N
ANISOU  211  N   TYR A  32    16838  15349  10263   3254  -1210  -2234       N
ATOM    212  CA  TYR A  32      43.938  -8.985   2.554  1.00107.29           C
ANISOU  212  CA  TYR A  32    16789  14131   9846   3551  -1168  -1752       C
ATOM    213  C   TYR A  32      44.082 -10.445   2.152  1.00107.20           C
ANISOU  213  C   TYR A  32    16695  14237   9800   4175  -1515  -1746       C
ATOM    214  O   TYR A  32      45.053 -10.833   1.497  1.00120.35           O
ANISOU  214  O   TYR A  32    17867  16451  11409   4324  -1670  -2063       O
ATOM    215  CB  TYR A  32      43.052  -8.230   1.552  1.00104.07           C
ANISOU  215  CB  TYR A  32    16527  13314   9702   3162   -718  -1419       C
ATOM    216  CG  TYR A  32      42.557  -6.905   2.083  1.00103.87           C
ANISOU  216  CG  TYR A  32    16777  12913   9776   2660   -360  -1312       C
ATOM    217  CD1 TYR A  32      41.491  -6.853   2.974  1.00109.86           C
ANISOU  217  CD1 TYR A  32    18051  13114  10576   2747   -294  -1041       C
ATOM    218  CD2 TYR A  32      43.166  -5.709   1.720  1.00106.35           C
ANISOU  218  CD2 TYR A  32    16845  13415  10149   2091    -68  -1502       C
ATOM    219  CE1 TYR A  32      41.031  -5.648   3.482  1.00102.59           C
ANISOU  219  CE1 TYR A  32    17385  11832   9763   2329     44   -989       C
ATOM    220  CE2 TYR A  32      42.713  -4.495   2.220  1.00106.80           C
ANISOU  220  CE2 TYR A  32    17195  13049  10335   1648    276  -1429       C
ATOM    221  CZ  TYR A  32      41.644  -4.472   3.105  1.00104.65           C
ANISOU  221  CZ  TYR A  32    17426  12224  10111   1795    323  -1187       C
ATOM    222  OH  TYR A  32      41.177  -3.278   3.613  1.00105.52           O
ANISOU  222  OH  TYR A  32    17830  11896  10366   1398    676  -1155       O
ATOM    223  N   ALA A  33      43.105 -11.250   2.561  1.00104.81           N
ANISOU  223  N   ALA A  33    16879  13400   9542   4529  -1612  -1405       N
ATOM    224  CA  ALA A  33      43.004 -12.639   2.140  1.00107.90           C
ANISOU  224  CA  ALA A  33    17318  13706   9972   5083  -1875  -1343       C
ATOM    225  C   ALA A  33      42.299 -12.730   0.791  1.00108.67           C
ANISOU  225  C   ALA A  33    17396  13592  10302   4959  -1624  -1160       C
ATOM    226  O   ALA A  33      41.500 -11.862   0.429  1.00107.86           O
ANISOU  226  O   ALA A  33    17435  13213  10335   4540  -1269   -911       O
ATOM    227  CB  ALA A  33      42.250 -13.470   3.178  1.00104.13           C
ANISOU  227  CB  ALA A  33    17402  12722   9440   5455  -2057  -1044       C
ATOM    228  N   MET A  34      42.602 -13.796   0.050  1.00110.37           N
ANISOU  228  N   MET A  34    17431  13796   9995   5393  -1984  -1299       N
ATOM    229  CA  MET A  34      42.094 -13.995  -1.302  1.00104.08           C
ANISOU  229  CA  MET A  34    16537  13098   9913   5269  -1637  -1221       C
ATOM    230  C   MET A  34      41.587 -15.423  -1.460  1.00104.17           C
ANISOU  230  C   MET A  34    16806  12750  10025   5759  -1849  -1154       C
ATOM    231  O   MET A  34      41.971 -16.324  -0.710  1.00115.15           O
ANISOU  231  O   MET A  34    18337  14060  11357   6227  -2171  -1240       O
ATOM    232  CB  MET A  34      43.178 -13.710  -2.347  1.00102.88           C
ANISOU  232  CB  MET A  34    15765  13639   9685   5142  -1590  -1597       C
ATOM    233  CG  MET A  34      43.833 -12.350  -2.201  1.00104.14           C
ANISOU  233  CG  MET A  34    15643  14173   9753   4620  -1376  -1718       C
ATOM    234  SD  MET A  34      42.698 -10.998  -2.565  1.00106.83           S
ANISOU  234  SD  MET A  34    16280  14071  10239   3994   -882  -1261       S
ATOM    235  CE  MET A  34      42.571 -11.150  -4.353  1.00100.15           C
ANISOU  235  CE  MET A  34    15140  13498   9414   3901   -696  -1228       C
ATOM    236  N   SER A  35      40.723 -15.628  -2.453  1.00100.56           N
ANISOU  236  N   SER A  35    16418  12075   9716   5646  -1667   -999       N
ATOM    237  CA  SER A  35      40.109 -16.934  -2.662  1.00111.31           C
ANISOU  237  CA  SER A  35    18052  13031  11210   6011  -1814   -952       C
ATOM    238  C   SER A  35      39.736 -17.113  -4.134  1.00104.55           C
ANISOU  238  C   SER A  35    16971  12318  10433   5885  -1662  -1033       C
ATOM    239  O   SER A  35      39.726 -16.160  -4.917  1.00 96.99           O
ANISOU  239  O   SER A  35    15742  11691   9420   5497  -1415   -997       O
ATOM    240  CB  SER A  35      38.889 -17.114  -1.745  1.00103.50           C
ANISOU  240  CB  SER A  35    17648  11358  10318   5973  -1754   -535       C
ATOM    241  OG  SER A  35      38.049 -15.971  -1.765  1.00100.77           O
```

[2064]

```
ANISOU  241  OG  SER A  35    17384  10892  10013   5498  -1426   -239       O
ATOM    242  N   TRP A  36      39.438 -18.361  -4.505  1.00105.24           N
ANISOU  242  N   TRP A  36    17197  12152  10638   6217  -1810  -1147       N
ATOM    243  CA  TRP A  36      39.017 -18.725  -5.855  1.00 98.16           C
ANISOU  243  CA  TRP A  36    16122  11378   9796   6135  -1705  -1278       C
ATOM    244  C   TRP A  36      37.671 -19.432  -5.796  1.00 96.70           C
ANISOU  244  C   TRP A  36    16379  10561   9803   6119  -1667  -1037       C
ATOM    245  O   TRP A  36      37.505 -20.393  -5.039  1.00 98.13           O
ANISOU  245  O   TRP A  36    16934  10247  10103   6427  -1842  -1011       O
ATOM    246  CB  TRP A  36      40.037 -19.643  -6.537  1.00103.19           C
ANISOU  246  CB  TRP A  36    16423  12382  10401   6537  -1907  -1796       C
ATOM    247  CG  TRP A  36      41.359 -19.014  -6.816  1.00104.82           C
ANISOU  247  CG  TRP A  36    16087  13325  10413   6518  -1914  -2104       C
ATOM    248  CD1 TRP A  36      42.446 -18.994  -5.994  1.00115.64           C
ANISOU  248  CD1 TRP A  36    17304  14932  11702   6785  -2122  -2290       C
ATOM    249  CD2 TRP A  36      41.743 -18.320  -8.005  1.00111.71           C
ANISOU  249  CD2 TRP A  36    16477  14843  11127   6194  -1696  -2270       C
ATOM    250  NE1 TRP A  36      43.485 -18.330  -6.599  1.00115.06           N
ANISOU  250  NE1 TRP A  36    16648  15617  11455   6617  -2035  -2597       N
ATOM    251  CE2 TRP A  36      43.077 -17.904  -7.834  1.00114.64           C
ANISOU  251  CE2 TRP A  36    16406  15806  11348   6242  -1756  -2571       C
ATOM    252  CE3 TRP A  36      41.090 -18.012  -9.202  1.00109.83           C
ANISOU  252  CE3 TRP A  36    16127  14775  10827   5863  -1458  -2184       C
ATOM    253  CZ2 TRP A  36      43.770 -17.193  -8.812  1.00115.61           C
ANISOU  253  CZ2 TRP A  36    16000  16646  11278   5929  -1547  -2780       C
ATOM    254  CZ3 TRP A  36      41.778 -17.306 -10.168  1.00106.50           C
ANISOU  254  CZ3 TRP A  36    15215  15064  10185   5592  -1270  -2353       C
ATOM    255  CH2 TRP A  36      43.104 -16.904  -9.968  1.00107.52           C
ANISOU  255  CH2 TRP A  36    14930  15738  10185   5606  -1296  -2645       C
ATOM    256  N   VAL A  37      36.721 -18.976  -6.609  1.00 94.46           N
ANISOU  256  N   VAL A  37    16040  10313   9538   5760  -1439   -861       N
ATOM    257  CA  VAL A  37      35.393 -19.577  -6.684  1.00 96.47           C
ANISOU  257  CA  VAL A  37    16614  10075   9966   5672  -1380   -676       C
ATOM    258  C   VAL A  37      35.118 -19.955  -8.133  1.00 98.35           C
ANISOU  258  C   VAL A  37    16567  10625  10177   5589  -1338   -926       C
ATOM    259  O   VAL A  37      35.167 -19.095  -9.021  1.00 98.42           O
ANISOU  259  O   VAL A  37    16233  11142  10018   5338  -1186   -891       O
ATOM    260  CB  VAL A  37      34.303 -18.630  -6.157  1.00101.80           C
ANISOU  260  CB  VAL A  37    17495  10502  10680   5322  -1151   -195       C
ATOM    261  CG1 VAL A  37      32.923 -19.241  -6.359  1.00 98.15           C
ANISOU  261  CG1 VAL A  37    17257   9648  10387   5195  -1076    -53       C
ATOM    262  CG2 VAL A  37      34.548 -18.311  -4.686  1.00 96.75           C
ANISOU  262  CG2 VAL A  37    17157   9568  10034   5397  -1186      5       C
ATOM    263  N   ARG A  38      34.820 -21.228  -8.372  1.00 96.67           N
ANISOU  263  N   ARG A  38    16514  10102  10113   5785  -1462  -1174       N
ATOM    264  CA  ARG A  38      34.536 -21.707  -9.715  1.00102.94           C
ANISOU  264  CA  ARG A  38    17053  11189  10871   5708  -1439  -1489       C
ATOM    265  C   ARG A  38      33.036 -21.902  -9.907  1.00106.69           C
ANISOU  265  C   ARG A  38    17717  11349  11472   5411  -1325  -1279       C
ATOM    266  O   ARG A  38      32.265 -21.970  -8.944  1.00 95.82           O
ANISOU  266  O   ARG A  38    16716   9430  10263   5332  -1280   -956       O
ATOM    267  CB  ARG A  38      35.281 -23.015 -10.002  1.00102.49           C
ANISOU  267  CB  ARG A  38    16992  11046  10905   6118  -1644  -2022       C
ATOM    268  CG  ARG A  38      34.659 -24.242  -9.377  1.00104.37           C
ANISOU  268  CG  ARG A  38    17731  10486  11437   6280  -1742  -2040       C
ATOM    269  CD  ARG A  38      35.520 -25.469  -9.616  1.00109.21           C
ANISOU  269  CD  ARG A  38    18364  10965  12166   6756  -1943  -2564       C
ATOM    270  NE  ARG A  38      34.978 -26.643  -8.940  1.00111.71           N
ANISOU  270  NE  ARG A  38    19238  10418  12787   6917  -2022  -2532       N
ATOM    271  CZ  ARG A  38      35.539 -27.846  -8.967  1.00116.60           C
ANISOU  271  CZ  ARG A  38    20035  10675  13592   7364  -2191  -2919       C
ATOM    272  NH1 ARG A  38      36.663 -28.040  -9.641  1.00125.18           N
ANISOU  272  NH1 ARG A  38    20734  12244  14585   7721  -2307  -3408       N
ATOM    273  NH2 ARG A  38      34.972 -28.857  -8.322  1.00122.74           N
ANISOU  273  NH2 ARG A  38    21221  10770  14645   7227  -2179  -2727       N
ATOM    274  N   GLN A  39      32.630 -21.986 -11.178  1.00 98.19           N
ANISOU  274  N   GLN A  39    16343  10683  10282   5237  -1275  -1486       N
ATOM    275  CA  GLN A  39      31.219 -22.142 -11.522  1.00 97.81           C
```

[2065]

```
ANISOU  275  CA  GLN A  39    16358  10490  10314   4938  -1185  -1350       C
ATOM    276  C   GLN A  39      31.115 -22.808 -12.887  1.00106.13           C
ANISOU  276  C   GLN A  39    17121  11948  11256   4889  -1235  -1825       C
ATOM    277  O   GLN A  39      31.489 -22.213 -13.904  1.00101.32           O
ANISOU  277  O   GLN A  39    16110  12039  10346   4817  -1194  -1915       O
ATOM    278  CB  GLN A  39      30.500 -20.798 -11.520  1.00 94.63           C
ANISOU  278  CB  GLN A  39    15837  10327   9792   4646  -1004   -839       C
ATOM    279  CG  GLN A  39      29.007 -20.910 -11.759  1.00 94.54           C
ANISOU  279  CG  GLN A  39    15847  10204   9869   4372   -924   -677       C
ATOM    280  CD  GLN A  39      28.347 -19.559 -11.917  1.00 95.21           C
ANISOU  280  CD  GLN A  39    15760  10593   9824   4167   -762   -194       C
ATOM    281  OE1 GLN A  39      28.911 -18.536 -11.535  1.00 99.80           O
ANISOU  281  OE1 GLN A  39    16338  11258  10324   4201   -675     83       O
ATOM    282  NE2 GLN A  39      27.150 -19.546 -12.494  1.00103.83           N
ANISOU  282  NE2 GLN A  39    16698  11852  10902   3961   -721   -107       N
ATOM    283  N   ALA A  40      30.613 -24.040 -12.905  1.00111.27           N
ANISOU  283  N   ALA A  40    17990  12155  12133   4906  -1307  -2138       N
ATOM    284  CA  ALA A  40      30.322 -24.715 -14.153  1.00107.07           C
ANISOU  284  CA  ALA A  40    17209  11961  11511   4799  -1342  -2629       C
ATOM    285  C   ALA A  40      29.149 -24.027 -14.847  1.00109.47           C
ANISOU  285  C   ALA A  40    17250  12711  11633   4407  -1241  -2386       C
ATOM    286  O   ALA A  40      28.359 -23.330 -14.205  1.00111.06           O
ANISOU  286  O   ALA A  40    17561  12732  11904   4234  -1142  -1874       O
ATOM    287  CB  ALA A  40      30.009 -26.187 -13.896  1.00110.74           C
ANISOU  287  CB  ALA A  40    18030  11730  12315   4868  -1419  -3015       C
ATOM    288  N   PRO A  41      29.027 -24.189 -16.164  1.00109.78           N
ANISOU  288  N   PRO A  41    16919  13379  11414   4289  -1270  -2751       N
ATOM    289  CA  PRO A  41      27.928 -23.534 -16.887  1.00113.33           C
ANISOU  289  CA  PRO A  41    17079  14343  11638   3965  -1214  -2512       C
ATOM    290  C   PRO A  41      26.566 -23.950 -16.347  1.00115.63           C
ANISOU  290  C   PRO A  41    17570  14147  12219   3712  -1185  -2379       C
ATOM    291  O   PRO A  41      26.289 -25.136 -16.149  1.00114.40           O
ANISOU  291  O   PRO A  41    17642  13486  12337   3659  -1228  -2769       O
ATOM    292  CB  PRO A  41      28.132 -24.001 -18.332  1.00112.56           C
ANISOU  292  CB  PRO A  41    16607  14940  11221   3918  -1288  -3079       C
ATOM    293  CG  PRO A  41      29.590 -24.285 -18.421  1.00113.65           C
ANISOU  293  CG  PRO A  41    16728  15151  11304   4240  -1321  -3432       C
ATOM    294  CD  PRO A  41      29.981 -24.835 -17.084  1.00112.37           C
ANISOU  294  CD  PRO A  41    17027  14091  11577   4480  -1352  -3381       C
ATOM    295  N   GLY A  42      25.714 -22.955 -16.107  1.00117.09           N
ANISOU  295  N   GLY A  42    17666  14473  12350   3551  -1094  -1828       N
ATOM    296  CA  GLY A  42      24.374 -23.211 -15.621  1.00121.65           C
ANISOU  296  CA  GLY A  42    18344  14709  13168   3292  -1038  -1680       C
ATOM    297  C   GLY A  42      24.294 -23.766 -14.217  1.00119.07           C
ANISOU  297  C   GLY A  42    18522  13468  13250   3318   -967  -1561       C
ATOM    298  O   GLY A  42      23.259 -24.322 -13.843  1.00117.20           O
ANISOU  298  O   GLY A  42    18404  12879  13247   3061   -907  -1583       O
ATOM    299  N   CYS A  43      25.354 -23.636 -13.428  1.00118.34           N
ANISOU  299  N   CYS A  43    18718  13019  13228   3606   -969  -1436       N
ATOM    300  CA  CYS A  43      25.383 -24.152 -12.066  1.00127.00           C
ANISOU  300  CA  CYS A  43    20323  13287  14645   3677   -921  -1286       C
ATOM    301  C   CYS A  43      25.582 -23.008 -11.079  1.00120.04           C
ANISOU  301  C   CYS A  43    19566  12313  13731   3779   -818   -724       C
ATOM    302  O   CYS A  43      25.728 -21.842 -11.451  1.00124.37           O
ANISOU  302  O   CYS A  43    19833  13367  14055   3794   -773   -465       O
ATOM    303  CB  CYS A  43      26.486 -25.198 -11.895  1.00129.56           C
ANISOU  303  CB  CYS A  43    20923  13212  15091   3980  -1052  -1691       C
ATOM    304  SG  CYS A  43      26.417 -26.538 -13.084  1.00130.03           S
ANISOU  304  SG  CYS A  43    20860  13342  15203   3902  -1158  -2447       S
ATOM    305  N   GLY A  44      25.589 -23.362  -9.797  1.00115.99           N
ANISOU  305  N   GLY A  44    19506  11126  13437   3842   -769   -539       N
ATOM    306  CA  GLY A  44      25.813 -22.398  -8.744  1.00119.14           C
ANISOU  306  CA  GLY A  44    20071  11391  13807   3935   -674    -80       C
ATOM    307  C   GLY A  44      27.288 -22.187  -8.466  1.00115.21           C
ANISOU  307  C   GLY A  44    19637  10944  13192   4277   -797   -145       C
ATOM    308  O   GLY A  44      28.165 -22.838  -9.036  1.00116.52           O
ANISOU  308  O   GLY A  44    19729  11226  13318   4485   -955   -541       O
ATOM    309  N   LEU A  45      27.556 -21.241  -7.571  1.00100.86           N
```

[2066]

```
ANISOU  309  N   LEU A  45    17931   9073  11318   4332   -716    216       N
ATOM    310  CA  LEU A  45      28.926 -20.963  -7.177  1.00 94.28           C
ANISOU  310  CA  LEU A  45    17131   8323  10368   4616   -829    157       C
ATOM    311  C   LEU A  45      29.471 -22.112  -6.340  1.00 98.37           C
ANISOU  311  C   LEU A  45    18054   8306  11014   4890   -985      8       C
ATOM    312  O   LEU A  45      28.731 -22.812  -5.646  1.00108.20           O
ANISOU  312  O   LEU A  45    19673   9003  12433   4814   -936    131       O
ATOM    313  CB  LEU A  45      28.996 -19.652  -6.401  1.00 88.88           C
ANISOU  313  CB  LEU A  45    16473   7699   9597   4553   -689    545       C
ATOM    314  CG  LEU A  45      28.561 -18.444  -7.229  1.00 91.86           C
ANISOU  314  CG  LEU A  45    16491   8554   9858   4343   -534    737       C
ATOM    315  CD1 LEU A  45      28.408 -17.211  -6.366  1.00 93.59           C
ANISOU  315  CD1 LEU A  45    16816   8676  10068   4260   -354   1117       C
ATOM    316  CD2 LEU A  45      29.564 -18.189  -8.335  1.00 99.72           C
ANISOU  316  CD2 LEU A  45    17119  10119  10649   4416   -619    491       C
ATOM    317  N   GLU A  46      30.783 -22.313  -6.424  1.00 94.12           N
ANISOU  317  N   GLU A  46    17433   7945  10384   5219  -1169   -252       N
ATOM    318  CA  GLU A  46      31.426 -23.440  -5.755  1.00 97.24           C
ANISOU  318  CA  GLU A  46    18181   7878  10889   5583  -1362   -413       C
ATOM    319  C   GLU A  46      32.798 -22.983  -5.282  1.00101.74           C
ANISOU  319  C   GLU A  46    18640   8731  11287   5907  -1515   -464       C
ATOM    320  O   GLU A  46      33.704 -22.791  -6.099  1.00100.12           O
ANISOU  320  O   GLU A  46    18031   9051  10960   6037  -1597   -782       O
ATOM    321  CB  GLU A  46      31.531 -24.640  -6.692  1.00104.33           C
ANISOU  321  CB  GLU A  46    19032   8691  11919   5716  -1473   -879       C
ATOM    322  CG  GLU A  46      32.238 -25.856  -6.114  1.00107.66           C
ANISOU  322  CG  GLU A  46    19763   8659  12485   6090  -1665  -1053       C
ATOM    323  CD  GLU A  46      32.213 -27.038  -7.071  1.00112.12           C
ANISOU  323  CD  GLU A  46    20353   9018  13229   6232  -1742  -1555       C
ATOM    324  OE1 GLU A  46      31.379 -27.030  -7.998  1.00122.01           O
ANISOU  324  OE1 GLU A  46    21419  10433  14505   5896  -1619  -1713       O
ATOM    325  OE2 GLU A  46      33.025 -27.972  -6.899  1.00114.62           O
ANISOU  325  OE2 GLU A  46    20692   9211  13649   6491  -1887  -1760       O
ATOM    326  N   TRP A  47      32.945 -22.809  -3.970  1.00105.99           N
ANISOU  326  N   TRP A  47    19374   9110  11786   5856  -1514   -176       N
ATOM    327  CA  TRP A  47      34.211 -22.359  -3.410  1.00100.82           C
ANISOU  327  CA  TRP A  47    18603   8755  10949   6129  -1674   -237       C
ATOM    328  C   TRP A  47      35.303 -23.386  -3.682  1.00101.60           C
ANISOU  328  C   TRP A  47    18614   8917  11071   6578  -1941   -625       C
ATOM    329  O   TRP A  47      35.089 -24.593  -3.552  1.00104.72           O
ANISOU  329  O   TRP A  47    19197   8957  11637   6606  -1995   -681       O
ATOM    330  CB  TRP A  47      34.059 -22.115  -1.908  1.00105.60           C
ANISOU  330  CB  TRP A  47    19414   9222  11486   5927  -1615     98       C
ATOM    331  CG  TRP A  47      35.328 -21.727  -1.209  1.00107.65           C
ANISOU  331  CG  TRP A  47    19608   9758  11536   6237  -1816     20       C
ATOM    332  CD1 TRP A  47      35.939 -20.506  -1.235  1.00107.85           C
ANISOU  332  CD1 TRP A  47    19463  10132  11385   6316  -1821     -4       C
ATOM    333  CD2 TRP A  47      36.130 -22.560  -0.361  1.00107.73           C
ANISOU  333  CD2 TRP A  47    19738   9713  11482   6541  -2052    -41       C
ATOM    334  NE1 TRP A  47      37.077 -20.530  -0.463  1.00109.97           N
ANISOU  334  NE1 TRP A  47    19709  10597  11478   6658  -2070   -120       N
ATOM    335  CE2 TRP A  47      37.216 -21.779   0.085  1.00111.08           C
ANISOU  335  CE2 TRP A  47    20020  10514  11670   6813  -2223   -134       C
ATOM    336  CE3 TRP A  47      36.037 -23.890   0.062  1.00112.39           C
ANISOU  336  CE3 TRP A  47    20554   9957  12191   6634  -2139    -12       C
ATOM    337  CZ2 TRP A  47      38.201 -22.284   0.933  1.00111.19           C
ANISOU  337  CZ2 TRP A  47    20082  10628  11538   7196  -2504   -212       C
ATOM    338  CZ3 TRP A  47      37.018 -24.390   0.904  1.00115.21           C
ANISOU  338  CZ3 TRP A  47    20992  10368  12414   7011  -2393    -46       C
ATOM    339  CH2 TRP A  47      38.085 -23.589   1.327  1.00115.71           C
ANISOU  339  CH2 TRP A  47    20883  10866  12217   7297  -2585   -152       C
ATOM    340  N   VAL A  48      36.477 -22.899  -4.076  1.00102.12           N
ANISOU  340  N   VAL A  48    18372   9447  10981   6939  -2092   -910       N
ATOM    341  CA  VAL A  48      37.606 -23.752  -4.438  1.00106.36           C
ANISOU  341  CA  VAL A  48    18706  10179  11530   7405  -2338  -1347       C
ATOM    342  C   VAL A  48      38.690 -23.718  -3.366  1.00113.56           C
ANISOU  342  C   VAL A  48    19587  11265  12294   7695  -2561  -1323       C
ATOM    343  O   VAL A  48      38.998 -24.739  -2.749  1.00112.55           O
```

[2067]

```
ANISOU  343  O   VAL A  48    19634  10900  12230   7880  -2719  -1313       O
ATOM    344  CB  VAL A  48      38.177 -23.366  -5.821  1.00109.36           C
ANISOU  344  CB  VAL A  48    18502  11238  11812   7360  -2280  -1764       C
ATOM    345  CG1 VAL A  48      39.258 -24.349  -6.242  1.00111.32           C
ANISOU  345  CG1 VAL A  48    18548  11648  12102   7909  -2519  -2279       C
ATOM    346  CG2 VAL A  48      37.067 -23.294  -6.855  1.00104.31           C
ANISOU  346  CG2 VAL A  48    17814  10579  11238   6941  -2050  -1741       C
ATOM    347  N   SER A  49      39.287 -22.552  -3.136  1.00111.52           N
ANISOU  347  N   SER A  49    19078  11466  11830   7688  -2563  -1317       N
ATOM    348  CA  SER A  49      40.368 -22.453  -2.170  1.00113.61           C
ANISOU  348  CA  SER A  49    19276  11968  11922   8044  -2820  -1369       C
ATOM    349  C   SER A  49      40.453 -21.024  -1.658  1.00110.99           C
ANISOU  349  C   SER A  49    18777  12002  11393   7613  -2667  -1190       C
ATOM    350  O   SER A  49      39.921 -20.094  -2.267  1.00106.96           O
ANISOU  350  O   SER A  49    18100  11653  10888   7105  -2371  -1097       O
ATOM    351  CB  SER A  49      41.704 -22.891  -2.778  1.00124.25           C
ANISOU  351  CB  SER A  49    20123  13860  13226   8493  -3046  -1894       C
ATOM    352  OG  SER A  49      42.715 -22.928  -1.786  1.00135.61           O
ANISOU  352  OG  SER A  49    21496  15530  14498   8906  -3346  -1948       O
ATOM    353  N   ALA A  50      41.129 -20.868  -0.520  1.00122.36           N
ANISOU  353  N   ALA A  50    20278  13562  12652   7837  -2878  -1146       N
ATOM    354  CA  ALA A  50      41.333 -19.567   0.101  1.00119.04           C
ANISOU  354  CA  ALA A  50    19713  13479  12037   7455  -2762  -1052       C
ATOM    355  C   ALA A  50      42.766 -19.477   0.604  1.00112.84           C
ANISOU  355  C   ALA A  50    18548  13295  11032   7778  -3066  -1376       C
ATOM    356  O   ALA A  50      43.407 -20.494   0.875  1.00115.35           O
ANISOU  356  O   ALA A  50    18888  13613  11327   8384  -3406  -1524       O
ATOM    357  CB  ALA A  50      40.351 -19.327   1.253  1.00111.41           C
ANISOU  357  CB  ALA A  50    19314  11986  11031   7268  -2658   -595       C
ATOM    358  N   ILE A  51      43.272 -18.248   0.705  1.00110.37           N
ANISOU  358  N   ILE A  51    17869  13498  10566   7373  -2939  -1502       N
ATOM    359  CA  ILE A  51      44.616 -18.011   1.218  1.00120.13           C
ANISOU  359  CA  ILE A  51    18674  15397  11574   7575  -3205  -1847       C
ATOM    360  C   ILE A  51      44.624 -16.675   1.946  1.00114.21           C
ANISOU  360  C   ILE A  51    17893  14840  10661   7043  -3032  -1782       C
ATOM    361  O   ILE A  51      43.882 -15.752   1.599  1.00115.61           O
ANISOU  361  O   ILE A  51    18162  14824  10941   6479  -2653  -1598       O
ATOM    362  CB  ILE A  51      45.684 -18.045   0.097  1.00117.02           C
ANISOU  362  CB  ILE A  51    17581  15689  11193   7656  -3235  -2344       C
ATOM    363  CG1 ILE A  51      47.084 -18.166   0.700  1.00122.61           C
ANISOU  363  CG1 ILE A  51    17837  17072  11679   8046  -3604  -2730       C
ATOM    364  CG2 ILE A  51      45.591 -16.806 -0.781  1.00114.16           C
ANISOU  364  CG2 ILE A  51    16886  15634  10856   6948  -2823  -2400       C
ATOM    365  CD1 ILE A  51      48.188 -18.244 -0.319  1.00125.86           C
ANISOU  365  CD1 ILE A  51    17511  18223  12087   8156  -3634  -3258       C
ATOM    366  N   SER A  52      45.477 -16.575   2.961  1.00117.10           N
ANISOU  366  N   SER A  52    18126  15596  10770   7244  -3321  -1952       N
ATOM    367  CA  SER A  52      45.532 -15.399   3.814  1.00121.90           C
ANISOU  367  CA  SER A  52    18739  16381  11198   6773  -3197  -1953       C
ATOM    368  C   SER A  52      46.457 -14.341   3.213  1.00122.08           C
ANISOU  368  C   SER A  52    18102  17092  11192   6303  -3033  -2375       C
ATOM    369  O   SER A  52      47.070 -14.535   2.160  1.00122.92           O
ANISOU  369  O   SER A  52    17732  17589  11383   6356  -3018  -2651       O
ATOM    370  CB  SER A  52      45.980 -15.790   5.222  1.00120.99           C
ANISOU  370  CB  SER A  52    18797  16406  10767   7182  -3594  -1948       C
ATOM    371  OG  SER A  52      47.227 -16.462   5.195  1.00126.33           O
ANISOU  371  OG  SER A  52    19008  17686  11306   7731  -4013  -2312       O
ATOM    372  N   GLY A  53      46.554 -13.201   3.899  1.00118.40           N
ANISOU  372  N   GLY A  53    17616  16773  10599   5806  -2882  -2442       N
ATOM    373  CA  GLY A  53      47.360 -12.086   3.440  1.00120.04           C
ANISOU  373  CA  GLY A  53    17270  17548  10793   5246  -2669  -2818       C
ATOM    374  C   GLY A  53      48.832 -12.416   3.319  1.00125.62           C
ANISOU  374  C   GLY A  53    17274  19128  11327   5516  -2994  -3346       C
ATOM    375  O   GLY A  53      49.406 -12.348   2.228  1.00126.55           O
ANISOU  375  O   GLY A  53    16892  19653  11537   5393  -2870  -3599       O
ATOM    376  N   SER A  54      49.454 -12.776   4.443  1.00130.17           N
ANISOU  376  N   SER A  54    17786  20049  11625   5898  -3414  -3519       N
ATOM    377  CA  SER A  54      50.852 -13.188   4.436  1.00135.91           C
```

[2068]

```
ANISOU  377  CA  SER A  54    17817  21656  12168   6270  -3791  -4026       C
ATOM    378  C   SER A  54       51.054 -14.525   3.738  1.00136.93           C
ANISOU  378  C   SER A  54    17841  21778  12407   7013  -4043  -4030       C
ATOM    379  O   SER A  54       52.182 -14.843   3.346  1.00141.66           O
ANISOU  379  O   SER A  54    17771  23115  12939   7298  -4258  -4485       O
ATOM    380  CB  SER A  54       51.377 -13.266   5.871  1.00140.58           C
ANISOU  380  CB  SER A  54    18407  22614  12394   6550  -4216  -4161       C
ATOM    381  OG  SER A  54       50.565 -14.116   6.664  1.00139.28           O
ANISOU  381  OG  SER A  54    18946  21821  12151   7076  -4436  -3687       O
ATOM    382  N   GLY A  55       49.988 -15.308   3.575  1.00137.73           N
ANISOU  382  N   GLY A  55    18572  21073  12687   7320  -4006  -3569       N
ATOM    383  CA  GLY A  55       50.061 -16.605   2.937  1.00138.86           C
ANISOU  383  CA  GLY A  55    18715  21071  12972   8004  -4214  -3572       C
ATOM    384  C   GLY A  55       50.148 -17.780   3.884  1.00142.45           C
ANISOU  384  C   GLY A  55    19519  21309  13297   8838  -4703  -3405       C
ATOM    385  O   GLY A  55       50.163 -18.925   3.416  1.00143.92           O
ANISOU  385  O   GLY A  55    19792  21255  13638   9448  -4877  -3392       O
ATOM    386  N   GLY A  56       50.183 -17.536   5.199  1.00140.21           N
ANISOU  386  N   GLY A  56    19473  21075  12726   8879  -4917  -3266       N
ATOM    387  CA  GLY A  56       50.429 -18.614   6.144  1.00144.42           C
ANISOU  387  CA  GLY A  56    20294  21521  13060   9705  -5420  -3099       C
ATOM    388  C   GLY A  56       49.333 -19.663   6.163  1.00142.10           C
ANISOU  388  C   GLY A  56    20798  20231  12962  10068  -5397  -2567       C
ATOM    389  O   GLY A  56       49.605 -20.854   6.329  1.00146.32           O
ANISOU  389  O   GLY A  56    21501  20589  13505  10855  -5756  -2485       O
ATOM    390  N   SER A  57       48.084 -19.239   5.994  1.00141.21           N
ANISOU  390  N   SER A  57    21180  19450  13023   9503  -4970  -2207       N
ATOM    391  CA  SER A  57       46.929 -20.127   6.067  1.00138.97           C
ANISOU  391  CA  SER A  57    21654  18224  12923   9705  -4889  -1704       C
ATOM    392  C   SER A  57       46.327 -20.294   4.678  1.00136.25           C
ANISOU  392  C   SER A  57    21269  17524  12977   9464  -4549  -1741       C
ATOM    393  O   SER A  57       45.985 -19.304   4.022  1.00134.49           O
ANISOU  393  O   SER A  57    20828  17412  12859   8804  -4167  -1818       O
ATOM    394  CB  SER A  57       45.881 -19.580   7.037  1.00135.88           C
ANISOU  394  CB  SER A  57    21861  17376  12391   9275  -4674  -1261       C
ATOM    395  OG  SER A  57       46.472 -19.182   8.260  1.00139.69           O
ANISOU  395  OG  SER A  57    22296  18329  12450   9360  -4941  -1308       O
ATOM    396  N   THR A  58       46.196 -21.544   4.236  1.00142.47           N
ANISOU  396  N   THR A  58    22282  17876  13974  10005  -4689  -1687       N
ATOM    397  CA  THR A  58       45.564 -21.868   2.963  1.00128.14           C
ANISOU  397  CA  THR A  58    20482  15698  12508   9825  -4404  -1734       C
ATOM    398  C   THR A  58       44.477 -22.902   3.208  1.00127.58           C
ANISOU  398  C   THR A  58    21075  14765  12634   9683  -4230  -1332       C
ATOM    399  O   THR A  58       44.722 -23.919   3.862  1.00132.69           O
ANISOU  399  O   THR A  58    21948  15210  13256   9947  -4391  -1232       O
ATOM    400  CB  THR A  58       46.574 -22.412   1.947  1.00135.05           C
ANISOU  400  CB  THR A  58    20771  17045  13497  10244  -4560  -2255       C
ATOM    401  OG1 THR A  58       46.908 -23.764   2.282  1.00143.86           O
ANISOU  401  OG1 THR A  58    22101  17889  14671  10692  -4772  -2244       O
ATOM    402  CG2 THR A  58       47.841 -21.570   1.938  1.00134.59           C
ANISOU  402  CG2 THR A  58    19939  17991  13208  10156  -4667  -2701       C
ATOM    403  N   TYR A  59       43.286 -22.646   2.678  1.00126.82           N
ANISOU  403  N   TYR A  59    21228  14220  12737   9180  -3865  -1114       N
ATOM    404  CA  TYR A  59       42.138 -23.525   2.852  1.00125.56           C
ANISOU  404  CA  TYR A  59    21567  13360  12781   8850  -3630   -769       C
ATOM    405  C   TYR A  59       41.706 -24.069   1.498  1.00132.80           C
ANISOU  405  C   TYR A  59    22369  14084  14007   8737  -3467   -946       C
ATOM    406  O   TYR A  59       41.470 -23.297   0.562  1.00126.56           O
ANISOU  406  O   TYR A  59    21337  13476  12275   8548  -3306  -1082       O
ATOM    407  CB  TYR A  59       40.982 -22.780   3.521  1.00123.50           C
ANISOU  407  CB  TYR A  59    21661  12792  12470   8307  -3335   -364       C
ATOM    408  CG  TYR A  59       41.390 -22.045   4.776  1.00128.18           C
ANISOU  408  CG  TYR A  59    22351  13633  12720   8397  -3482   -241       C
ATOM    409  CD1 TYR A  59       41.589 -22.730   5.966  1.00123.15           C
ANISOU  409  CD1 TYR A  59    21999  12883  11908   8596  -3646    -55       C
ATOM    410  CD2 TYR A  59       41.576 -20.668   4.771  1.00130.34           C
ANISOU  410  CD2 TYR A  59    22446  14255  12824   8298  -3467   -305       C
ATOM    411  CE1 TYR A  59       41.963 -22.066   7.119  1.00132.47           C
```

[2069]

```
ANISOU  411  CE1 TYR A  59    23265  14344  12726   8691  -3803     34       C
ATOM    412  CE2 TYR A  59       41.950 -19.992   5.922  1.00130.22           C
ANISOU  412  CE2 TYR A  59    22515  14506  12457   8355  -3624   -229       C
ATOM    413  CZ  TYR A  59       42.142 -20.697   7.094  1.00133.03           C
ANISOU  413  CZ  TYR A  59    23145  14788  12612   8571  -3807    -70       C
ATOM    414  OH  TYR A  59       42.513 -20.038   8.248  1.00125.65           O
ANISOU  414  OH  TYR A  59    22298  14177  11265   8647  -3994    -12       O
ATOM    415  N   TYR A  60       41.597 -25.391   1.397  1.00134.64           N
ANISOU  415  N   TYR A  60    22790  13942  14426   8872  -3509   -944       N
ATOM    416  CA  TYR A  60       41.211 -26.059   0.163  1.00133.76           C
ANISOU  416  CA  TYR A  60    22600  13624  14598   8806  -3390  -1151       C
ATOM    417  C   TYR A  60       39.837 -26.702   0.310  1.00135.00           C
ANISOU  417  C   TYR A  60    23198  13119  14977   8363  -3129   -809       C
ATOM    418  O   TYR A  60       39.418 -27.069   1.411  1.00136.83           O
ANISOU  418  O   TYR A  60    23800  13015  15175   8248  -3095   -452       O
ATOM    419  CB  TYR A  60       42.236 -27.125  -0.230  1.00144.90           C
ANISOU  419  CB  TYR A  60    23823  15138  16095   9354  -3647  -1511       C
ATOM    420  CG  TYR A  60       43.606 -26.575  -0.558  1.00145.65           C
ANISOU  420  CG  TYR A  60    23351  15987  16003   9800  -3891  -1949       C
ATOM    421  CD1 TYR A  60       43.818 -25.842  -1.717  1.00139.93           C
ANISOU  421  CD1 TYR A  60    22153  15734  15280   9754  -3797  -2315       C
ATOM    422  CD2 TYR A  60       44.690 -26.802   0.283  1.00148.98           C
ANISOU  422  CD2 TYR A  60    23666  16703  16238  10275  -4207  -2016       C
ATOM    423  CE1 TYR A  60       45.067 -25.340  -2.027  1.00141.99           C
ANISOU  423  CE1 TYR A  60    21808  16764  15380  10130  -3981  -2754       C
ATOM    424  CE2 TYR A  60       45.946 -26.304  -0.019  1.00151.00           C
ANISOU  424  CE2 TYR A  60    23308  17736  16328  10667  -4427  -2463       C
ATOM    425  CZ  TYR A  60       46.127 -25.573  -1.178  1.00151.23           C
ANISOU  425  CZ  TYR A  60    22832  18247  16383  10573  -4300  -2840       C
ATOM    426  OH  TYR A  60       47.370 -25.072  -1.493  1.00152.45           O
ANISOU  426  OH  TYR A  60    22287  19257  16382  10913  -4476  -3321       O
ATOM    427  N   ALA A  61       39.142 -26.843  -0.815  1.00143.19           N
ANISOU  427  N   ALA A  61    28232  14158  12015   7743  -3136    254       N
ATOM    428  CA  ALA A  61       37.849 -27.506  -0.813  1.00146.98           C
ANISOU  428  CA  ALA A  61    29477  13878  12492   7131  -2764    611       C
ATOM    429  C   ALA A  61       38.028 -29.021  -0.787  1.00158.78           C
ANISOU  429  C   ALA A  61    32078  14640  13613   7649  -2953    752       C
ATOM    430  O   ALA A  61       39.128 -29.552  -0.961  1.00160.51           O
ANISOU  430  O   ALA A  61    32401  14962  13624   8490  -3382    550       O
ATOM    431  CB  ALA A  61       37.024 -27.090  -2.029  1.00132.14           C
ANISOU  431  CB  ALA A  61    27005  12048  11154   6389  -2403    560       C
ATOM    432  N   ASP A  62       36.916 -29.723  -0.565  1.00165.97           N
ANISOU  432  N   ASP A  62    33829  14794  14440   7126  -2614   1083       N
ATOM    433  CA  ASP A  62       36.967 -31.178  -0.491  1.00170.88           C
ANISOU  433  CA  ASP A  62    35458  14704  14766   7429  -2682   1185       C
ATOM    434  C   ASP A  62       37.172 -31.802  -1.866  1.00170.57           C
ANISOU  434  C   ASP A  62    35291  14514  15003   7565  -2769    961       C
ATOM    435  O   ASP A  62       37.801 -32.860  -1.980  1.00176.18           O
ANISOU  435  O   ASP A  62    36407  15029  15507   8059  -2992    820       O
ATOM    436  CB  ASP A  62       35.687 -31.707   0.158  1.00173.35           C
ANISOU  436  CB  ASP A  62    36539  14361  14966   6672  -2208   1520       C
ATOM    437  CG  ASP A  62       35.872 -33.070   0.796  1.00184.07           C
ANISOU  437  CG  ASP A  62    38816  15199  15922   6953  -2243   1591       C
ATOM    438  OD1 ASP A  62       36.431 -33.973   0.138  1.00185.96           O
ANISOU  438  OD1 ASP A  62    39261  15250  16147   7376  -2453   1414       O
ATOM    439  OD2 ASP A  62       35.462 -33.237   1.966  1.00191.24           O
ANISOU  439  OD2 ASP A  62    40247  15896  16518   6762  -2060   1823       O
ATOM    440  N   SER A  63       36.663 -31.162  -2.919  1.00166.77           N
ANISOU  440  N   SER A  63    34100  14261  15004   7057  -2559    850       N
ATOM    441  CA  SER A  63       36.790 -31.728  -4.257  1.00157.64           C
ANISOU  441  CA  SER A  63    32776  13004  14115   7152  -2616    616       C
ATOM    442  C   SER A  63       38.226 -31.679  -4.761  1.00157.58           C
ANISOU  442  C   SER A  63    32252  13553  14067   8041  -3114    268       C
ATOM    443  O   SER A  63       38.657 -32.582  -5.488  1.00153.45           O
ANISOU  443  O   SER A  63    31964  12813  13526   8456  -3315     88       O
ATOM    444  CB  SER A  63       35.866 -30.989  -5.223  1.00151.74           C
ANISOU  444  CB  SER A  63    31219  12552  13884   6305  -2219    523       C
ATOM    445  OG  SER A  63       34.538 -30.953  -4.730  1.00144.02           O
```

[2070]

```
ANISOU  445  OG  SER A  63    30620  11164  12937   5477  -1762    785       O
ATOM    446  N   VAL A  64      38.980 -30.649  -4.384  1.00156.26           N
ANISOU  446  N   VAL A  64    31325  14156  13890   8292  -3296    118       N
ATOM    447  CA  VAL A  64      40.319 -30.424  -4.911  1.00156.54           C
ANISOU  447  CA  VAL A  64    30682  14862  13935   9022  -3713   -276       C
ATOM    448  C   VAL A  64      41.364 -30.372  -3.797  1.00166.87           C
ANISOU  448  C   VAL A  64    32145  16461  14797   9794  -4115   -358       C
ATOM    449  O   VAL A  64      42.417 -29.763  -3.964  1.00167.16           O
ANISOU  449  O   VAL A  64    31399  17252  14860  10253  -4398   -708       O
ATOM    450  CB  VAL A  64      40.359 -29.145  -5.766  1.00149.28           C
ANISOU  450  CB  VAL A  64    28488  14735  13496   8571  -3533   -498       C
ATOM    451  CG1 VAL A  64      39.415 -29.278  -6.952  1.00147.05           C
ANISOU  451  CG1 VAL A  64    28038  14233  13601   7933  -3186   -466       C
ATOM    452  CG2 VAL A  64      39.985 -27.939  -4.918  1.00140.36           C
ANISOU  452  CG2 VAL A  64    26932  13952  12448   8082  -3310   -368       C
ATOM    453  N   LYS A  65      41.083 -31.007  -2.661  1.00168.92           N
ANISOU  453  N   LYS A  65    33256  16256  14669   9781  -4055   -122       N
ATOM    454  CA  LYS A  65      42.008 -31.015  -1.534  1.00173.58           C
ANISOU  454  CA  LYS A  65    33926  17192  14835  10372  -4342   -264       C
ATOM    455  C   LYS A  65      43.348 -31.613  -1.940  1.00178.06           C
ANISOU  455  C   LYS A  65    34282  18142  15233  11160  -4754   -723       C
ATOM    456  O   LYS A  65      43.477 -32.834  -2.073  1.00183.58           O
ANISOU  456  O   LYS A  65    35658  18383  15713  11407  -4834   -738       O
ATOM    457  CB  LYS A  65      41.410 -31.796  -0.363  1.00178.97           C
ANISOU  457  CB  LYS A  65    35657  17216  15127  10231  -4169     78       C
ATOM    458  CG  LYS A  65      41.445 -31.061   0.965  1.00179.66           C
ANISOU  458  CG  LYS A  65    35705  17592  14968  10265  -4167    188       C
ATOM    459  CD  LYS A  65      40.803 -31.895   2.061  1.00185.04           C
ANISOU  459  CD  LYS A  65    37434  17605  15268  10097  -3953    536       C
ATOM    460  CE  LYS A  65      40.618 -31.090   3.335  1.00185.65           C
ANISOU  460  CE  LYS A  65    37448  17951  15141  10000  -3884    686       C
ATOM    461  NZ  LYS A  65      41.916 -30.636   3.905  1.00186.84           N
ANISOU  461  NZ  LYS A  65    37086  18840  15064  10791  -4301    309       N
ATOM    462  N   GLY A  66      44.350 -30.762  -2.148  1.00178.34           N
ANISOU  462  N   GLY A  66    33366  19033  15360  11531  -5005  -1120       N
ATOM    463  CA  GLY A  66      45.657 -31.199  -2.570  1.00182.34           C
ANISOU  463  CA  GLY A  66    33544  20021  15716  12222  -5371  -1619       C
ATOM    464  C   GLY A  66      45.850 -31.249  -4.072  1.00179.41           C
ANISOU  464  C   GLY A  66    32609  19861  15695  12165  -5396  -1848       C
ATOM    465  O   GLY A  66      46.964 -31.006  -4.548  1.00180.14           O
ANISOU  465  O   GLY A  66    31976  20671  15799  12583  -5646  -2323       O
ATOM    466  N   ARG A  67      44.794 -31.565  -4.830  1.00172.27           N
ANISOU  466  N   ARG A  67    32009  18374  15071  11643  -5123  -1551       N
ATOM    467  CA  ARG A  67      44.889 -31.508  -6.287  1.00161.41           C
ANISOU  467  CA  ARG A  67    30033  17234  14059  11560  -5112  -1764       C
ATOM    468  C   ARG A  67      45.258 -30.109  -6.759  1.00153.62           C
ANISOU  468  C   ARG A  67    27875  17074  13420  11446  -5083  -1975       C
ATOM    469  O   ARG A  67      45.998 -29.951  -7.736  1.00150.19           O
ANISOU  469  O   ARG A  67    26711  17211  13142  11647  -5204  -2348       O
ATOM    470  CB  ARG A  67      43.572 -31.946  -6.931  1.00153.39           C
ANISOU  470  CB  ARG A  67    29506  15462  13312  10965  -4773  -1423       C
ATOM    471  CG  ARG A  67      43.314 -33.439  -6.934  1.00159.38           C
ANISOU  471  CG  ARG A  67    31253  15475  13830  11057  -4800  -1327       C
ATOM    472  CD  ARG A  67      42.559 -33.834  -8.199  1.00156.97           C
ANISOU  472  CD  ARG A  67    30944  14811  13887  10669  -4593  -1311       C
ATOM    473  NE  ARG A  67      41.441 -32.937  -8.484  1.00150.25           N
ANISOU  473  NE  ARG A  67    29818  13833  13435   9975  -4198  -1073       N
ATOM    474  CZ  ARG A  67      40.165 -33.303  -8.464  1.00149.64           C
ANISOU  474  CZ  ARG A  67    30360  13015  13481   9342  -3828   -771       C
ATOM    475  NH1 ARG A  67      39.835 -34.556  -8.181  1.00155.41           N
ANISOU  475  NH1 ARG A  67    32001  13059  13989   9288  -3787   -650       N
ATOM    476  NH2 ARG A  67      39.217 -32.419  -8.733  1.00143.66           N
ANISOU  476  NH2 ARG A  67    29100  12414  13070   8531  -3414   -646       N
ATOM    477  N   PHE A  68      44.756 -29.083  -6.079  1.00150.60           N
ANISOU  477  N   PHE A  68    27290  16781  13149  11104  -4909  -1744       N
ATOM    478  CA  PHE A  68      45.066 -27.699  -6.402  1.00146.49           C
ANISOU  478  CA  PHE A  68    25605  17076  12977  10757  -4762  -1955       C
ATOM    479  C   PHE A  68      45.992 -27.095  -5.352  1.00151.11           C
```

[2071]

```
ANISOU  479  C   PHE A  68    25864  18238  13314  11206  -5031  -2192       C
ATOM    480  O   PHE A  68      46.039 -27.544  -4.203  1.00155.10           O
ANISOU  480  O   PHE A  68    27061  18458  13411  11530  -5194  -2071       O
ATOM    481  CB  PHE A  68      43.793 -26.854  -6.510  1.00140.97           C
ANISOU  481  CB  PHE A  68    24680  16210  12673   9715  -4221  -1622       C
ATOM    482  CG  PHE A  68      42.944 -27.186  -7.704  1.00147.10           C
ANISOU  482  CG  PHE A  68    25481  16651  13758   9222  -3931  -1494       C
ATOM    483  CD1 PHE A  68      43.406 -28.055  -8.685  1.00146.99           C
ANISOU  483  CD1 PHE A  68    25541  16592  13716   9668  -4141  -1709       C
ATOM    484  CD2 PHE A  68      41.688 -26.624  -7.853  1.00138.34           C
ANISOU  484  CD2 PHE A  68    24290  15318  12956   8341  -3464  -1201       C
ATOM    485  CE1 PHE A  68      42.624 -28.378  -9.772  1.00134.58           C
ANISOU  485  CE1 PHE A  68    23977  14745  12411   9237  -3886  -1629       C
ATOM    486  CE2 PHE A  68      40.910 -26.926  -8.950  1.00136.15           C
ANISOU  486  CE2 PHE A  68    23998  14795  12938   7924  -3213  -1131       C
ATOM    487  CZ  PHE A  68      41.378 -27.800  -9.912  1.00136.53           C
ANISOU  487  CZ  PHE A  68    24121  14799  12953   8364  -3421  -1347       C
ATOM    488  N   THR A  69      46.729 -26.065  -5.765  1.00145.07           N
ANISOU  488  N   THR A  69    24002  18313  12804  11132  -5017  -2563       N
ATOM    489  CA  THR A  69      47.663 -25.356  -4.896  1.00143.11           C
ANISOU  489  CA  THR A  69    23244  18736  12394  11487  -5240  -2896       C
ATOM    490  C   THR A  69      47.409 -23.863  -5.037  1.00137.48           C
ANISOU  490  C   THR A  69    21587  18495  12153  10687  -4841  -2929       C
ATOM    491  O   THR A  69      47.686 -23.275  -6.087  1.00134.65           O
ANISOU  491  O   THR A  69    20424  18577  12161  10402  -4668  -3129       O
ATOM    492  CB  THR A  69      49.115 -25.706  -5.235  1.00147.82           C
ANISOU  492  CB  THR A  69    23402  19966  12799  12136  -5574  -3488       C
ATOM    493  OG1 THR A  69      49.485 -26.911  -4.553  1.00154.37           O
ANISOU  493  OG1 THR A  69    25098  20431  13124  12672  -5819  -3536       O
ATOM    494  CG2 THR A  69      50.066 -24.585  -4.821  1.00148.06           C
ANISOU  494  CG2 THR A  69    22459  20903  12896  12204  -5642  -3950       C
ATOM    495  N   ILE A  70      46.870 -23.259  -3.996  1.00144.56           N
ANISOU  495  N   ILE A  70    22610  19282  13033  10333  -4685  -2727       N
ATOM    496  CA  ILE A  70      46.679 -21.815  -3.956  1.00134.11           C
ANISOU  496  CA  ILE A  70    20442  18383  12131   9641  -4341  -2787       C
ATOM    497  C   ILE A  70      47.965 -21.181  -3.448  1.00134.62           C
ANISOU  497  C   ILE A  70    19780  19266  12103  10081  -4607  -3336       C
ATOM    498  O   ILE A  70      48.685 -21.755  -2.624  1.00139.96           O
ANISOU  498  O   ILE A  70    20782  20086  12311  10847  -5032  -3554       O
ATOM    499  CB  ILE A  70      45.460 -21.436  -3.087  1.00132.37           C
ANISOU  499  CB  ILE A  70    20658  17687  11951   9036  -4043  -2354       C
ATOM    500  CG1 ILE A  70      45.136 -19.946  -3.222  1.00126.10           C
ANISOU  500  CG1 ILE A  70    19014  17246  11654   8275  -3653  -2392       C
ATOM    501  CG2 ILE A  70      45.701 -21.816  -1.629  1.00133.54           C
ANISOU  501  CG2 ILE A  70    21391  17761  11589   9554  -4345  -2352       C
ATOM    502  CD1 ILE A  70      43.804 -19.559  -2.630  1.00120.57           C
ANISOU  502  CD1 ILE A  70    18674  16077  11058   7605  -3313  -1971       C
ATOM    503  N   SER A  71      48.274 -19.996  -3.967  1.00131.62           N
ANISOU  503  N   SER A  71    18408  19437  12165   9608  -4351  -3582       N
ATOM    504  CA  SER A  71      49.531 -19.324  -3.670  1.00134.53           C
ANISOU  504  CA  SER A  71    17949  20642  12526   9922  -4541  -4180       C
ATOM    505  C   SER A  71      49.430 -17.881  -4.138  1.00130.29           C
ANISOU  505  C   SER A  71    16490  20455  12560   9118  -4092  -4268       C
ATOM    506  O   SER A  71      48.568 -17.537  -4.952  1.00129.36           O
ANISOU  506  O   SER A  71    16334  20007  12810   8466  -3694  -3908       O
ATOM    507  CB  SER A  71      50.715 -20.027  -4.340  1.00138.84           C
ANISOU  507  CB  SER A  71    18253  21641  12858  10657  -4906  -4630       C
ATOM    508  OG  SER A  71      50.493 -20.208  -5.730  1.00140.76           O
ANISOU  508  OG  SER A  71    18330  21774  13379  10378  -4693  -4504       O
ATOM    509  N   ARG A  72      50.325 -17.043  -3.619  1.00132.50           N
ANISOU  509  N   ARG A  72    16035  21407  12901   9185  -4157  -4770       N
ATOM    510  CA  ARG A  72      50.325 -15.632  -3.975  1.00129.41           C
ANISOU  510  CA  ARG A  72    14784  21334  13053   8437  -3727  -4894       C
ATOM    511  C   ARG A  72      51.753 -15.108  -3.988  1.00133.55           C
ANISOU  511  C   ARG A  72    14390  22743  13612   8705  -3869  -5620       C
ATOM    512  O   ARG A  72      52.679 -15.746  -3.480  1.00138.77           O
ANISOU  512  O   ARG A  72    15074  23806  13846   9487  -4330  -6047       O
ATOM    513  CB  ARG A  72      49.446 -14.812  -3.021  1.00126.68           C
```

[2072]

```
ANISOU  513  CB  ARG A  72    14560  20700  12874   7901  -3490  -4647       C
ATOM    514  CG  ARG A  72      49.749 -15.020  -1.547  1.00130.57           C
ANISOU  514  CG  ARG A  72    15329  21337  12944   8401  -3847  -4860       C
ATOM    515  CD  ARG A  72      48.625 -14.470  -0.681  1.00127.51           C
ANISOU  515  CD  ARG A  72    15271  20520  12656   7882  -3612  -4490       C
ATOM    516  NE  ARG A  72      48.442 -13.035  -0.870  1.00124.35           N
ANISOU  516  NE  ARG A  72    14123  20301  12824   7123  -3193  -4590       N
ATOM    517  CZ  ARG A  72      47.387 -12.353  -0.436  1.00120.79           C
ANISOU  517  CZ  ARG A  72    13809  19482  12603   6527  -2893  -4269       C
ATOM    518  NH1 ARG A  72      46.412 -12.975   0.213  1.00119.84           N
ANISOU  518  NH1 ARG A  72    14514  18831  12188   6561  -2945  -3835       N
ATOM    519  NH2 ARG A  72      47.306 -11.049  -0.655  1.00119.68           N
ANISOU  519  NH2 ARG A  72    12992  19497  12983   5893  -2529  -4391       N
ATOM    520  N   ASP A  73      51.916 -13.930  -4.592  1.00131.55           N
ANISOU  520  N   ASP A  73    13327  22789  13866   8044  -3453  -5765       N
ATOM    521  CA  ASP A  73      53.212 -13.261  -4.739  1.00135.33           C
ANISOU  521  CA  ASP A  73    12830  24110  14480   8097  -3459  -6465       C
ATOM    522  C   ASP A  73      52.963 -11.785  -4.434  1.00137.91           C
ANISOU  522  C   ASP A  73    12598  24495  15308   7299  -3019  -6515       C
ATOM    523  O   ASP A  73      52.732 -10.985  -5.346  1.00136.07           O
ANISOU  523  O   ASP A  73    11964  24200  15537   6632  -2553  -6356       O
ATOM    524  CB  ASP A  73      53.788 -13.472  -6.138  1.00140.96           C
ANISOU  524  CB  ASP A  73    13125  25129  15305   8109  -3356  -6598       C
ATOM    525  CG  ASP A  73      55.243 -13.039  -6.255  1.00149.25           C
ANISOU  525  CG  ASP A  73    13269  27074  16364   8241  -3424  -7369       C
ATOM    526  OD1 ASP A  73      55.600 -11.964  -5.727  1.00154.73           O
ANISOU  526  OD1 ASP A  73    13401  28078  17313   7804  -3221  -7695       O
ATOM    527  OD2 ASP A  73      56.034 -13.779  -6.877  1.00144.20           O
ANISOU  527  OD2 ASP A  73    12673  26688  15428   8564  -3629  -7582       O
ATOM    528  N   ASN A  74      53.008 -11.434  -3.144  1.00139.92           N
ANISOU  528  N   ASN A  74    12852  24858  15452   7396  -3172  -6737       N
ATOM    529  CA  ASN A  74      52.677 -10.076  -2.725  1.00133.14           C
ANISOU  529  CA  ASN A  74    11552  23978  15057   6668  -2785  -6781       C
ATOM    530  C   ASN A  74      53.634  -9.038  -3.295  1.00136.54           C
ANISOU  530  C   ASN A  74    10954  25012  15911   6256  -2484  -7322       C
ATOM    531  O   ASN A  74      53.261  -7.865  -3.406  1.00133.24           O
ANISOU  531  O   ASN A  74    10186  24440  15997   5507  -2029  -7238       O
ATOM    532  CB  ASN A  74      52.660  -9.982  -1.199  1.00143.93           C
ANISOU  532  CB  ASN A  74    13078  25444  16165   6946  -3061  -7002       C
ATOM    533  CG  ASN A  74      51.564 -10.826  -0.573  1.00138.27           C
ANISOU  533  CG  ASN A  74    13395  24059  15081   7182  -3244  -6403       C
ATOM    534  OD1 ASN A  74      50.596 -11.204  -1.237  1.00128.79           O
ANISOU  534  OD1 ASN A  74    12739  22238  13957   6918  -3053  -5790       O
ATOM    535  ND2 ASN A  74      51.709 -11.121   0.714  1.00136.15           N
ANISOU  535  ND2 ASN A  74    13396  23938  14397   7673  -3601  -6596       N
ATOM    536  N   SER A  75      54.854  -9.439  -3.657  1.00147.85           N
ANISOU  536  N   SER A  75    11904  27123  17149   6722  -2716  -7888       N
ATOM    537  CA  SER A  75      55.765  -8.511  -4.319  1.00150.35           C
ANISOU  537  CA  SER A  75    11421  27888  17817   6155  -2367  -8304       C
ATOM    538  C   SER A  75      55.256  -8.133  -5.705  1.00146.91           C
ANISOU  538  C   SER A  75    10853  27164  17803   5589  -1866  -7857       C
ATOM    539  O   SER A  75      55.347  -6.968  -6.108  1.00148.85           O
ANISOU  539  O   SER A  75    10627  27405  18525   4824  -1373  -7887       O
ATOM    540  CB  SER A  75      57.164  -9.121  -4.407  1.00156.51           C
ANISOU  540  CB  SER A  75    12054  29259  18154   6591  -2719  -8868       C
ATOM    541  OG  SER A  75      57.143 -10.339  -5.129  1.00156.10           O
ANISOU  541  OG  SER A  75    12452  29108  17753   7136  -2978  -8629       O
ATOM    542  N   LYS A  76      53.708  -9.099  -6.445  1.00148.82           N
ANISOU  542  N   LYS A  76    11618  27082  17843   5908  -1976  -7394       N
ATOM    543  CA  LYS A  76      54.181  -8.853  -7.778  1.00145.96           C
ANISOU  543  CA  LYS A  76    11274  26403  17782   5399  -1537  -6905       C
ATOM    544  C   LYS A  76      52.703  -8.486  -7.767  1.00140.68           C
ANISOU  544  C   LYS A  76    11193  24911  17350   4892  -1244  -6165       C
ATOM    545  O   LYS A  76      52.140  -8.225  -8.836  1.00144.94           O
ANISOU  545  O   LYS A  76    11783  25158  18129   4474   -874  -5726       O
ATOM    546  CB  LYS A  76      54.394 -10.082  -8.670  1.00145.80           C
ANISOU  546  CB  LYS A  76    11529  26459  17409   5954  -1800  -6811       C
ATOM    547  CG  LYS A  76      55.848 -10.501  -8.832  1.00151.66           C
```

[2073]

```
ANISOU  547  CG  LYS A  76    11913  27870  17841   6318  -2083  -7429       C
ATOM    548  CD  LYS A  76      55.978 -11.698  -9.769  1.00151.97           C
ANISOU  548  CD  LYS A  76    12300  27897  17544   6798  -2320  -7290       C
ATOM    549  N   ASN A  77      52.070  -8.455  -6.593  1.00133.31           N
ANISOU  549  N   ASN A  77    10682  23641  16327   4938  -1403  -6042       N
ATOM    550  CA  ASN A  77      50.638  -8.184  -6.463  1.00128.19           C
ANISOU  550  CA  ASN A  77    10605  22253  15848   4512  -1173  -5392       C
ATOM    551  C   ASN A  77      49.822  -9.138  -7.332  1.00123.17           C
ANISOU  551  C   ASN A  77    10607  21158  15034   4652  -1200  -4829       C
ATOM    552  O   ASN A  77      48.946  -8.733  -8.101  1.00119.33           O
ANISOU  552  O   ASN A  77    10245  20276  14818   4171   -831  -4357       O
ATOM    553  CB  ASN A  77      50.317  -6.726  -6.795  1.00124.53           C
ANISOU  553  CB  ASN A  77     9698  21657  15961   3698   -615  -5284       C
ATOM    554  CG  ASN A  77      50.578  -5.789  -5.632  1.00133.24           C
ANISOU  554  CG  ASN A  77    10438  22927  17260   3476   -584  -5685       C
ATOM    555  OD1 ASN A  77      51.265  -6.144  -4.670  1.00137.33           O
ANISOU  555  OD1 ASN A  77    10847  23841  17490   3939   -968  -6166       O
ATOM    556  ND2 ASN A  77      50.027  -4.583  -5.711  1.00132.03           N
ANISOU  556  ND2 ASN A  77    10100  22476  17588   2793   -134  -5504       N
ATOM    557  N   THR A  78      50.115 -10.430  -7.200  1.00118.51           N
ANISOU  557  N   THR A  78    10432  20624  13971   5346  -1652  -4904       N
ATOM    558  CA  THR A  78      49.513 -11.442  -8.057  1.00127.14           C
ANISOU  558  CA  THR A  78    12083  21344  14880   5539  -1714  -4482       C
ATOM    559  C   THR A  78      49.130 -12.659  -7.230  1.00117.02           C
ANISOU  559  C   THR A  78    11628  19710  13124   6106  -2150  -4341       C
ATOM    560  O   THR A  78      49.979 -13.243  -6.551  1.00121.28           O
ANISOU  560  O   THR A  78    12197  20577  13306   6733  -2569  -4738       O
ATOM    561  CB  THR A  78      50.468 -11.847  -9.186  1.00126.45           C
ANISOU  561  CB  THR A  78    11576  21740  14729   5816  -1765  -4759       C
ATOM    562  OG1 THR A  78      50.672 -10.733 -10.065  1.00118.06           O
ANISOU  562  OG1 THR A  78     9842  20915  14101   5217  -1283  -4778       O
ATOM    563  CG2 THR A  78      49.895 -13.014  -9.971  1.00118.29           C
ANISOU  563  CG2 THR A  78    11146  20335  13463   6105  -1897  -4394       C
ATOM    564  N   LEU A  79      47.857 -13.037  -7.303  1.00114.99           N
ANISOU  564  N   LEU A  79    12045  18796  12851   5889  -2040  -3787       N
ATOM    565  CA  LEU A  79      47.377 -14.306  -6.776  1.00116.09           C
ANISOU  565  CA  LEU A  79    13059  18494  12555   6352  -2375  -3567       C
ATOM    566  C   LEU A  79      47.398 -15.352  -7.886  1.00120.07           C
ANISOU  566  C   LEU A  79    13831  18876  12913   6654  -2478  -3454       C
ATOM    567  O   LEU A  79      46.966 -15.078  -9.010  1.00118.67           O
ANISOU  567  O   LEU A  79    13454  18627  13008   6263  -2165  -3238       O
ATOM    568  CB  LEU A  79      45.961 -14.151  -6.219  1.00115.10           C
ANISOU  568  CB  LEU A  79    13497  17742  12494   5900  -2170  -3078       C
ATOM    569  CG  LEU A  79      45.234 -15.413  -5.751  1.00117.18           C
ANISOU  569  CG  LEU A  79    14732  17435  12355   6205  -2396  -2760       C
ATOM    570  CD1 LEU A  79      45.795 -15.905  -4.425  1.00115.07           C
ANISOU  570  CD1 LEU A  79    14805  17264  11654   6781  -2800  -2981       C
ATOM    571  CD2 LEU A  79      43.735 -15.164  -5.650  1.00108.77           C
ANISOU  571  CD2 LEU A  79    14069  15806  11454   5596  -2069  -2276       C
ATOM    572  N   TYR A  80      47.906 -16.542  -7.572  1.00122.33           N
ANISOU  572  N   TYR A  80    14577  19147  12758   7377  -2923  -3610       N
ATOM    573  CA  TYR A  80      47.986 -17.653  -8.507  1.00118.94           C
ANISOU  573  CA  TYR A  80    14462  18580  12149   7757  -3087  -3561       C
ATOM    574  C   TYR A  80      46.995 -18.747  -8.109  1.00119.39           C
ANISOU  574  C   TYR A  80    15554  17875  11933   7894  -3210  -3150       C
ATOM    575  O   TYR A  80      46.173 -18.575  -7.203  1.00119.40           O
ANISOU  575  O   TYR A  80    15988  17473  11905   7617  -3113  -2868       O
ATOM    576  CB  TYR A  80      49.413 -18.208  -8.563  1.00127.64           C
ANISOU  576  CB  TYR A  80    15276  20262  12959   8527  -3510  -3510       C
ATOM    577  CG  TYR A  80      50.485 -17.212  -8.943  1.00129.10           C
ANISOU  577  CG  TYR A  80    14419  21252  13382   8399  -3388  -4593       C
ATOM    578  CD1 TYR A  80      50.807 -16.977 -10.273  1.00133.38           C
ANISOU  578  CD1 TYR A  80    14405  22124  14151   8201  -3167  -4679       C
ATOM    579  CD2 TYR A  80      51.198 -16.531  -7.970  1.00135.20           C
ANISOU  579  CD2 TYR A  80    14760  22477  14134   8480  -3488  -4989       C
ATOM    580  CE1 TYR A  80      51.798 -16.074 -10.620  1.00137.25           C
ANISOU  580  CE1 TYR A  80    13957  23341  14851   8037  -3012  -5122       C
ATOM    581  CE2 TYR A  80      52.187 -15.630  -8.306  1.00137.95           C
```

[2074]

```
ANISOU  581  CE2 TYR A  80    14145  23555  14713   8314  -3346  -5473       C
ATOM    582  CZ  TYR A  80      52.485 -15.403  -9.629  1.00131.91           C
ANISOU  582  CZ  TYR A  80    12864  23077  14180   8073  -3094  -5528       C
ATOM    583  OH  TYR A  80      53.474 -14.502  -9.951  1.00131.38           O
ANISOU  583  OH  TYR A  80    11852  23728  14338   7857  -2909  -6011       O
ATOM    584  N   LEU A  81      47.085 -19.885  -8.800  1.00127.43           N
ANISOU  584  N   LEU A  81    16966  18700  12751   8312  -3411  -3139       N
ATOM    585  CA  LEU A  81      46.315 -21.084  -8.487  1.00127.11           C
ANISOU  585  CA  LEU A  81    17942  17928  12425   8518  -3555  -2820       C
ATOM    586  C   LEU A  81      46.818 -22.250  -9.331  1.00133.55           C
ANISOU  586  C   LEU A  81    18992  18712  13039   9102  -3837  -2985       C
ATOM    587  O   LEU A  81      46.414 -22.406 -10.488  1.00124.16           O
ANISOU  587  O   LEU A  81    17680  17442  12053   8852  -3644  -2885       O
ATOM    588  CB  LEU A  81      44.816 -20.864  -8.720  1.00122.68           C
ANISOU  588  CB  LEU A  81    17695  16803  12117   7766  -3136  -2331       C
ATOM    589  CG  LEU A  81      43.912 -22.090  -8.547  1.00119.59           C
ANISOU  589  CG  LEU A  81    18321  15631  11488   7837  -3194  -2009       C
ATOM    590  CD1 LEU A  81      44.175 -22.774  -7.218  1.00122.66           C
ANISOU  590  CD1 LEU A  81    19432  15744  11429   8350  -3526  -1999       C
ATOM    591  CD2 LEU A  81      42.447 -21.712  -8.663  1.00115.57           C
ANISOU  591  CD2 LEU A  81    17995  14684  11232   7047  -2760  -1605       C
ATOM    592  N   GLN A  82      47.708 -23.064  -8.768  1.00132.14           N
ANISOU  592  N   GLN A  82    19139  18622  12447   9918  -4308  -3262       N
ATOM    593  CA  GLN A  82      48.237 -24.217  -9.484  1.00138.94           C
ANISOU  593  CA  GLN A  82    20266  19438  13087  10561  -4626  -3460       C
ATOM    594  C   GLN A  82      47.216 -25.347  -9.476  1.00138.20           C
ANISOU  594  C   GLN A  82    21225  18429  12855  10543  -4617  -3057       C
ATOM    595  O   GLN A  82      46.636 -25.664  -8.433  1.00144.21           O
ANISOU  595  O   GLN A  82    22740  18643  13409  10521  -4637  -2766       O
ATOM    596  CB  GLN A  82      49.551 -24.686  -8.857  1.00145.33           C
ANISOU  596  CB  GLN A  82    21071  20670  13479  11483  -5148  -3923       C
ATOM    597  CG  GLN A  82      50.157 -25.913  -9.531  1.00146.35           C
ANISOU  597  CG  GLN A  82    21520  20742  13344  11893  -5370  -4165       C
ATOM    598  CD  GLN A  82      50.626 -25.632 -10.946  1.00145.61           C
ANISOU  598  CD  GLN A  82    20612  21205  13510  11728  -5242  -4437       C
ATOM    599  OE1 GLN A  82      50.892 -24.485 -11.306  1.00141.99           O
ANISOU  599  OE1 GLN A  82    19244  21347  13357  11387  -5022  -4578       O
ATOM    600  NE2 GLN A  82      50.729 -26.680 -11.757  1.00147.10           N
ANISOU  600  NE2 GLN A  82    21128  21195  13569  11950  -5362  -4515       N
ATOM    601  N   MET A  83      47.000 -25.954 -10.639  1.00138.97           N
ANISOU  601  N   MET A  83    21368  18372  13062  10536  -4572  -3061       N
ATOM    602  CA  MET A  83      46.000 -26.998 -10.805  1.00142.71           C
ANISOU  602  CA  MET A  83    22755  17994  13474  10428  -4509  -2736       C
ATOM    603  C   MET A  83      46.665 -28.230 -11.398  1.00145.08           C
ANISOU  603  C   MET A  83    23391  18199  13535  11192  -4898  -3011       C
ATOM    604  O   MET A  83      47.372 -28.133 -12.406  1.00143.25           O
ANISOU  604  O   MET A  83    22474  18553  13401  11401  -5355  -3355       O
ATOM    605  CB  MET A  83      44.852 -26.521 -11.705  1.00143.26           C
ANISOU  605  CB  MET A  83    22567  17910  13954   9573  -4019  -2467       C
ATOM    606  CG  MET A  83      44.271 -25.170 -11.296  1.00139.43           C
ANISOU  606  CG  MET A  83    21605  17622  13748   8839  -3632  -2251       C
ATOM    607  SD  MET A  83      43.222 -24.392 -12.546  1.00116.98           S
ANISOU  607  SD  MET A  83    18204  14867  11377   7985  -3106  -2048       S
ATOM    608  CE  MET A  83      41.645 -25.176 -12.219  1.00116.26           C
ANISOU  608  CE  MET A  83    19084  13837  11252   7535  -2895  -1643       C
ATOM    609  N   ASN A  84      46.441 -29.382 -10.771  1.00146.05           N
ANISOU  609  N   ASN A  84    24537  17626  13329  11454  -5068  -2865       N
ATOM    610  CA  ASN A  84      46.993 -30.646 -11.234  1.00148.31           C
ANISOU  610  CA  ASN A  84    25215  17776  13361  11875  -5327  -3105       C
ATOM    611  C   ASN A  84      45.903 -31.708 -11.222  1.00149.71           C
ANISOU  611  C   ASN A  84    26425  16953  13504  11683  -5213  -2756       C
ATOM    612  O   ASN A  84      44.863 -31.552 -10.576  1.00151.66           O
ANISOU  612  O   ASN A  84    27200  16608  13815  11278  -4967  -2345       O
ATOM    613  CB  ASN A  84      48.178 -31.102 -10.369  1.00154.66           C
ANISOU  613  CB  ASN A  84    26210  18858  13695  12483  -5698  -3410       C
ATOM    614  CG  ASN A  84      49.365 -30.164 -10.463  1.00154.31           C
ANISOU  614  CG  ASN A  84    25127  19832  13670  12665  -5806  -3864       C
ATOM    615  OD1 ASN A  84      49.612 -29.556 -11.503  1.00151.13           O
```

[2075]

```
ANISOU  615  OD1 ASN A  84    23875  19986  13562  12467  -5686  -4061       O
ATOM    616  ND2 ASN A  84      50.108 -30.042  -9.372  1.00157.97           N
ANISOU  616  ND2 ASN A  84    25654  20556  13813  13024  -6006  -4050       N
ATOM    617  N   SER A  85      46.164 -32.797 -11.948  1.00153.51           N
ANISOU  617  N   SER A  85    27181  17264  13881  11948  -5382  -2946       N
ATOM    618  CA  SER A  85      45.228 -33.914 -12.072  1.00155.78           C
ANISOU  618  CA  SER A  85    28406  16628  14154  11763  -5277  -2695       C
ATOM    619  C   SER A  85      43.848 -33.420 -12.502  1.00149.94           C
ANISOU  619  C   SER A  85    27662  15477  13829  11075  -4840  -2391       C
ATOM    620  O   SER A  85      42.820 -33.786 -11.929  1.00150.33           O
ANISOU  620  O   SER A  85    28504  14745  13871  10683  -4608  -2036       O
ATOM    621  CB  SER A  85      45.147 -34.707 -10.766  1.00161.40           C
ANISOU  621  CB  SER A  85    30157  16713  14454  11933  -5374  -2459       C
ATOM    622  OG  SER A  85      46.422 -35.193 -10.382  1.00167.31           O
ANISOU  622  OG  SER A  85    30938  17842  14791  12622  -5781  -2786       O
ATOM    623  N   LEU A  86      43.840 -32.571 -13.528  1.00151.32           N
ANISOU  623  N   LEU A  86    26924  16220  14353  10911  -4703  -2557       N
ATOM    624  CA  LEU A  86      42.616 -31.902 -13.951  1.00150.43           C
ANISOU  624  CA  LEU A  86    26551  15999  14608  10054  -4217  -2313       C
ATOM    625  C   LEU A  86      41.590 -32.912 -14.451  1.00147.39           C
ANISOU  625  C   LEU A  86    26848  14840  14313   9748  -4041  -2223       C
ATOM    626  O   LEU A  86      41.864 -33.692 -15.369  1.00149.42           O
ANISOU  626  O   LEU A  86    27134  15053  14585  10099  -4210  -2502       O
ATOM    627  CB  LEU A  86      42.934 -30.868 -15.033  1.00144.13           C
ANISOU  627  CB  LEU A  86    24556  16107  14098   9831  -4071  -2518       C
ATOM    628  CG  LEU A  86      43.575 -29.575 -14.514  1.00143.89           C
ANISOU  628  CG  LEU A  86    23780  16789  14102   9775  -4048  -2532       C
ATOM    629  CD1 LEU A  86      44.261 -28.799 -15.625  1.00140.45           C
ANISOU  629  CD1 LEU A  86    22251  17248  13864   9789  -4002  -2818       C
ATOM    630  CD2 LEU A  86      42.533 -28.703 -13.824  1.00141.22           C
ANISOU  630  CD2 LEU A  86    23467  16254  13935   8988  -3645  -2144       C
ATOM    631  N   ARG A  87      40.412 -32.896 -13.835  1.00145.25           N
ANISOU  631  N   ARG A  87    27104  13980  14102   9081  -3693  -1869       N
ATOM    632  CA  ARG A  87      39.321 -33.804 -14.150  1.00140.83           C
ANISOU  632  CA  ARG A  87    27222  12650  13636   8664  -3458  -1784       C
ATOM    633  C   ARG A  87      38.228 -33.059 -14.908  1.00135.42           C
ANISOU  633  C   ARG A  87    25904  12230  13318   7808  -3000  -1733       C
ATOM    634  O   ARG A  87      38.165 -31.827 -14.899  1.00129.98           O
ANISOU  634  O   ARG A  87    24454  12153  12780   7475  -2824  -1646       O
ATOM    635  CB  ARG A  87      38.747 -34.428 -12.872  1.00145.36           C
ANISOU  635  CB  ARG A  87    28924  12335  13972   8521  -3376  -1443       C
ATOM    636  CG  ARG A  87      38.137 -35.810 -13.054  1.00151.03           C
ANISOU  636  CG  ARG A  87    30627  12105  14652   8468  -3317  -1445       C
ATOM    637  CD  ARG A  87      37.440 -36.285 -11.781  1.00161.17           C
ANISOU  637  CD  ARG A  87    32891  12637  15708   8086  -3106  -1047       C
ATOM    638  NE  ARG A  87      38.336 -36.332 -10.628  1.00156.86           N
ANISOU  638  NE  ARG A  87    32611  12239  14749   8591  -3397   -897       N
ATOM    639  CZ  ARG A  87      38.915 -37.439 -10.176  1.00164.08           C
ANISOU  639  CZ  ARG A  87    34168  12864  15311   9026  -3642   -895       C
ATOM    640  NH1 ARG A  87      39.715 -37.387  -9.122  1.00167.17           N
ANISOU  640  NH1 ARG A  87    34754  13454  15307   9497  -3894   -812       N
ATOM    641  NH2 ARG A  87      38.694 -38.601 -10.776  1.00168.58           N
ANISOU  641  NH2 ARG A  87    35186  12947  15918   9003  -3632  -1001       N
ATOM    642  N   ALA A  88      37.365 -33.834 -15.572  1.00143.48           N
ANISOU  642  N   ALA A  88    27260  12779  14476   7475  -2810  -1814       N
ATOM    643  CA  ALA A  88      36.274 -33.249 -16.348  1.00133.83           C
ANISOU  643  CA  ALA A  88    25474  11808  13567   6719  -2397  -1818       C
ATOM    644  C   ALA A  88      35.351 -32.402 -15.482  1.00133.95           C
ANISOU  644  C   ALA A  88    25488  11763  13643   6014  -2036  -1483       C
ATOM    645  O   ALA A  88      34.764 -31.429 -15.968  1.00133.20           O
ANISOU  645  O   ALA A  88    24665  12168  13776   5522  -1760  -1459       O
ATOM    646  CB  ALA A  88      35.477 -34.353 -17.039  1.00135.14           C
ANISOU  646  CB  ALA A  88    26108  11402  13836   6486  -2264  -2004       C
ATOM    647  N   GLU A  89      35.208 -32.755 -14.204  1.00134.90           N
ANISOU  647  N   GLU A  89    26428  11288  13541   5983  -2037  -1223       N
ATOM    648  CA  GLU A  89      34.370 -31.980 -13.296  1.00132.81           C
ANISOU  648  CA  GLU A  89    26184  10978  13298   5347  -1713   -921       C
ATOM    649  C   GLU A  89      34.913 -30.579 -13.055  1.00127.27           C
```

[2076]

```
ANISOU  649  C   GLU A  89    24644  11056  12657   5400  -1754   -851       C
ATOM    650  O   GLU A  89      34.166 -29.708 -12.595  1.00127.02           O
ANISOU  650  O   GLU A  89    24369  11162  12729   4829  -1461   -666       O
ATOM    651  CB  GLU A  89      34.242 -32.711 -11.962  1.00139.67           C
ANISOU  651  CB  GLU A  89    28144  11069  13856   5393  -1735   -657       C
ATOM    652  CG  GLU A  89      35.583 -33.155 -11.395  1.00141.17           C
ANISOU  652  CG  GLU A  89    28717  11200  13719   6304  -2213   -668       C
ATOM    653  CD  GLU A  89      35.535 -33.433  -9.907  1.00152.82           C
ANISOU  653  CD  GLU A  89    31077  12143  14846   6370  -2228   -339       C
ATOM    654  OE1 GLU A  89      34.945 -32.615  -9.166  1.00147.53           O
ANISOU  654  OE1 GLU A  89    30250  11615  14189   5857  -1971   -115       O
ATOM    655  OE2 GLU A  89      36.088 -34.471  -9.480  1.00155.57           O
ANISOU  655  OE2 GLU A  89    32287  11936  14886   6962  -2503   -307       O
ATOM    656  N   ASP A  90      36.190 -30.341 -13.349  1.00126.67           N
ANISOU  656  N   ASP A  90    24114  11492  12523   6060  -2102  -1024       N
ATOM    657  CA  ASP A  90      36.820 -29.064 -13.043  1.00119.98           C
ANISOU  657  CA  ASP A  90    22520  11341  11727   6129  -2145   -992       C
ATOM    658  C   ASP A  90      36.541 -27.989 -14.088  1.00121.94           C
ANISOU  658  C   ASP A  90    21771  12253  12306   5749  -1903  -1067       C
ATOM    659  O   ASP A  90      36.922 -26.832 -13.872  1.00115.83           O
ANISOU  659  O   ASP A  90    20369  12014  11627   5686  -1862  -1023       O
ATOM    660  CB  ASP A  90      38.331 -29.256 -12.881  1.00123.03           C
ANISOU  660  CB  ASP A  90    22816  12034  11895   6981  -2605  -1192       C
ATOM    661  CG  ASP A  90      38.683 -30.203 -11.737  1.00134.51           C
ANISOU  661  CG  ASP A  90    25262  12881  12966   7451  -2875  -1091       C
ATOM    662  OD1 ASP A  90      38.067 -30.090 -10.653  1.00136.93           O
ANISOU  662  OD1 ASP A  90    26063  12808  13155   7120  -2712   -804       O
ATOM    663  OD2 ASP A  90      39.571 -31.063 -11.922  1.00133.20           O
ANISOU  663  OD2 ASP A  90    25393  12622  12594   8175  -3251  -1298       O
ATOM    664  N   THR A  91      35.893 -28.332 -15.202  1.00113.77           N
ANISOU  664  N   THR A  91    20592  11196  11439   5509  -1739  -1185       N
ATOM    665  CA  THR A  91      35.518 -27.323 -16.185  1.00114.93           C
ANISOU  665  CA  THR A  91    19864  11947  11857   5157  -1489  -1218       C
ATOM    666  C   THR A  91      34.524 -26.348 -15.573  1.00105.38           C
ANISOU  666  C   THR A  91    18519  10742  10778   4500  -1145   -966       C
ATOM    667  O   THR A  91      33.419 -26.739 -15.184  1.00111.47           O
ANISOU  667  O   THR A  91    19779  11031  11542   4038   -928   -864       O
ATOM    668  CB  THR A  91      34.914 -27.974 -17.429  1.00114.09           C
ANISOU  668  CB  THR A  91    19697  11794  11858   5043  -1386  -1414       C
ATOM    669  OG1 THR A  91      35.925 -28.696 -18.143  1.00115.78           O
ANISOU  669  OG1 THR A  91    19859  12155  11977   5683  -1711  -1687       O
ATOM    670  CG2 THR A  91      34.316 -26.911 -18.339  1.00104.86           C
ANISOU  670  CG2 THR A  91    17715  11202  10925   4641  -1088  -1395       C
ATOM    671  N   ALA A  92      34.912 -25.081 -15.504  1.00102.04           N
ANISOU  671  N   ALA A  92    17424  10869  10478   4446  -1083   -892       N
ATOM    672  CA  ALA A  92      34.128 -24.061 -14.818  1.00100.58           C
ANISOU  672  CA  ALA A  92    17086  10719  10411   3907   -804   -672       C
ATOM    673  C   ALA A  92      34.716 -22.699 -15.166  1.00 96.07           C
ANISOU  673  C   ALA A  92    15664  10812  10026   3926   -744   -661       C
ATOM    674  O   ALA A  92      35.716 -22.598 -15.884  1.00 96.06           O
ANISOU  674  O   ALA A  92    15227  11229  10042   4324   -901   -818       O
ATOM    675  CB  ALA A  92      34.121 -24.299 -13.305  1.00100.84           C
ANISOU  675  CB  ALA A  92    17762  10312  10240   3892   -885   -518       C
ATOM    676  N   VAL A  93      33.083 -21.648 -14.650  1.00 93.04           N
ANISOU  676  N   VAL A  93    15054  10514   9782   3478   -500   -488       N
ATOM    677  CA  VAL A  93      34.582 -20.281 -14.764  1.00 96.89           C
ANISOU  677  CA  VAL A  93    14829  11523  10463   3432   -407   -449       C
ATOM    678  C   VAL A  93      35.173 -19.898 -13.416  1.00 96.28           C
ANISOU  678  C   VAL A  93    14882  11396  10304   3525   -542   -412       C
ATOM    679  O   VAL A  93      34.449 -19.818 -12.415  1.00 97.57           O
ANISOU  679  O   VAL A  93    15413  11244  10414   3220   -449   -275       O
ATOM    680  CB  VAL A  93      33.473 -19.302 -15.181  1.00 99.56           C
ANISOU  680  CB  VAL A  93    14797  12007  11026   2910    -50   -307       C
ATOM    681  CG1 VAL A  93      33.975 -17.864 -15.096  1.00 94.78           C
ANISOU  681  CG1 VAL A  93    13569  11819  10624   2836     62   -237       C
ATOM    682  CG2 VAL A  93      32.981 -19.625 -16.584  1.00 91.52           C
ANISOU  682  CG2 VAL A  93    13571  11144  10059   2891     62   -379       C
ATOM    683  N   TYR A  94      36.481 -19.659 -13.381  1.00 96.64           N
```

[2077]

```
ANISOU  683  N   TYR A  94    14599  11795  10323   3946   -758   -566       N
ATOM    684  CA  TYR A  94      37.206 -19.461 -12.131  1.00 97.24           C
ANISOU  684  CA  TYR A  94    14796  11881  10270   4156   -954   -615       C
ATOM    685  C   TYR A  94      37.371 -17.970 -11.859  1.00102.88           C
ANISOU  685  C   TYR A  94    14877  12973  11238   3871   -765   -593       C
ATOM    686  O   TYR A  94      37.979 -17.250 -12.660  1.00100.30           O
ANISOU  686  O   TYR A  94    13907  13097  11107   3900   -682   -687       O
ATOM    687  CB  TYR A  94      38.562 -20.162 -12.177  1.00 97.57           C
ANISOU  687  CB  TYR A  94    14868  12105  10101   4828  -1333   -871       C
ATOM    688  CG  TYR A  94      38.460 -21.662 -12.013  1.00101.06           C
ANISOU  688  CG  TYR A  94    16112  12045  10242   5169  -1571   -883       C
ATOM    689  CD1 TYR A  94      38.003 -22.466 -13.050  1.00101.31           C
ANISOU  689  CD1 TYR A  94    16316  11887  10289   5165  -1529   -900       C
ATOM    690  CD2 TYR A  94      38.811 -22.275 -10.817  1.00104.51           C
ANISOU  690  CD2 TYR A  94    17157  12182  10372   5504  -1832   -881       C
ATOM    691  CE1 TYR A  94      37.903 -23.836 -12.905  1.00104.94           C
ANISOU  691  CE1 TYR A  94    17542  11828  10502   5453  -1726   -925       C
ATOM    692  CE2 TYR A  94      38.714 -23.647 -10.661  1.00108.28           C
ANISOU  692  CE2 TYR A  94    18442  12129  10569   5823  -2030   -863       C
ATOM    693  CZ  TYR A  94      38.262 -24.421 -11.711  1.00108.50           C
ANISOU  693  CZ  TYR A  94    18636  11932  10655   5780  -1969   -889       C
ATOM    694  OH  TYR A  94      38.164 -25.786 -11.564  1.00112.67           O
ANISOU  694  OH  TYR A  94    19997  11877  10934   6075  -2148   -886       O
ATOM    695  N   TYR A  95      36.839 -17.518 -10.725  1.00 95.49           N
ANISOU  695  N   TYR A  95    14141  11846  10296   3591   -686   -475       N
ATOM    696  CA  TYR A  95      36.826 -16.109 -10.364  1.00 92.47           C
ANISOU  696  CA  TYR A  95    13230  11731  10172   3272   -490   -456       C
ATOM    697  C   TYR A  95      37.916 -15.791  -9.348  1.00101.49           C
ANISOU  697  C   TYR A  95    14234  13102  11225   3567   -717   -658       C
ATOM    698  O   TYR A  95      38.361 -16.653  -8.585  1.00 99.42           O
ANISOU  698  O   TYR A  95    14439  12691  10644   3957  -1012   -740       O
ATOM    699  CB  TYR A  95      35.464 -15.704  -9.795  1.00 87.94           C
ANISOU  699  CB  TYR A  95    12884  10862   9669   2750   -240   -243       C
ATOM    700  CG  TYR A  95      34.344 -15.656 -10.809  1.00 96.19           C
ANISOU  700  CG  TYR A  95    13872  11816  10858   2401     32    -97       C
ATOM    701  CD1 TYR A  95      34.125 -14.519 -11.578  1.00 92.89           C
ANISOU  701  CD1 TYR A  95    12867  11684  10744   2156    285    -42       C
ATOM    702  CD2 TYR A  95      33.498 -16.742 -10.990  1.00 95.90           C
ANISOU  702  CD2 TYR A  95    14379  11410  10647   2323     42    -30       C
ATOM    703  CE1 TYR A  95      33.097 -14.465 -12.491  1.00 93.20           C
ANISOU  703  CE1 TYR A  95    12848  11691  10873   1901    510     71       C
ATOM    704  CE2 TYR A  95      32.469 -16.698 -11.909  1.00 94.08           C
ANISOU  704  CE2 TYR A  95    14049  11162  10536   2020    279     40       C
ATOM    705  CZ  TYR A  95      32.273 -15.558 -12.659  1.00 98.17           C
ANISOU  705  CZ  TYR A  95    13963  12016  11322   1839    497     88       C
ATOM    706  OH  TYR A  95      31.250 -15.509 -13.581  1.00100.68           O
ANISOU  706  OH  TYR A  95    14172  12365  11717   1603    711    138       O
ATOM    707  N   CYS A  96      38.341 -14.531  -9.348  1.00 96.84           N
ANISOU  707  N   CYS A  96    13002  12876  10915   3384   -571   -752       N
ATOM    708  CA  CYS A  96      39.296 -14.010  -8.382  1.00100.56           C
ANISOU  708  CA  CYS A  96    13218  13627  11364   3570   -732   -997       C
ATOM    709  C   CYS A  96      38.552 -13.099  -7.419  1.00100.00           C
ANISOU  709  C   CYS A  96    13133  13430  11432   3143   -550   -896       C
ATOM    710  O   CYS A  96      37.851 -12.177  -7.849  1.00101.47           O
ANISOU  710  O   CYS A  96    13025  13600  11928   2692   -233   -753       O
ATOM    711  CB  CYS A  96      40.426 -13.246  -9.076  1.00104.76           C
ANISOU  711  CB  CYS A  96    12993  14683  12130   3654   -684  -1248       C
ATOM    712  SG  CYS A  96      41.767 -12.721  -7.983  1.00104.19           S
ANISOU  712  SG  CYS A  96    12523  15049  12014   3936   -914  -1679       S
ATOM    713  N   ALA A  97      36.694 -13.362  -6.124  1.00 97.98           N
ANISOU  713  N   ALA A  97    13206  13097  10924   3318   -758   -975       N
ATOM    714  CA  ALA A  97      37.929 -12.653  -5.109  1.00100.95           C
ANISOU  714  CA  ALA A  97    13644  13345  11365   2948   -617   -891       C
ATOM    715  C   ALA A  97      38.845 -12.158  -4.002  1.00 92.97           C
ANISOU  715  C   ALA A  97    12383  12653  10290   3171   -811  -1195       C
ATOM    716  O   ALA A  97      39.814 -12.831  -3.637  1.00 97.21           O
ANISOU  716  O   ALA A  97    13041  13360  10534   3700  -1138  -1404       O
ATOM    717  CB  ALA A  97      36.835 -13.547  -4.520  1.00 90.57           C
```

[2078]

```
ANISOU  717  CB  ALA A  97    13104  11558   9749   2847   -624   -633       C
ATOM    718  N   ARG A  98      38.535 -10.975  -3.478  1.00 96.30           N
ANISOU  718  N   ARG A  98    12441  13171  10979   2791   -619  -1248       N
ATOM    719  CA  ARG A  98      39.189 -10.440  -2.293  1.00 97.42           C
ANISOU  719  CA  ARG A  98    12355  13594  11065   2929   -774  -1551       C
ATOM    720  C   ARG A  98      38.314 -10.687  -1.069  1.00 99.18           C
ANISOU  720  C   ARG A  98    13113  13560  11012   2834   -813  -1402       C
ATOM    721  O   ARG A  98      37.082 -10.686  -1.152  1.00 91.55           O
ANISOU  721  O   ARG A  98    12439  12257  10091   2440   -591  -1109       O
ATOM    722  CB  ARG A  98      39.472  -8.940  -2.438  1.00 96.93           C
ANISOU  722  CB  ARG A  98    11535  13805  11490   2567   -534  -1758       C
ATOM    723  CG  ARG A  98      40.405  -8.385  -1.370  1.00100.86           C
ANISOU  723  CG  ARG A  98    11661  14693  11967   2751   -712  -2190       C
ATOM    724  CD  ARG A  98      40.456  -6.860  -1.356  1.00 97.63           C
ANISOU  724  CD  ARG A  98    10592  14437  12065   2296   -427  -2378       C
ATOM    725  NE  ARG A  98      39.180  -6.261  -0.977  1.00 98.14           N
ANISOU  725  NE  ARG A  98    10824  14182  12282   1847   -197  -2137       N
ATOM    726  CZ  ARG A  98      39.055  -5.055  -0.429  1.00104.33           C
ANISOU  726  CZ  ARG A  98    11213  15040  13390   1522    -36  -2323       C
ATOM    727  NH1 ARG A  98      40.132  -4.321  -0.185  1.00103.57           N
ANISOU  727  NH1 ARG A  98    10531  15310  13511   1558    -59  -2760       N
ATOM    728  NH2 ARG A  98      37.855  -4.587  -0.110  1.00105.26           N
ANISOU  728  NH2 ARG A  98    11506  14877  13611   1159    149  -2112       N
ATOM    729  N   ASP A  99      38.967 -10.898   0.073  1.00108.12           N
ANISOU  729  N   ASP A  99    14353  14895  11832   3211  -1097  -1629       N
ATOM    730  CA  ASP A  99      38.300 -11.245   1.323  1.00105.69           C
ANISOU  730  CA  ASP A  99    14595  14397  11166   3214  -1170  -1500       C
ATOM    731  C   ASP A  99      38.641 -10.210   2.386  1.00109.38           C
ANISOU  731  C   ASP A  99    14611  15226  11724   3161  -1206  -1823       C
ATOM    732  O   ASP A  99      39.819  -9.997   2.696  1.00111.68           O
ANISOU  732  O   ASP A  99    14510  15945  11978   3537  -1433  -2213       O
ATOM    733  CB  ASP A  99      38.715 -12.641   1.792  1.00109.62           C
ANISOU  733  CB  ASP A  99    15797  14765  11089   3807  -1507  -1432       C
ATOM    734  CG  ASP A  99      38.226 -13.741   0.871  1.00108.87           C
ANISOU  734  CG  ASP A  99    16250  14230  10887   3822  -1460  -1111       C
ATOM    735  OD1 ASP A  99      37.027 -13.740   0.520  1.00105.95           O
ANISOU  735  OD1 ASP A  99    16100  13509  10649   3323  -1169   -819       O
ATOM    736  OD2 ASP A  99      39.043 -14.609   0.500  1.00111.49           O
ANISOU  736  OD2 ASP A  99    16774  14588  10998   4347  -1721  -1187       O
ATOM    737  N   LEU A 100      37.610  -9.578   2.952  1.00104.62           N
ANISOU  737  N   LEU A 100    14040  14481  11231   2705   -988  -1705       N
ATOM    738  CA  LEU A 100      37.828  -8.682   4.082  1.00100.43           C
ANISOU  738  CA  LEU A 100    13153  14268  10738   2666  -1037  -2016       C
ATOM    739  C   LEU A 100      38.442  -9.431   5.256  1.00106.76           C
ANISOU  739  C   LEU A 100    14334  15265  10967   3236  -1401  -2156       C
ATOM    740  O   LEU A 100      39.359  -8.930   5.918  1.00106.66           O
ANISOU  740  O   LEU A 100    13883  15707  10935   3507  -1593  -2582       O
ATOM    741  CB  LEU A 100      36.510  -8.034   4.496  1.00104.42           C
ANISOU  741  CB  LEU A 100    13720  14564  11392   2116   -759  -1843       C
ATOM    742  CG  LEU A 100      35.912  -7.005   3.542  1.00 92.79           C
ANISOU  742  CG  LEU A 100    11786  12972  10498   1586   -412  -1779       C
ATOM    743  CD1 LEU A 100      34.515  -6.621   3.990  1.00 95.70           C
ANISOU  743  CD1 LEU A 100    12339  13124  10897   1131   -186  -1596       C
ATOM    744  CD2 LEU A 100      36.806  -5.778   3.460  1.00 93.34           C
ANISOU  744  CD2 LEU A 100    11068  13382  11015   1529   -373  -2182       C
ATOM    745  N   ILE A 101      37.942 -10.634   5.525  1.00105.23           N
ANISOU  745  N   ILE A 101    14965  14727  10289   3429  -1491  -1811       N
ATOM    746  CA  ILE A 101      38.497 -11.541   6.521  1.00115.35           C
ANISOU  746  CA  ILE A 101    16771  16104  10950   4047  -1840  -1849       C
ATOM    747  C   ILE A 101      38.329 -12.947   5.967  1.00111.14           C
ANISOU  747  C   ILE A 101    17019  15092  10113   4298  -1914  -1485       C
ATOM    748  O   ILE A 101      37.004 -13.119   4.789  1.00108.18           O
ANISOU  748  O   ILE A 101    16611  14483  10008   4041  -1735  -1313       O
ATOM    749  CB  ILE A 101      37.802 -11.388   7.886  1.00111.58           C
ANISOU  749  CB  ILE A 101    16608  15635  10153   3931  -1815  -1780       C
ATOM    750  CG1 ILE A 101      36.287 -11.333   7.695  1.00108.06           C
ANISOU  750  CG1 ILE A 101    16475  14745   9840   3262  -1439  -1393       C
ATOM    751  CG2 ILE A 101      38.292 -10.144   8.603  1.00112.15           C
```

[2079]

```
ANISOU  751  CG2 ILE A 101    15924  16242  10447   3891  -1863  -2254       C
ATOM    752  CD1 ILE A 101      35.498 -11.629   8.932  1.00112.99           C
ANISOU  752  CD1 ILE A 101    17659  15268  10005   3179  -1403  -1210       C
ATOM    753  N   HIS A 102      38.529 -13.958   6.804  1.00115.64           N
ANISOU  753  N   HIS A 102    18308  15579  10051   4806  -2169  -1366       N
ATOM    754  CA  HIS A 102      38.341 -15.336   6.371  1.00117.35           C
ANISOU  754  CA  HIS A 102    19356  15290   9941   5048  -2232  -1016       C
ATOM    755  C   HIS A 102      36.873 -15.581   6.031  1.00114.29           C
ANISOU  755  C   HIS A 102    19409  14353   9664   4372  -1842   -593       C
ATOM    756  O   HIS A 102      35.987 -15.338   6.857  1.00114.15           O
ANISOU  756  O   HIS A 102    19612  14240   9517   4007  -1657   -445       O
ATOM    757  CB  HIS A 102      38.810 -16.301   7.457  1.00123.46           C
ANISOU  757  CB  HIS A 102    20876  16026  10007   5736  -2567   -953       C
ATOM    758  CG  HIS A 102      38.660 -17.745   7.091  1.00126.08           C
ANISOU  758  CG  HIS A 102    22142  15778   9986   6023  -2639   -598       C
ATOM    759  ND1 HIS A 102      38.558 -18.178   5.784  1.00131.98           N
ANISOU  759  ND1 HIS A 102    22889  16227  11030   5879  -2539   -500       N
ATOM    760  CD2 HIS A 102      38.592 -18.856   7.862  1.00131.28           C
ANISOU  760  CD2 HIS A 102    23788  16077  10017   6449  -2792   -321       C
ATOM    761  CE1 HIS A 102      38.436 -19.493   5.768  1.00127.25           C
ANISOU  761  CE1 HIS A 102    23219  15101  10029   6191  -2633   -208       C
ATOM    762  NE2 HIS A 102      38.453 -19.929   7.016  1.00131.98           N
ANISOU  762  NE2 HIS A 102    24458  15625  10065   6535  -2777    -76       N
ATOM    763  N   GLY A 103      36.618 -16.045   4.809  1.00112.07           N
ANISOU  763  N   GLY A 103    19208  13757   9616   4206  -1716   -440       N
ATOM    764  CA  GLY A 103      35.279 -16.441   4.419  1.00109.91           C
ANISOU  764  CA  GLY A 103    19377  12976   9408   3624  -1372    -88       C
ATOM    765  C   GLY A 103      34.298 -15.315   4.190  1.00105.13           C
ANISOU  765  C   GLY A 103    18223  12469   9253   2902  -1013    -98       C
ATOM    766  O   GLY A 103      33.089 -15.554   4.204  1.00104.03           O
ANISOU  766  O   GLY A 103    18446  11995   9087   2405   -730    144       O
ATOM    767  N   VAL A 104      34.774 -14.092   3.974  1.00102.64           N
ANISOU  767  N   VAL A 104    17049  12599   9350   2827  -1009   -391       N
ATOM    768  CA  VAL A 104      33.907 -12.936   3.744  1.00 98.46           C
ANISOU  768  CA  VAL A 104    15987  12160   9264   2205   -689   -419       C
ATOM    769  C   VAL A 104      34.391 -12.273   2.456  1.00102.24           C
ANISOU  769  C   VAL A 104    15775  12818  10252   2150   -624   -564       C
ATOM    770  O   VAL A 104      35.289 -11.424   2.468  1.00 98.09           O
ANISOU  770  O   VAL A 104    14624  12679   9966   2301   -720   -862       O
ATOM    771  CB  VAL A 104      33.906 -11.952   4.918  1.00 99.01           C
ANISOU  771  CB  VAL A 104    15723  12561   9334   2114   -702   -628       C
ATOM    772  CG1 VAL A 104      33.085 -10.716   4.586  1.00 94.93           C
ANISOU  772  CG1 VAL A 104    14634  12123   9312   1528   -393   -686       C
ATOM    773  CG2 VAL A 104      33.348 -12.634   6.160  1.00102.21           C
ANISOU  773  CG2 VAL A 104    16844  12799   9193   2145   -731   -447       C
ATOM    774  N   THR A 105      33.804 -12.669   1.332  1.00101.76           N
ANISOU  774  N   THR A 105    15828  12489  10349   1926   -447   -367       N
ATOM    775  CA  THR A 105      34.204 -12.130   0.043  1.00 98.00           C
ANISOU  775  CA  THR A 105    14767  12169  10300   1885   -364   -454       C
ATOM    776  C   THR A 105      33.572 -10.762  -0.172  1.00 99.96           C
ANISOU  776  C   THR A 105    14436  12550  10995   1395    -79   -500       C
ATOM    777  O   THR A 105      32.391 -10.552   0.120  1.00101.86           O
ANISOU  777  O   THR A 105    14832  12626  11245    988    129   -367       O
ATOM    778  CB  THR A 105      33.806 -13.089  -1.074  1.00102.26           C
ANISOU  778  CB  THR A 105    15647  12403  10804   1871   -296   -247       C
ATOM    779  OG1 THR A 105      34.512 -14.326  -0.909  1.00107.59           O
ANISOU  779  OG1 THR A 105    16852  12938  11089   2383   -583   -233       O
ATOM    780  CG2 THR A 105      34.131 -12.498  -2.430  1.00101.86           C
ANISOU  780  CG2 THR A 105    14994  12542  11166   1812   -181   -311       C
ATOM    781  N   ARG A 106      34.375  -9.827  -0.676  1.00 97.62           N
ANISOU  781  N   ARG A 106    13477  12551  11063   1441    -64   -704       N
ATOM    782  CA  ARG A 106      33.981  -8.431  -0.790  1.00 98.78           C
ANISOU  782  CA  ARG A 106    13074  12813  11646   1047    182   -779       C
ATOM    783  C   ARG A 106      34.093  -7.878  -2.201  1.00 93.50           C
ANISOU  783  C   ARG A 106    11971  12183  11370    919    380   -725       C
ATOM    784  O   ARG A 106      33.329  -6.977  -2.554  1.00 89.08           O
ANISOU  784  O   ARG A 106    11164  11565  11116    557    638   -648       O
ATOM    785  CB  ARG A 106      34.829  -7.571   0.168  1.00 93.83           C
```

[2080]

```
ANISOU  785  CB  ARG A 106    12027  12507  11117   1153     64  -1116       C
ATOM    786  CG  ARG A 106      34.474  -6.091   0.209  1.00 90.21           C
ANISOU  786  CG  ARG A 106    11033  12126  11117    757    308  -1232       C
ATOM    787  CD  ARG A 106      32.991  -5.878   0.463  1.00 96.17           C
ANISOU  787  CD  ARG A 106    12024  12646  11870    366    509  -1033       C
ATOM    788  NE  ARG A 106      32.617  -4.473   0.332  1.00102.20           N
ANISOU  788  NE  ARG A 106    12301  13440  13089     31    741  -1127       N
ATOM    789  CZ  ARG A 106      32.319  -3.886  -0.822  1.00102.13           C
ANISOU  789  CZ  ARG A 106    12042  13333  13429   -156    973   -994       C
ATOM    790  NH1 ARG A 106      32.350  -4.582  -1.949  1.00 95.94           N
ANISOU  790  NH1 ARG A 106    11404  12462  12586    -51   1002   -782       N
ATOM    791  NH2 ARG A 106      31.989  -2.602  -0.850  1.00108.72           N
ANISOU  791  NH2 ARG A 106    12500  14154  14657   -422   1174  -1074       N
ATOM    792  N   ASN A 107      35.009  -8.399  -3.018  1.00 95.97           N
ANISOU  792  N   ASN A 107    12202  12604  11660   1229    266   -762       N
ATOM    793  CA  ASN A 107      35.202  -7.949  -4.390  1.00 94.28           C
ANISOU  793  CA  ASN A 107    11594  12465  11764   1144    454   -699       C
ATOM    794  C   ASN A 107      35.404  -9.156  -5.297  1.00 92.22           C
ANISOU  794  C   ASN A 107    11625  12133  11280   1424    340   -583       C
ATOM    795  O   ASN A 107      36.026 -10.142  -4.893  1.00 93.35           O
ANISOU  795  O   ASN A 107    12085  12287  11097   1807     58   -671       O
ATOM    796  CB  ASN A 107      36.405  -7.000  -4.498  1.00 92.42           C
ANISOU  796  CB  ASN A 107    10727  12562  11825   1202    472   -976       C
ATOM    797  CG  ASN A 107      36.317  -5.836  -3.528  1.00 97.85           C
ANISOU  797  CG  ASN A 107    11120  13316  12742    950    560  -1159       C
ATOM    798  OD1 ASN A 107      36.719  -5.947  -2.366  1.00 96.97           O
ANISOU  798  OD1 ASN A 107    11066  13332  12445   1112    350  -1384       O
ATOM    799  ND2 ASN A 107      35.785  -4.712  -3.998  1.00 97.78           N
ANISOU  799  ND2 ASN A 107    10806  13222  13125    581    866  -1071       N
ATOM    800  N   TRP A 108      34.880  -9.076  -6.521  1.00 91.94           N
ANISOU  800  N   TRP A 108    11493  12034  11408   1267    547   -398       N
ATOM    801  CA  TRP A 108      34.958 -10.165  -7.486  1.00 93.53           C
ANISOU  801  CA  TRP A 108    11932  12176  11430   1498    466   -305       C
ATOM    802  C   TRP A 108      35.614  -9.696  -8.780  1.00 84.82           C
ANISOU  802  C   TRP A 108    10327  11333  10567   1559    591   -323       C
ATOM    803  O   TRP A 108      35.577  -8.514  -9.136  1.00 78.68           O
ANISOU  803  O   TRP A 108     9109  10670  10115   1311    835   -295       O
ATOM    804  CB  TRP A 108      33.569 -10.735  -7.808  1.00 90.93           C
ANISOU  804  CB  TRP A 108    12018  11540  10991   1264    596    -79       C
ATOM    805  CG  TRP A 108      32.913 -11.467  -6.681  1.00 94.46           C
ANISOU  805  CG  TRP A 108    13050  11705  11137   1199    497    -38       C
ATOM    806  CD1 TRP A 108      32.395 -10.923  -5.541  1.00100.08           C
ANISOU  806  CD1 TRP A 108    13827  12361  11839    961    548    -52       C
ATOM    807  CD2 TRP A 108      32.678 -12.879  -6.594  1.00 90.60           C
ANISOU  807  CD2 TRP A 108    13187  10933  10303   1357    354     28       C
ATOM    808  NE1 TRP A 108      31.862 -11.909  -4.747  1.00100.34           N
ANISOU  808  NE1 TRP A 108    14487  12119  11519    952    460     20       N
ATOM    809  CE2 TRP A 108      32.024 -13.118  -5.371  1.00100.81           C
ANISOU  809  CE2 TRP A 108    14922  12004  11377   1183    349     79       C
ATOM    810  CE3 TRP A 108      32.966 -13.963  -7.426  1.00 91.62           C
ANISOU  810  CE3 TRP A 108    13558  10965  10287   1627    238     41       C
ATOM    811  CZ2 TRP A 108      31.652 -14.397  -4.962  1.00100.55           C
ANISOU  811  CZ2 TRP A 108    15598  11620  10987   1245    261    171       C
ATOM    812  CZ3 TRP A 108      32.595 -15.231  -7.020  1.00 84.21           C
ANISOU  812  CZ3 TRP A 108    13317   9658   9019   1703    131    108       C
ATOM    813  CH2 TRP A 108      31.942 -15.437  -5.803  1.00 99.89           C
ANISOU  813  CH2 TRP A 108    15768  11392  10795   1500    157    187       C
ATOM    814  N   GLY A 109      36.206 -10.646  -9.491  1.00 85.55           N
ANISOU  814  N   GLY A 109    10516  11506  10483   1898    431   -365       N
ATOM    815  CA  GLY A 109      36.825 -10.385 -10.773  1.00 98.66           C
ANISOU  815  CA  GLY A 109    11743  13442  12300   1986    540   -380       C
ATOM    816  C   GLY A 109      35.866 -10.557 -11.935  1.00 88.69           C
ANISOU  816  C   GLY A 109    10552  12075  11070   1841    738   -144       C
ATOM    817  O   GLY A 109      34.642 -10.554 -11.777  1.00 77.25           O
ANISOU  817  O   GLY A 109     9367  10373   9611   1582    856     19       O
ATOM    818  N   GLY A 110      36.441 -10.699 -13.126  1.00 91.91           N
ANISOU  818  N   GLY A 110    10687  12733  11501   2022    773   -159       N
ATOM    819  CA  GLY A 110      35.653 -10.965 -14.315  1.00 92.12           C
```

[2081]

```
ANISOU  819  CA  GLY A 110    10754  12739  11510   1970    924     21       C
ATOM    820  C   GLY A 110      35.477 -12.454 -14.514  1.00 88.66           C
ANISOU  820  C   GLY A 110    10767  12145  10773   2233    690    -36       C
ATOM    821  O   GLY A 110      34.381 -12.935 -14.817  1.00 87.59           O
ANISOU  821  O   GLY A 110    10922  11799  10559   2098    758     74       O
ATOM    822  N   GLY A 111      36.558 -13.190 -14.311  1.00 87.55           N
ANISOU  822  N   GLY A 111    10692  12106  10466   2615    410   -242       N
ATOM    823  CA  GLY A 111      36.582 -14.628 -14.456  1.00 87.47           C
ANISOU  823  CA  GLY A 111    11139  11919  10175   2932    157   -326       C
ATOM    824  C   GLY A 111      37.591 -15.064 -15.500  1.00102.04           C
ANISOU  824  C   GLY A 111    12697  14115  11958   3317     36   -493       C
ATOM    825  O   GLY A 111      38.287 -14.257 -16.116  1.00105.05           O
ANISOU  825  O   GLY A 111    12517  14899  12500   3316    169   -535       O
ATOM    826  N   THR A 112      37.666 -16.379 -15.676  1.00100.48           N
ANISOU  826  N   THR A 112    12915  13746  11518   3644   -210   -598       N
ATOM    827  CA  THR A 112      38.421 -16.983 -16.762  1.00 98.56           C
ANISOU  827  CA  THR A 112    12464  13802  11183   4025   -338   -771       C
ATOM    828  C   THR A 112      37.897 -18.396 -16.950  1.00 98.91           C
ANISOU  828  C   THR A 112    13100  13468  11011   4214   -518   -811       C
ATOM    829  O   THR A 112      37.459 -19.040 -15.994  1.00105.27           O
ANISOU  829  O   THR A 112    14509  13809  11678   4197   -640   -771       O
ATOM    830  CB  THR A 112      39.931 -16.995 -16.492  1.00 99.17           C
ANISOU  830  CB  THR A 112    12261  14239  11181   4441   -584  -1052       C
ATOM    831  OG1 THR A 112      40.612 -17.564 -17.618  1.00103.44           O
ANISOU  831  OG1 THR A 112    12561  15114  11626   4800   -694  -1238       O
ATOM    832  CG2 THR A 112      40.248 -17.816 -15.258  1.00102.09           C
ANISOU  832  CG2 THR A 112    13179  14301  11309   4752   -926  -1173       C
ATOM    833  N   LEU A 113      37.932 -18.864 -18.189  1.00103.03           N
ANISOU  833  N   LEU A 113    13457  14186  11503   4379   -512   -894       N
ATOM    834  CA  LEU A 113      37.328 -20.137 -18.550  1.00105.61           C
ANISOU  834  CA  LEU A 113    14288  14160  11677   4495   -628   -958       C
ATOM    835  C   LEU A 113      38.395 -21.221 -18.604  1.00101.62           C
ANISOU  835  C   LEU A 113    13985  13669  10955   5090  -1006  -1232       C
ATOM    836  O   LEU A 113      39.419 -21.061 -19.276  1.00103.93           O
ANISOU  836  O   LEU A 113    13791  14464  11235   5410  -1099  -1416       O
ATOM    837  CB  LEU A 113      36.604 -20.035 -19.892  1.00100.93           C
ANISOU  837  CB  LEU A 113    13400  13779  11170   4328   -401   -919       C
ATOM    838  CG  LEU A 113      35.901 -21.305 -20.376  1.00107.94           C
ANISOU  838  CG  LEU A 113    14737  14340  11937   4393   -484  -1041       C
ATOM    839  CD1 LEU A 113      34.764 -21.691 -19.448  1.00 91.19           C
ANISOU  839  CD1 LEU A 113    13231  11617   9799   4020   -404   -924       C
ATOM    840  CD2 LEU A 113      35.401 -21.138 -21.815  1.00108.58           C
ANISOU  840  CD2 LEU A 113    14390  14791  12073   4327   -293  -1069       C
ATOM    841  N   VAL A 114      38.154 -22.315 -17.888  1.00102.02           N
ANISOU  841  N   VAL A 114    14768  13170  10824   5240  -1214  -1264       N
ATOM    842  CA  VAL A 114      39.005 -23.496 -17.930  1.00104.04           C
ANISOU  842  CA  VAL A 114    15359  13322  10851   5842  -1591  -1518       C
ATOM    843  C   VAL A 114      38.155 -24.673 -18.381  1.00104.42           C
ANISOU  843  C   VAL A 114    15965  12877  10835   5805  -1598  -1549       C
ATOM    844  O   VAL A 114      37.056 -24.889 -17.856  1.00103.50           O
ANISOU  844  O   VAL A 114    16337  12252  10738   5394  -1430  -1371       O
ATOM    845  CB  VAL A 114      39.662 -23.777 -16.568  1.00104.57           C
ANISOU  845  CB  VAL A 114    15869  13145  10719   6156  -1870  -1543       C
ATOM    846  CG1 VAL A 114      40.359 -25.131 -16.582  1.00109.39           C
ANISOU  846  CG1 VAL A 114    16978  13524  11059   6809  -2269  -1782       C
ATOM    847  CG2 VAL A 114      40.648 -22.679 -16.240  1.00108.19           C
ANISOU  847  CG2 VAL A 114    15687  14175  11244   6243  -1891  -1623       C
ATOM    848  N   THR A 115      38.654 -25.421 -19.360  1.00108.51           N
ANISOU  848  N   THR A 115    19661  10619  10949   5333  -1770  -3674       N
ATOM    849  CA  THR A 115      37.904 -26.524 -19.938  1.00116.86           C
ANISOU  849  CA  THR A 115    21044  11166  12193   4977  -1685  -4198       C
ATOM    850  C   THR A 115      38.759 -27.779 -19.923  1.00121.77           C
ANISOU  850  C   THR A 115    22167  11269  12831   5166  -1688  -4374       C
ATOM    851  O   THR A 115      39.893 -27.770 -20.413  1.00125.24           O
ANISOU  851  O   THR A 115    22613  11913  13060   5570  -1815  -4335       O
ATOM    852  CB  THR A 115      37.454 -26.213 -21.369  1.00108.51           C
ANISOU  852  CB  THR A 115    19746  10436  11047   4813  -1742  -4567       C
ATOM    853  OG1 THR A 115      36.998 -24.857 -21.451  1.00101.87           O
```

[2082]

```
ANISOU  853  OG1 THR A 115    18386  10181  10138   4827  -1770  -4298       O
ATOM    854  CG2 THR A 115      36.318 -27.132 -21.757  1.00114.13           C
ANISOU  854  CG2 THR A 115    20727  10741  11898   4221  -1614  -5133       C
ATOM    855  N   VAL A 116      38.212 -28.850 -19.359  1.00124.04           N
ANISOU  855  N   VAL A 116    22874  10876  13378   4878  -1550  -4569       N
ATOM    856  CA  VAL A 116      38.852 -30.157 -19.338  1.00131.87           C
ANISOU  856  CA  VAL A 116    24395  11237  14471   5019  -1509  -4784       C
ATOM    857  C   VAL A 116      38.077 -31.060 -20.284  1.00139.10           C
ANISOU  857  C   VAL A 116    25568  11703  15580   4552  -1439  -5448       C
ATOM    858  O   VAL A 116      36.887 -31.322 -20.068  1.00140.28           O
ANISOU  858  O   VAL A 116    25782  11574  15945   4002  -1353  -5655       O
ATOM    859  CB  VAL A 116      38.895 -30.745 -17.922  1.00133.09           C
ANISOU  859  CB  VAL A 116    24863  10895  14809   5053  -1401  -4482       C
ATOM    860  CG1 VAL A 116      39.612 -32.082 -17.929  1.00141.83           C
ANISOU  860  CG1 VAL A 116    26522  11321  16044   5265  -1347  -4678       C
ATOM    861  CG2 VAL A 116      39.570 -29.770 -16.966  1.00134.89           C
ANISOU  861  CG2 VAL A 116    24795  11678  14779   5404  -1441  -3900       C
ATOM    862  N   SER A 117      38.745 -31.532 -21.332  1.00139.70           N
ANISOU  862  N   SER A 117    25783  11746  15551   4729  -1476  -5819       N
ATOM    863  CA  SER A 117      38.087 -32.370 -22.323  1.00147.75           C
ANISOU  863  CA  SER A 117    27030  12416  16691   4243  -1390  -6540       C
ATOM    864  C   SER A 117      39.142 -33.156 -23.084  1.00154.51           C
ANISOU  864  C   SER A 117    28185  13028  17492   4595  -1387  -6876       C
ATOM    865  O   SER A 117      40.254 -32.673 -23.310  1.00151.82           O
ANISOU  865  O   SER A 117    27673  13118  16893   5162  -1512  -6608       O
ATOM    866  CB  SER A 117      37.239 -31.533 -23.289  1.00143.85           C
ANISOU  866  CB  SER A 117    26092  12583  15982   3841  -1429  -6794       C
ATOM    867  OG  SER A 117      36.410 -32.360 -24.086  1.00152.02           O
ANISOU  867  OG  SER A 117    27406  13320  17036   3244  -1382  -7531       O
ATOM    868  N   ALA A 118      38.779 -34.373 -23.475  1.00164.13           N
ANISOU  868  N   ALA A 118    29845  13556  18960   4233  -1248  -7491       N
ATOM    869  CA  ALA A 118      39.680 -35.231 -24.231  1.00172.45           C
ANISOU  869  CA  ALA A 118    31226  14286  20010   4524  -1194  -7921       C
ATOM    870  C   ALA A 118      39.151 -35.453 -25.642  1.00177.67           C
ANISOU  870  C   ALA A 118    31830  15128  20547   4023  -1130  -8711       C
ATOM    871  O   ALA A 118      38.137 -34.873 -26.032  1.00174.31           O
ANISOU  871  O   ALA A 118    31080  15169  19978   3474  -1147  -8870       O
ATOM    872  CB  ALA A 118      39.871 -36.558 -23.518  1.00181.07           C
ANISOU  872  CB  ALA A 118    32932  14345  21520   4585  -1053  -8021       C
ATOM    873  N   GLY A 127      25.166 -32.499 -16.100  1.00162.82           N
ANISOU  873  N   GLY A 127    31500  12348  18018  -2297  -2880  -5988       N
ATOM    874  CA  GLY A 127      24.701 -32.307 -14.739  1.00160.76           C
ANISOU  874  CA  GLY A 127    31316  11926  17838  -2526  -2840  -5356       C
ATOM    875  C   GLY A 127      25.564 -31.362 -13.922  1.00150.87           C
ANISOU  875  C   GLY A 127    29736  10886  16701  -1401  -2622  -4890       C
ATOM    876  O   GLY A 127      26.754 -31.202 -14.192  1.00154.57           O
ANISOU  876  O   GLY A 127    30126  11293  17312   -444  -2461  -4967       O
ATOM    877  N   CYS A 128      24.955 -30.727 -12.909  1.00147.24           N
ANISOU  877  N   CYS A 128    28632  11065  16249  -1524  -2504  -4227       N
ATOM    878  CA  CYS A 128      25.701 -29.797 -12.075  1.00147.92           C
ANISOU  878  CA  CYS A 128    28363  11420  16420   -557  -2271  -3815       C
ATOM    879  C   CYS A 128      26.275 -30.499 -10.848  1.00153.59           C
ANISOU  879  C   CYS A 128    29706  11218  17433   -365  -2130  -3407       C
ATOM    880  O   CYS A 128      25.708 -31.484 -10.363  1.00150.87           O
ANISOU  880  O   CYS A 128    29804  10289  17230  -1142  -2187  -3200       O
ATOM    881  CB  CYS A 128      24.806 -28.647 -11.621  1.00147.08           C
ANISOU  881  CB  CYS A 128    27189  12537  16158   -688  -2174  -3356       C
ATOM    882  SG  CYS A 128      24.567 -27.341 -12.841  1.00139.05           S
ANISOU  882  SG  CYS A 128    25269  12728  14837   -341  -2217  -3628       S
ATOM    883  N   PRO A 129      27.405 -30.009 -10.333  1.00155.48           N
ANISOU  883  N   PRO A 129    29972  11354  17749    644  -1942  -3258       N
ATOM    884  CA  PRO A 129      27.902 -30.520  -9.059  1.00158.61           C
ANISOU  884  CA  PRO A 129    30777  11127  18362    861  -1787  -2753       C
ATOM    885  C   PRO A 129      27.002 -30.073  -7.919  1.00157.66           C
ANISOU  885  C   PRO A 129    30000  11698  18205    393  -1675  -2117       C
ATOM    886  O   PRO A 129      26.333 -29.031  -8.013  1.00157.44           O
ANISOU  886  O   PRO A 129    29108  12719  17995    296  -1634  -2060       O
ATOM    887  CB  PRO A 129      29.304 -29.894  -8.949  1.00156.96           C
```

[2083]

```
ANISOU  887  CB  PRO A 129    30030  11437  18172   1956  -1548  -2645       C
ATOM    888  CG  PRO A 129      29.231 -28.667  -9.794  1.00151.09           C
ANISOU  888  CG  PRO A 129    28626  11568  17213   2253  -1559  -2954       C
ATOM    889  CD  PRO A 129      28.317 -29.018 -10.931  1.00153.22           C
ANISOU  889  CD  PRO A 129    29171  11689  17358   1572  -1834  -3466       C
ATOM    890  N   PRO A 130      26.952 -30.833  -6.827  1.00157.52           N
ANISOU  890  N   PRO A 130    30352  11146  18352    111  -1610  -1608       N
ATOM    891  CA  PRO A 130      26.054 -30.478  -5.721  1.00157.76           C
ANISOU  891  CA  PRO A 130    29747  11884  18312   -399  -1509  -1006       C
ATOM    892  C   PRO A 130      26.485 -29.201  -5.014  1.00156.77           C
ANISOU  892  C   PRO A 130    28869  12638  18060    348  -1255   -783       C
ATOM    893  O   PRO A 130      27.625 -28.743  -5.121  1.00156.19           O
ANISOU  893  O   PRO A 130    28878  12484  17982   1267  -1138   -969       O
ATOM    894  CB  PRO A 130      26.147 -31.688  -4.783  1.00156.16           C
ANISOU  894  CB  PRO A 130    30239  10773  18324   -755  -1497   -519       C
ATOM    895  CG  PRO A 130      27.459 -32.322  -5.113  1.00159.31           C
ANISOU  895  CG  PRO A 130    31499  10122  18911     11  -1485   -765       C
ATOM    896  CD  PRO A 130      27.655 -32.104  -6.586  1.00156.36           C
ANISOU  896  CD  PRO A 130    31226   9720  18466    211  -1627  -1541       C
ATOM    897  N   CYS A 131      25.537 -28.627  -4.272  1.00153.91           N
ANISOU  897  N   CYS A 131    27755  13147  17578    -93  -1159   -399       N
ATOM    898  CA  CYS A 131      25.732 -27.359  -3.582  1.00145.79           C
ANISOU  898  CA  CYS A 131    25942  13023  16429    473   -889   -233       C
ATOM    899  C   CYS A 131      25.137 -27.449  -2.184  1.00144.18           C
ANISOU  899  C   CYS A 131    25384  13225  16172     26   -752    381       C
ATOM    900  O   CYS A 131      24.447 -28.412  -1.837  1.00151.33           O
ANISOU  900  O   CYS A 131    26569  13812  17119   -781   -886    702       O
ATOM    901  CB  CYS A 131      25.102 -26.195  -4.362  1.00145.32           C
ANISOU  901  CB  CYS A 131    25105  13873  16237    528   -869   -526       C
ATOM    902  SG  CYS A 131      23.434 -26.535  -5.002  1.00156.59           S
ANISOU  902  SG  CYS A 131    26206  15743  17549   -608  -1115   -523       S
ATOM    903  N   GLY A 132      25.412 -26.427  -1.378  1.00133.22           N
ANISOU  903  N   GLY A 132    23370  12570  14679    527   -471    528       N
ATOM    904  CA  GLY A 132      24.903 -26.365  -0.019  1.00131.07           C
ANISOU  904  CA  GLY A 132    22650  12851  14300    178   -304   1065       C
ATOM    905  C   GLY A 132      25.988 -26.361   1.040  1.00116.11           C
ANISOU  905  C   GLY A 132    20885  10862  12368    762    -89   1332       C
ATOM    906  O   GLY A 132      26.585 -27.397   1.333  1.00120.25           O
ANISOU  906  O   GLY A 132    22103  10603  12983    780   -176   1590       O
ATOM    907  N   ASN A 136      30.350 -31.029   6.703  1.00147.46           N
ANISOU  907  N   ASN A 136    27109  12725  16195   1954    270   4732       N
ATOM    908  CA  ASN A 136      30.367 -30.409   8.023  1.00138.72           C
ANISOU  908  CA  ASN A 136    25188  12814  14707   1953    512   5139       C
ATOM    909  C   ASN A 136      29.086 -29.617   8.275  1.00135.85           C
ANISOU  909  C   ASN A 136    24007  13410  14199   1227    565   4998       C
ATOM    910  O   ASN A 136      28.358 -29.892   9.229  1.00140.40           O
ANISOU  910  O   ASN A 136    24237  14476  14632    590    595   5570       O
ATOM    911  CB  ASN A 136      31.593 -29.506   8.167  1.00138.57           C
ANISOU  911  CB  ASN A 136    24833  13393  14422   2898    738   4814       C
ATOM    912  CG  ASN A 136      32.079 -28.970   6.834  1.00125.09           C
ANISOU  912  CG  ASN A 136    23373  11287  12867   3433    677   3990       C
ATOM    913  OD1 ASN A 136      31.552 -27.985   6.320  1.00122.67           O
ANISOU  913  OD1 ASN A 136    22593  11472  12546   3302    719   3435       O
ATOM    914  ND2 ASN A 136      33.089 -29.621   6.265  1.00126.55           N
ANISOU  914  ND2 ASN A 136    24287  10599  13195   4063    586   3935       N
ATOM    915  N   PHE A 137      28.815 -28.635   7.418  1.00134.59           N
ANISOU  915  N   PHE A 137    23522  13547  14069   1351    585   4266       N
ATOM    916  CA  PHE A 137      27.587 -27.856   7.503  1.00132.41           C
ANISOU  916  CA  PHE A 137    22487  14130  13692    759    641   4090       C
ATOM    917  C   PHE A 137      27.130 -27.503   6.094  1.00131.78           C
ANISOU  917  C   PHE A 137    22534  13704  13831    712    482   3438       C
ATOM    918  O   PHE A 137      27.910 -27.545   5.138  1.00122.06           O
ANISOU  918  O   PHE A 137    21812  11805  12760   1265    397   3018       O
ATOM    919  CB  PHE A 137      27.775 -26.586   8.346  1.00125.61           C
ANISOU  919  CB  PHE A 137    20715  14510  12502   1088    988   3936       C
ATOM    920  CG  PHE A 137      28.434 -25.459   7.605  1.00121.83           C
ANISOU  920  CG  PHE A 137    20060  14187  12041   1813   1134   3202       C
ATOM    921  CD1 PHE A 137      29.794 -25.485   7.341  1.00118.90           C
```

[2084]

```
ANISOU  921  CD1 PHE A 137    20108  13405  11665   2594   1170   3028       C
ATOM    922  CD2 PHE A 137      27.693 -24.372   7.172  1.00122.01           C
ANISOU  922  CD2 PHE A 137    19489  14785  12084   1722   1244   2724       C
ATOM    923  CE1 PHE A 137      30.402 -24.450   6.658  1.00109.58           C
ANISOU  923  CE1 PHE A 137    18763  12386  10487   3205   1304   2380       C
ATOM    924  CE2 PHE A 137      28.295 -23.334   6.486  1.00114.60           C
ANISOU  924  CE2 PHE A 137    18411  13942  11190   2368   1390   2104       C
ATOM    925  CZ  PHE A 137      29.651 -23.373   6.231  1.00111.00           C
ANISOU  925  CZ  PHE A 137    18383  13076  10718   3077   1415   1928       C
ATOM    926  N   MET A 138      25.850 -27.154   5.976  1.00131.53           N
ANISOU  926  N   MET A 138    21990  14217  13768     48    445   3378       N
ATOM    927  CA  MET A 138      25.243 -26.857   4.687  1.00126.23           C
ANISOU  927  CA  MET A 138    21336  13374  13251   -109    283   2857       C
ATOM    928  C   MET A 138      24.270 -25.696   4.824  1.00123.08           C
ANISOU  928  C   MET A 138    19969  14098  12696   -301    453   2676       C
ATOM    929  O   MET A 138      23.689 -25.472   5.890  1.00124.80           O
ANISOU  929  O   MET A 138    19591  15116  12710   -649    613   3029       O
ATOM    930  CB  MET A 138      24.499 -28.070   4.117  1.00133.81           C
ANISOU  930  CB  MET A 138    22894  13561  14387   -923    -44   3030       C
ATOM    931  CG  MET A 138      25.381 -29.256   3.792  1.00137.93           C
ANISOU  931  CG  MET A 138    24461  12807  15139   -728   -208   3128       C
ATOM    932  SD  MET A 138      24.402 -30.742   3.519  1.00165.46           S
ANISOU  932  SD  MET A 138    28614  15433  18820  -1872   -514   3454       S
ATOM    933  CE  MET A 138      23.645 -30.946   5.132  1.00153.59           C
ANISOU  933  CE  MET A 138    26558  14708  17091  -2562   -397   4314       C
ATOM    934  N   LEU A 139      24.097 -24.965   3.727  1.00116.58           N
ANISOU  934  N   LEU A 139    18981  13347  11965    -47    426   2140       N
ATOM    935  CA  LEU A 139      23.100 -23.914   3.612  1.00114.33           C
ANISOU  935  CA  LEU A 139    17842  14004  11593   -189    564   1962       C
ATOM    936  C   LEU A 139      21.970 -24.379   2.703  1.00123.54           C
ANISOU  936  C   LEU A 139    19044  15091  12804   -903    272   1937       C
ATOM    937  O   LEU A 139      22.147 -25.258   1.853  1.00121.61           O
ANISOU  937  O   LEU A 139    19510  13999  12696  -1108    -12   1828       O
ATOM    938  CB  LEU A 139      23.711 -22.624   3.054  1.00112.37           C
ANISOU  938  CB  LEU A 139    17293  13997  11405    655    786   1429       C
ATOM    939  CG  LEU A 139      25.003 -22.126   3.699  1.00109.78           C
ANISOU  939  CG  LEU A 139    17012  13677  11024   1400   1060   1317       C
ATOM    940  CD1 LEU A 139      25.446 -20.818   3.052  1.00107.24           C
ANISOU  940  CD1 LEU A 139    16374  13590  10781   2104   1279    786       C
ATOM    941  CD2 LEU A 139      24.814 -21.960   5.191  1.00112.28           C
ANISOU  941  CD2 LEU A 139    16821  14725  11116   1204   1318   1672       C
ATOM    942  N   THR A 140      20.800 -23.772   2.884  1.00121.91           N
ANISOU  942  N   THR A 140    18038  15826  12458  -1282    359   2014       N
ATOM    943  CA  THR A 140      19.621 -24.133   2.107  1.00124.54           C
ANISOU  943  CA  THR A 140    18242  16331  12748  -2016    103   2028       C
ATOM    944  C   THR A 140      18.800 -22.885   1.831  1.00121.91           C
ANISOU  944  C   THR A 140    16972  17026  12323  -1822    286   1852       C
ATOM    945  O   THR A 140      18.310 -22.239   2.762  1.00121.72           O
ANISOU  945  O   THR A 140    16233  17856  12159  -1812    551   2036       O
ATOM    946  CB  THR A 140      18.773 -25.180   2.832  1.00132.52           C
ANISOU  946  CB  THR A 140    19307  17425  13618  -3033    -54   2562       C
ATOM    947  OG1 THR A 140      19.526 -26.390   2.968  1.00139.33           O
ANISOU  947  OG1 THR A 140    21119  17194  14626  -3190   -225   2751       O
ATOM    948  CG2 THR A 140      17.500 -25.468   2.049  1.00137.69           C
ANISOU  948  CG2 THR A 140    19725  18428  14164  -3852   -300   2554       C
ATOM    949  N   GLN A 141      18.661 -22.550   0.554  1.00132.25           N
ANISOU  949  N   GLN A 141    18274  18269  13705  -1641    157   1504       N
ATOM    950  CA  GLN A 141      17.765 -21.512   0.090  1.00123.64           C
ANISOU  950  CA  GLN A 141    16336  18102  12538  -1514    277   1408       C
ATOM    951  C   GLN A 141      16.728 -22.129  -0.840  1.00125.23           C
ANISOU  951  C   GLN A 141    16493  18488  12599  -2301    -64   1452       C
ATOM    952  O   GLN A 141      16.991 -23.166  -1.455  1.00130.38           O
ANISOU  952  O   GLN A 141    17888  18358  13291  -2719   -373   1352       O
ATOM    953  CB  GLN A 141      18.530 -20.404  -0.644  1.00117.34           C
ANISOU  953  CB  GLN A 141    15456  17207  11921   -533    461    994       C
ATOM    954  CG  GLN A 141      20.006 -20.699  -0.853  1.00112.21           C
ANISOU  954  CG  GLN A 141    15623  15570  11441      6    427    731       C
ATOM    955  CD  GLN A 141      20.715 -19.594  -1.614  1.00106.25           C
```

[2085]

```
ANISOU  955  CD  GLN A 141    14751  14782  10835    897    600    346       C
ATOM    956  OE1 GLN A 141      21.906 -19.690  -1.908  1.00102.60           O
ANISOU  956  OE1 GLN A 141    14860  13644  10480   1393    584     98       O
ATOM    957  NE2 GLN A 141      19.982 -18.536  -1.940  1.00102.44           N
ANISOU  957  NE2 GLN A 141    13517  15048  10358   1114    776    324       N
ATOM    958  N   PRO A 142      15.539 -21.536  -0.946  1.00132.51           N
ANISOU  958  N   PRO A 142    16551  20460  13338  -2535     -4   1591       N
ATOM    959  CA  PRO A 142      14.532 -22.085  -1.863  1.00138.46           C
ANISOU  959  CA  PRO A 142    17180  21540  13889  -3319   -327   1628       C
ATOM    960  C   PRO A 142      15.037 -22.077  -3.298  1.00136.44           C
ANISOU  960  C   PRO A 142    17322  20790  13728  -3015   -524   1215       C
ATOM    961  O   PRO A 142      15.901 -21.279  -3.671  1.00130.07           O
ANISOU  961  O   PRO A 142    16578  19726  13118  -2098   -358    947       O
ATOM    962  CB  PRO A 142      13.331 -21.148  -1.680  1.00140.08           C
ANISOU  962  CB  PRO A 142    16254  23083  13886  -3315   -138   1847       C
ATOM    963  CG  PRO A 142      13.900 -19.899  -1.087  1.00133.57           C
ANISOU  963  CG  PRO A 142    15056  22436  13258  -2284    299   1753       C
ATOM    964  CD  PRO A 142      15.050 -20.341  -0.240  1.00130.49           C
ANISOU  964  CD  PRO A 142    15371  21175  13033  -2091    378   1707       C
ATOM    965  N   HIS A 143      14.498 -22.998  -4.103  1.00140.27           N
ANISOU  965  N   HIS A 143    18081  21165  14049  -3847   -878   1151       N
ATOM    966  CA  HIS A 143      14.953 -23.134  -5.485  1.00136.62           C
ANISOU  966  CA  HIS A 143    18023  20266  13621  -3676  -1093    724       C
ATOM    967  C   HIS A 143      14.713 -21.851  -6.269  1.00132.95           C
ANISOU  967  C   HIS A 143    16783  20625  13107  -2981   -957    639       C
ATOM    968  O   HIS A 143      15.612 -21.350  -6.954  1.00127.74           O
ANISOU  968  O   HIS A 143    16356  19565  12614  -2213   -910    335       O
ATOM    969  CB  HIS A 143      14.252 -24.317  -6.155  1.00144.87           C
ANISOU  969  CB  HIS A 143    19392  21208  14444  -4814  -1468    647       C
ATOM    970  CG  HIS A 143      14.757 -24.618  -7.532  1.00146.37           C
ANISOU  970  CG  HIS A 143    20074  20900  14637  -4736  -1699    148       C
ATOM    971  ND1 HIS A 143      16.088 -24.857  -7.802  1.00146.96           N
ANISOU  971  ND1 HIS A 143    20984  19870  14985  -4124  -1701   -205       N
ATOM    972  CD2 HIS A 143      14.109 -24.720  -8.718  1.00149.13           C
ANISOU  972  CD2 HIS A 143    20159  21793  14710  -5201  -1931    -64       C
ATOM    973  CE1 HIS A 143      16.237 -25.093  -9.094  1.00147.34           C
ANISOU  973  CE1 HIS A 143    21272  19776  14934  -4208  -1921   -635       C
ATOM    974  NE2 HIS A 143      15.052 -25.017  -9.672  1.00147.39           N
ANISOU  974  NE2 HIS A 143    20621  20779  14603  -4873  -2066   -563       N
ATOM    975  N   SER A 144      13.507 -21.298  -6.170  1.00136.01           N
ANISOU  975  N   SER A 144    16226  22191  13263  -3217   -881    942       N
ATOM    976  CA  SER A 144      13.180 -20.060  -6.859  1.00133.59           C
ANISOU  976  CA  SER A 144    15121  22714  12924  -2532   -722    965       C
ATOM    977  C   SER A 144      11.964 -19.434  -6.195  1.00136.69           C
ANISOU  977  C   SER A 144    14494  24312  13131  -2655   -517   1389       C
ATOM    978  O   SER A 144      11.094 -20.136  -5.675  1.00142.67           O
ANISOU  978  O   SER A 144    15077  25499  13633  -3556   -646   1633       O
ATOM    979  CB  SER A 144      12.906 -20.297  -8.348  1.00136.67           C
ANISOU  979  CB  SER A 144    15486  23351  13092  -2816  -1034    759       C
ATOM    980  OG  SER A 144      11.764 -21.116  -8.531  1.00144.89           O
ANISOU  980  OG  SER A 144    16289  25010  13752  -3944  -1308    902       O
ATOM    981  N   VAL A 145      11.923 -18.102  -6.213  1.00133.01           N
ANISOU  981  N   VAL A 145    13361  24373  12803  -1732   -179   1475       N
ATOM    982  CA  VAL A 145      10.781 -17.344  -5.720  1.00136.11           C
ANISOU  982  CA  VAL A 145    12713  25960  13044  -1655     64   1850       C
ATOM    983  C   VAL A 145      10.478 -16.233  -6.713  1.00135.48           C
ANISOU  983  C   VAL A 145    11953  26540  12982   -924    190   1927       C
ATOM    984  O   VAL A 145      11.380 -15.667  -7.336  1.00130.30           O
ANISOU  984  O   VAL A 145    11593  25318  12595   -168    276   1703       O
ATOM    985  CB  VAL A 145      11.021 -16.761  -4.308  1.00132.99           C
ANISOU  985  CB  VAL A 145    12157  25509  12863  -1188    485   1929       C
ATOM    986  CG1 VAL A 145      11.212 -17.877  -3.303  1.00138.71           C
ANISOU  986  CG1 VAL A 145    13448  25741  13513  -1952    351   1967       C
ATOM    987  CG2 VAL A 145      12.220 -15.827  -4.306  1.00125.32           C
ANISOU  987  CG2 VAL A 145    11483  23822  12312    -99    803   1646       C
ATOM    988  N   SER A 146       9.193 -15.923  -6.859  1.00141.24           N
ANISOU  988  N   SER A 146    11740  28519  13406  -1149    206   2287       N
ATOM    989  CA  SER A 146       8.743 -14.932  -7.822  1.00144.67           C
```

[2086]

```
ANISOU  989  CA  SER A 146    11430  29734  13805   -507    309   2478       C
ATOM    990  C   SER A 146       7.789 -13.950  -7.159  1.00151.14           C
ANISOU  990  C   SER A 146    11224  31592  14609    -42    703   2866       C
ATOM    991  O   SER A 146       7.133 -14.270  -6.164  1.00151.62           O
ANISOU  991  O   SER A 146    10998  32117  14493   -538    765   3025       O
ATOM    992  CB  SER A 146       8.055 -15.590  -9.025  1.00148.18           C
ANISOU  992  CB  SER A 146    11665  30852  13787  -1259   -130   2549       C
ATOM    993  OG  SER A 146       6.973 -16.407  -8.612  1.00155.29           O
ANISOU  993  OG  SER A 146    12229  32523  14250  -2332   -334   2756       O
ATOM    994  N   GLU A 147       7.720 -12.749  -7.730  1.00159.09           N
ANISOU  994  N   GLU A 147    11677  32962  15808    932    980   3031       N
ATOM    995  CA  GLU A 147       6.855 -11.687  -7.235  1.00160.90           C
ANISOU  995  CA  GLU A 147    10924  34124  16087   1562   1408   3393       C
ATOM    996  C   GLU A 147       6.762 -10.596  -8.293  1.00161.28           C
ANISOU  996  C   GLU A 147    10644  34348  16288   2458   1531   3601       C
ATOM    997  O   GLU A 147       7.700 -10.384  -9.070  1.00156.72           O
ANISOU  997  O   GLU A 147    10444  33150  15953   2900   1507   3431       O
ATOM    998  CB  GLU A 147       7.377 -11.112  -5.910  1.00161.74           C
ANISOU  998  CB  GLU A 147    11208  33648  16597   2108   1881   3199       C
ATOM    999  CG  GLU A 147       6.494 -10.035  -5.291  1.00164.07           C
ANISOU  999  CG  GLU A 147    11246  34095  16999   2619   2139   3356       C
ATOM   1000  CD  GLU A 147       5.055 -10.486  -5.106  1.00168.55           C
ANISOU 1000  CD  GLU A 147    11130  35890  17020   1947   1945   3721       C
ATOM   1001  OE1 GLU A 147       4.841 -11.620  -4.628  1.00170.42           O
ANISOU 1001  OE1 GLU A 147    11175  36676  16900    980   1762   3763       O
ATOM   1002  OE2 GLU A 147       4.138  -9.707  -5.447  1.00173.52           O
ANISOU 1002  OE2 GLU A 147    11448  36919  17564   2336   1975   3984       O
ATOM   1003  N   SER A 148       5.616  -9.918  -8.317  1.00169.14           N
ANISOU 1003  N   SER A 148    17050  25379  21836   2415   1126  -1931       N
ATOM   1004  CA  SER A 148       5.397  -8.813  -9.230  1.00167.03           C
ANISOU 1004  CA  SER A 148    16561  24852  22053   3205    941  -1787       C
ATOM   1005  C   SER A 148       6.271  -7.621  -8.846  1.00169.18           C
ANISOU 1005  C   SER A 148    17053  24302  22927   3729    969  -1848       C
ATOM   1006  O   SER A 148       6.665  -7.474  -7.686  1.00170.18           O
ANISOU 1006  O   SER A 148    17253  24315  23094   3591   1171  -2216       O
ATOM   1007  CB  SER A 148       3.925  -8.409  -9.220  1.00170.32           C
ANISOU 1007  CB  SER A 148    16164  26105  22445   3524    908  -2140       C
ATOM   1008  OG  SER A 148       3.097  -9.493  -9.605  1.00171.38           O
ANISOU 1008  OG  SER A 148    16065  27026  22027   2978    857  -2066       O
ATOM   1009  N   PRO A 149       6.593  -6.756  -9.809  1.00161.95           N
ANISOU 1009  N   PRO A 149    16250  22814  22471   4294    741  -1467       N
ATOM   1010  CA  PRO A 149       7.382  -5.561  -9.493  1.00158.56           C
ANISOU 1010  CA  PRO A 149    16035  21540  22671   4749    700  -1486       C
ATOM   1011  C   PRO A 149       6.659  -4.656  -8.505  1.00158.75           C
ANISOU 1011  C   PRO A 149    15576  21718  23025   5206    751  -2170       C
ATOM   1012  O   PRO A 149       5.433  -4.677  -8.375  1.00159.93           O
ANISOU 1012  O   PRO A 149    15117  22637  23012   5389    756  -2541       O
ATOM   1013  CB  PRO A 149       7.552  -4.873 -10.854  1.00153.57           C
ANISOU 1013  CB  PRO A 149    15505  20452  22394   5217    384   -869       C
ATOM   1014  CG  PRO A 149       7.365  -5.962 -11.855  1.00154.36           C
ANISOU 1014  CG  PRO A 149    15659  21050  21939   4857    328   -472       C
ATOM   1015  CD  PRO A 149       6.349  -6.888 -11.255  1.00157.16           C
ANISOU 1015  CD  PRO A 149    15633  22287  21793   4460    486   -941       C
ATOM   1016  N   GLY A 150       7.449  -3.849  -7.796  1.00156.03           N
ANISOU 1016  N   GLY A 150    15481  20669  23135   5402    777  -2380       N
ATOM   1017  CA  GLY A 150       6.929  -2.942  -6.797  1.00160.58           C
ANISOU 1017  CA  GLY A 150    15662  21297  24053   5882    801  -3122       C
ATOM   1018  C   GLY A 150       6.607  -3.569  -5.459  1.00160.57           C
ANISOU 1018  C   GLY A 150    15385  22080  23546   5458   1147  -3776       C
ATOM   1019  O   GLY A 150       6.456  -2.841  -4.471  1.00164.89           O
ANISOU 1019  O   GLY A 150    15683  22639  24329   5800   1207  -4453       O
ATOM   1020  N   LYS A 151       6.498  -4.893  -5.389  1.00157.96           N
ANISOU 1020  N   LYS A 151    15094  22407  22516   4714   1346  -3597       N
ATOM   1021  CA  LYS A 151       6.204  -5.574  -4.141  1.00153.45           C
ANISOU 1021  CA  LYS A 151    14282  22629  21393   4187   1653  -4085       C
ATOM   1022  C   LYS A 151       7.504  -5.979  -3.447  1.00148.09           C
ANISOU 1022  C   LYS A 151    14217  21445  20604   3684   1799  -3974       C
ATOM   1023  O   LYS A 151       8.608  -5.723  -3.933  1.00147.16           O
```

[2087]

```
ANISOU 1023  O   LYS A 151    14659  20419  20834   3756   1677  -3562       O
ATOM   1024  CB  LYS A 151       5.307  -6.784  -4.395  1.00155.43           C
ANISOU 1024  CB  LYS A 151    14240  23854  20964   3596   1727  -3925       C
ATOM   1025  CG  LYS A 151       3.997  -6.449  -5.089  1.00158.18           C
ANISOU 1025  CG  LYS A 151    13919  24823  21357   4058   1579  -4036       C
ATOM   1026  CD  LYS A 151       3.161  -5.491  -4.257  1.00163.99           C
ANISOU 1026  CD  LYS A 151    13938  26102  22270   4672   1653  -4835       C
ATOM   1027  N   THR A 152       7.370  -6.624  -2.294  1.00145.40           N
ANISOU 1027  N   THR A 152    13736  21773  19735   3150   2056  -4324       N
ATOM   1028  CA  THR A 152       8.505  -7.018  -1.474  1.00143.48           C
ANISOU 1028  CA  THR A 152    13999  21190  19327   2685   2190  -4287       C
ATOM   1029  C   THR A 152       8.665  -8.532  -1.506  1.00137.06           C
ANISOU 1029  C   THR A 152    13508  20702  17868   1829   2240  -3838       C
ATOM   1030  O   THR A 152       7.674  -9.269  -1.530  1.00140.01           O
ANISOU 1030  O   THR A 152    13529  21897  17771   1442   2279  -3829       O
ATOM   1031  CB  THR A 152       8.325  -6.535  -0.030  1.00145.58           C
ANISOU 1031  CB  THR A 152    13896  21941  19479   2746   2407  -5040       C
ATOM   1032  OG1 THR A 152       8.107  -5.119  -0.027  1.00150.50           O
ANISOU 1032  OG1 THR A 152    14229  22202  20753   3609   2291  -5536       O
ATOM   1033  CG2 THR A 152       9.557  -6.850   0.806  1.00141.54           C
ANISOU 1033  CG2 THR A 152    13907  21047  18824   2315   2514  -4995       C
ATOM   1034  N   VAL A 153       9.915  -8.992  -1.516  1.00131.52           N
ANISOU 1034  N   VAL A 153    13474  19342  17157   1536   2201  -3472       N
ATOM   1035  CA  VAL A 153      10.225 -10.414  -1.489  1.00128.05           C
ANISOU 1035  CA  VAL A 153    13448  19033  16173    788   2174  -3073       C
ATOM   1036  C   VAL A 153      11.363 -10.642  -0.503  1.00125.34           C
ANISOU 1036  C   VAL A 153    13538  18380  15705    489   2264  -3110       C
ATOM   1037  O   VAL A 153      12.201  -9.764  -0.277  1.00124.26           O
ANISOU 1037  O   VAL A 153    13545  17683  15985    876   2287  -3262       O
ATOM   1038  CB  VAL A 153      10.585 -10.950  -2.897  1.00128.04           C
ANISOU 1038  CB  VAL A 153    13860  18537  16253    813   1929  -2494       C
ATOM   1039  CG1 VAL A 153      11.938 -10.421  -3.350  1.00123.02           C
ANISOU 1039  CG1 VAL A 153    13703  16996  16045   1169   1845  -2248       C
ATOM   1040  CG2 VAL A 153      10.551 -12.474  -2.928  1.00126.02           C
ANISOU 1040  CG2 VAL A 153    13942  18505  15434     76   1827  -2186       C
ATOM   1041  N   THR A 154      11.374 -11.828   0.103  1.00124.87           N
ANISOU 1041  N   THR A 154    13686  18692  15068   -231   2282  -2954       N
ATOM   1042  CA  THR A 154      12.417 -12.234   1.033  1.00122.66           C
ANISOU 1042  CA  THR A 154    13839  18186  14579   -576   2321  -2916       C
ATOM   1043  C   THR A 154      12.893 -13.629   0.653  1.00119.51           C
ANISOU 1043  C   THR A 154    14042  17522  13844  -1108   2095  -2382       C
ATOM   1044  O   THR A 154      12.084 -14.498   0.312  1.00121.20           O
ANISOU 1044  O   THR A 154    14211  18105  13735  -1533   1981  -2176       O
ATOM   1045  CB  THR A 154      11.913 -12.208   2.495  1.00127.26           C
ANISOU 1045  CB  THR A 154    14019  19603  14729   -935   2556  -3344       C
ATOM   1046  OG1 THR A 154      11.530 -10.873   2.850  1.00130.81           O
ANISOU 1046  OG1 THR A 154    13925  20249  15527   -333   2726  -3953       O
ATOM   1047  CG2 THR A 154      12.993 -12.685   3.459  1.00125.31           C
ANISOU 1047  CG2 THR A 154    14233  19165  14216  -1317   2564  -3254       C
ATOM   1048  N   ILE A 155      14.207 -13.835   0.698  1.00115.52           N
ANISOU 1048  N   ILE A 155    14093  16369  13430  -1064   1995  -2186       N
ATOM   1049  CA  ILE A 155      14.827 -15.104   0.331  1.00117.87           C
ANISOU 1049  CA  ILE A 155    15013  16299  13472  -1420   1724  -1748       C
ATOM   1050  C   ILE A 155      15.522 -15.674   1.560  1.00120.22           C
ANISOU 1050  C   ILE A 155    15630  16626  13420  -1860   1719  -1724       C
ATOM   1051  O   ILE A 155      16.453 -15.058   2.094  1.00112.90           O
ANISOU 1051  O   ILE A 155    14779  15452  12667  -1608   1822  -1887       O
ATOM   1052  CB  ILE A 155      15.820 -14.942  -0.830  1.00110.65           C
ANISOU 1052  CB  ILE A 155    14458  14664  12922   -919   1561  -1514       C
ATOM   1053  CG1 ILE A 155      15.072 -14.636  -2.131  1.00115.46           C
ANISOU 1053  CG1 ILE A 155    14809  15309  13753   -589   1497  -1425       C
ATOM   1054  CG2 ILE A 155      16.682 -16.189  -0.968  1.00109.10           C
ANISOU 1054  CG2 ILE A 155    14914  14081  12459  -1181   1274  -1200       C
ATOM   1055  CD1 ILE A 155      15.976 -14.449  -3.331  1.00105.71           C
ANISOU 1055  CD1 ILE A 155    13846  13523  12794   -122   1351  -1167       C
ATOM   1056  N   SER A 156      15.084 -16.855   1.991  1.00126.62           N
ANISOU 1056  N   SER A 156    16642  17728  13741  -2546   1565  -1488       N
ATOM   1057  CA  SER A 156      15.632 -17.489   3.181  1.00127.83           C
```

[2088]

```
ANISOU 1057  CA  SER A 156    17105  17967  13499  -3037   1512  -1380       C
ATOM   1058  C   SER A 156      16.910 -18.257   2.864  1.00124.49           C
ANISOU 1058  C   SER A 156    17417  16763  13119  -2947   1183  -1065       C
ATOM   1059  O   SER A 156      17.107 -18.757   1.755  1.00128.79           O
ANISOU 1059  O   SER A 156    18285  16826  13821  -2749    925   -863       O
ATOM   1060  CB  SER A 156      14.606 -18.438   3.805  1.00138.29           C
ANISOU 1060  CB  SER A 156    18341  19941  14261  -3886   1439  -1177       C
ATOM   1061  OG  SER A 156      13.526 -17.725   4.383  1.00139.37           O
ANISOU 1061  OG  SER A 156    17717  20998  14238  -3988   1781  -1536       O
ATOM   1062  N   CYS A 157      17.779 -18.354   3.870  1.00127.49           N
ANISOU 1062  N   CYS A 157    18029  17087  13325  -3068   1180  -1062       N
ATOM   1063  CA  CYS A 157      19.042 -19.087   3.777  1.00116.76           C
ANISOU 1063  CA  CYS A 157    17325  15082  11955  -2963    856   -806       C
ATOM   1064  C   CYS A 157      19.285 -19.699   5.154  1.00126.02           C
ANISOU 1064  C   CYS A 157    18713  16514  12654  -3529    771   -657       C
ATOM   1065  O   CYS A 157      19.760 -19.016   6.066  1.00116.28           O
ANISOU 1065  O   CYS A 157    17269  15542  11370  -3448    998   -896       O
ATOM   1066  CB  CYS A 157      20.185 -18.169   3.357  1.00111.61           C
ANISOU 1066  CB  CYS A 157    16650  14026  11730  -2256    969  -1001       C
ATOM   1067  SG  CYS A 157      21.829 -18.921   3.270  1.00104.55           S
ANISOU 1067  SG  CYS A 157    16416  12503  10805  -2010    613   -781       S
ATOM   1068  N   THR A 158      18.950 -20.978   5.302  1.00120.61           N
ANISOU 1068  N   THR A 158    18455  15753  11619  -4124    412   -251       N
ATOM   1069  CA  THR A 158      18.990 -21.661   6.590  1.00122.90           C
ANISOU 1069  CA  THR A 158    18953  16350  11394  -4794    282     16       C
ATOM   1070  C   THR A 158      20.259 -22.498   6.703  1.00125.06           C
ANISOU 1070  C   THR A 158    19961  15912  11644  -4662   -164    300       C
ATOM   1071  O   THR A 158      20.600 -23.249   5.782  1.00123.23           O
ANISOU 1071  O   THR A 158    20232  14985  11604  -4441   -561    473       O
ATOM   1072  CB  THR A 158      17.748 -22.538   6.768  1.00127.10           C
ANISOU 1072  CB  THR A 158    19479  17281  11533  -5652    124    360       C
ATOM   1073  OG1 THR A 158      16.591 -21.705   6.915  1.00128.82           O
ANISOU 1073  OG1 THR A 158    18901  18374  11672  -5778    575     45       O
ATOM   1074  CG2 THR A 158      17.878 -23.430   7.988  1.00132.29           C
ANISOU 1074  CG2 THR A 158    20483  18143  11637  -6417   -127    800       C
ATOM   1075  N   ARG A 159      20.954 -22.364   7.833  1.00131.02           N
ANISOU 1075  N   ARG A 159    20753  16883  12146  -4756   -116    303       N
ATOM   1076  CA  ARG A 159      22.201 -23.081   8.076  1.00133.54           C
ANISOU 1076  CA  ARG A 159    21704  16621  12414  -4582   -535    544       C
ATOM   1077  C   ARG A 159      21.927 -24.370   8.841  1.00132.85           C
ANISOU 1077  C   ARG A 159    22128  16503  11846  -5371   -988   1112       C
ATOM   1078  O   ARG A 159      21.170 -24.371   9.818  1.00132.27           O
ANISOU 1078  O   ARG A 159    21774  17163  11318  -6076   -821   1263       O
ATOM   1079  CB  ARG A 159      23.181 -22.205   8.855  1.00120.01           C
ANISOU 1079  CB  ARG A 159    19748  15152  10698  -4231   -275    244       C
ATOM   1080  CG  ARG A 159      24.483 -22.898   9.203  1.00120.78           C
ANISOU 1080  CG  ARG A 159    20417  14776  10698  -4032   -700    473       C
ATOM   1081  CD  ARG A 159      25.461 -21.907   9.793  1.00126.02           C
ANISOU 1081  CD  ARG A 159    20763  15696  11424  -3635   -418    110       C
ATOM   1082  NE  ARG A 159      26.799 -22.467   9.937  1.00118.19           N
ANISOU 1082  NE  ARG A 159    20238  14269  10401  -3294   -813    263       N
ATOM   1083  CZ  ARG A 159      27.895 -21.728  10.044  1.00115.62           C
ANISOU 1083  CZ  ARG A 159    19713  13971  10245  -2794   -673    -40       C
ATOM   1084  NH1 ARG A 159      27.798 -20.406  10.011  1.00113.01           N
ANISOU 1084  NH1 ARG A 159    18792  13978  10169  -2610   -180   -491       N
ATOM   1085  NH2 ARG A 159      29.082 -22.306  10.169  1.00116.22           N
ANISOU 1085  NH2 ARG A 159    20179  13726  10254  -2474  -1059    101       N
ATOM   1086  N   SER A 160      22.553 -25.462   8.399  1.00139.14           N
ANISOU 1086  N   SER A 160    23663  16468  12732  -5243  -1588   1426       N
ATOM   1087  CA  SER A 160      22.268 -26.779   8.972  1.00140.66           C
ANISOU 1087  CA  SER A 160    24467  16422  12557  -6001  -2146   2036       C
ATOM   1088  C   SER A 160      22.954 -26.963  10.323  1.00145.76           C
ANISOU 1088  C   SER A 160    25282  17317  12782  -6265  -2266   2304       C
ATOM   1089  O   SER A 160      22.292 -27.090  11.359  1.00143.75           O
ANISOU 1089  O   SER A 160    24850  17749  12018  -7081  -2172   2614       O
ATOM   1090  CB  SER A 160      22.683 -27.878   7.988  1.00136.29           C
ANISOU 1090  CB  SER A 160    24683  14802  12297  -5694  -2818   2205       C
ATOM   1091  OG  SER A 160      24.053 -27.774   7.641  1.00132.81           O
```

[2089]

```
ANISOU 1091  OG  SER A 160    24476  13864  12120  -4790  -2969   1952       O
ATOM   1092  N   SER A 161      24.285 -26.980  10.330  1.00151.07           N
ANISOU 1092  N   SER A 161    26256  17527  13615  -5586  -2475   2190       N
ATOM   1093  CA  SER A 161      25.056 -27.226  11.539  1.00150.73           C
ANISOU 1093  CA  SER A 161    26427  17656  13187  -5749  -2671   2453       C
ATOM   1094  C   SER A 161      25.922 -26.018  11.870  1.00146.05           C
ANISOU 1094  C   SER A 161    25302  17510  12679  -5147  -2188   1924       C
ATOM   1095  O   SER A 161      26.348 -25.272  10.984  1.00141.22           O
ANISOU 1095  O   SER A 161    24421  16712  12524  -4427  -1927   1447       O
ATOM   1096  CB  SER A 161      25.938 -28.473  11.391  1.00154.00           C
ANISOU 1096  CB  SER A 161    27735  17107  13670  -5509  -3483   2838       C
ATOM   1097  OG  SER A 161      26.521 -28.835  12.631  1.00158.87           O
ANISOU 1097  OG  SER A 161    28596  17920  13849  -5799  -3745   3219       O
ATOM   1098  N   GLY A 162      26.185 -25.839  13.161  1.00154.10           N
ANISOU 1098  N   GLY A 162    26177  19141  13234  -5492  -2099   2037       N
ATOM   1099  CA  GLY A 162      26.962 -24.708  13.624  1.00150.55           C
ANISOU 1099  CA  GLY A 162    25225  19161  12817  -5039  -1678   1529       C
ATOM   1100  C   GLY A 162      26.141 -23.439  13.711  1.00148.32           C
ANISOU 1100  C   GLY A 162    24136  19635  12584  -5128   -979   1006       C
ATOM   1101  O   GLY A 162      25.290 -23.189  12.851  1.00146.18           O
ANISOU 1101  O   GLY A 162    23651  19283  12607  -5101   -771    855       O
ATOM   1102  N   SER A 163      26.383 -22.636  14.747  1.00145.22           N
ANISOU 1102  N   SER A 163    23290  19982  11904  -5204   -647    695       N
ATOM   1103  CA  SER A 163      25.649 -21.390  14.915  1.00144.13           C
ANISOU 1103  CA  SER A 163    22389  20548  11825  -5209    -32    104       C
ATOM   1104  C   SER A 163      25.865 -20.466  13.722  1.00137.85           C
ANISOU 1104  C   SER A 163    21356  19261  11762  -4474    216   -382       C
ATOM   1105  O   SER A 163      26.971 -20.362  13.185  1.00134.30           O
ANISOU 1105  O   SER A 163    21119  18235  11672  -3901     60   -454       O
ATOM   1106  CB  SER A 163      26.085 -20.692  16.199  1.00146.64           C
ANISOU 1106  CB  SER A 163    22323  21644  11750  -5298    203   -234       C
ATOM   1107  OG  SER A 163      25.394 -19.467  16.361  1.00150.20           O
ANISOU 1107  OG  SER A 163    22053  22719  12297  -5218    747   -899       O
ATOM   1108  N   LEU A 164      24.789 -19.795  13.306  1.00135.02           N
ANISOU 1108  N   LEU A 164    20522  19188  11593  -4504    589   -692       N
ATOM   1109  CA  LEU A 164      24.879 -18.868  12.184  1.00127.34           C
ANISOU 1109  CA  LEU A 164    19303  17782  11296  -3862    812  -1091       C
ATOM   1110  C   LEU A 164      25.346 -17.488  12.629  1.00120.91           C
ANISOU 1110  C   LEU A 164    17998  17237  10705  -3505   1162  -1721       C
ATOM   1111  O   LEU A 164      26.005 -16.783  11.857  1.00115.72           O
ANISOU 1111  O   LEU A 164    17287  16082  10598  -2953   1217  -1945       O
ATOM   1112  CB  LEU A 164      23.525 -18.779  11.474  1.00120.72           C
ANISOU 1112  CB  LEU A 164    18199  17072  10598  -4001    990  -1120       C
ATOM   1113  CG  LEU A 164      23.434 -18.025  10.145  1.00116.46           C
ANISOU 1113  CG  LEU A 164    17477  16048  10725  -3400   1137  -1373       C
ATOM   1114  CD1 LEU A 164      22.396 -18.674   9.245  1.00116.34           C
ANISOU 1114  CD1 LEU A 164    17555  15903  10748  -3594   1029  -1092       C
ATOM   1115  CD2 LEU A 164      23.083 -16.568  10.375  1.00116.25           C
ANISOU 1115  CD2 LEU A 164    16804  16399  10965  -3126   1569  -1999       C
ATOM   1116  N   ALA A 165      25.021 -17.088  13.860  1.00123.82           N
ANISOU 1116  N   ALA A 165    18001  18406  10641  -3837   1378  -2015       N
ATOM   1117  CA  ALA A 165      25.487 -15.809  14.378  1.00123.94           C
ANISOU 1117  CA  ALA A 165    17587  18650  10855  -3518   1647  -2677       C
ATOM   1118  C   ALA A 165      26.977 -15.813  14.687  1.00122.57           C
ANISOU 1118  C   ALA A 165    17681  18177  10715  -3299   1437  -2645       C
ATOM   1119  O   ALA A 165      27.558 -14.736  14.859  1.00121.99           O
ANISOU 1119  O   ALA A 165    17323  18072  10954  -2983   1594  -3162       O
ATOM   1120  CB  ALA A 165      24.696 -15.429  15.631  1.00129.69           C
ANISOU 1120  CB  ALA A 165    17816  20423  11036  -3910   1920  -3074       C
ATOM   1121  N   ASN A 166      27.604 -16.988  14.757  1.00122.66           N
ANISOU 1121  N   ASN A 166    18224  17953  10428  -3453   1052  -2066       N
ATOM   1122  CA  ASN A 166      29.038 -17.086  14.987  1.00121.71           C
ANISOU 1122  CA  ASN A 166    18343  17583  10320  -3193    811  -2011       C
ATOM   1123  C   ASN A 166      29.863 -16.851  13.723  1.00116.73           C
ANISOU 1123  C   ASN A 166    17848  16188  10317  -2602    717  -1999       C
ATOM   1124  O   ASN A 166      31.082 -16.672  13.824  1.00115.95           O
ANISOU 1124  O   ASN A 166    17795  15958  10301  -2326    586  -2069       O
ATOM   1125  CB  ASN A 166      29.380 -18.459  15.583  1.00124.79           C
```

[2090]

```
ANISOU 1125  CB  ASN A 166    19255  18021  10138  -3532    375  -1395       C
ATOM   1126  CG  ASN A 166      28.846 -18.640  17.009  1.00130.69           C
ANISOU 1126  CG  ASN A 166    19836  19669  10151  -4162    444  -1357       C
ATOM   1127  OD1 ASN A 166      28.004 -17.870  17.479  1.00132.66           O
ANISOU 1127  OD1 ASN A 166    19565  20566  10274  -4365    836  -1799       O
ATOM   1128  ND2 ASN A 166      29.336 -19.668  17.695  1.00134.18           N
ANISOU 1128  ND2 ASN A 166    20710  20191  10083  -4450     39   -828       N
ATOM   1129  N   TYR A 167      29.241 -16.841  12.544  1.00116.19           N
ANISOU 1129  N   TYR A 167    17798  15703  10645  -2418    780  -1911       N
ATOM   1130  CA  TYR A 167      29.967 -16.677  11.288  1.00110.65           C
ANISOU 1130  CA  TYR A 167    17197  14391  10453  -1890    693  -1852       C
ATOM   1131  C   TYR A 167      29.190 -15.748  10.372  1.00107.58           C
ANISOU 1131  C   TYR A 167    16467  13834  10575  -1702    996  -2090       C
ATOM   1132  O   TYR A 167      28.014 -15.993  10.093  1.00108.06           O
ANISOU 1132  O   TYR A 167    16495  13968  10594  -1894   1076  -2007       O
ATOM   1133  CB  TYR A 167      30.196 -18.025  10.600  1.00109.13           C
ANISOU 1133  CB  TYR A 167    17554  13766  10143  -1785    278  -1345       C
ATOM   1134  CG  TYR A 167      30.715 -19.094  11.530  1.00112.49           C
ANISOU 1134  CG  TYR A 167    18395  14298  10047  -2013   -105  -1025       C
ATOM   1135  CD1 TYR A 167      29.843 -19.946  12.195  1.00117.72           C
ANISOU 1135  CD1 TYR A 167    19301  15169  10257  -2577   -252   -699       C
ATOM   1136  CD2 TYR A 167      32.075 -19.243  11.760  1.00120.33           C
ANISOU 1136  CD2 TYR A 167    19516  15221  10982  -1693   -341  -1015       C
ATOM   1137  CE1 TYR A 167      30.306 -20.926  13.048  1.00120.03           C
ANISOU 1137  CE1 TYR A 167    20013  15516  10076  -2818   -656   -323       C
ATOM   1138  CE2 TYR A 167      32.548 -20.216  12.623  1.00116.36           C
ANISOU 1138  CE2 TYR A 167    19405  14798  10008  -1862   -740   -697       C
ATOM   1139  CZ  TYR A 167      31.659 -21.057  13.254  1.00120.05           C
ANISOU 1139  CZ  TYR A 167    20168  15391  10056  -2426   -911   -328       C
ATOM   1140  OH  TYR A 167      32.124 -22.030  14.098  1.00124.42           O
ANISOU 1140  OH  TYR A 167    21151  15975  10149  -2620  -1361     70       O
ATOM   1141  N   TYR A 168      29.851 -14.690   9.907  1.00105.76           N
ANISOU 1141  N   TYR A 168    15979  13388  10817  -1354   1133  -2352       N
ATOM   1142  CA  TYR A 168      29.186 -13.692   9.079  1.00107.08           C
ANISOU 1142  CA  TYR A 168    15830  13348  11508  -1157   1376  -2554       C
ATOM   1143  C   TYR A 168      28.628 -14.322   7.808  1.00103.58           C
ANISOU 1143  C   TYR A 168    15579  12592  11184  -1009   1280  -2189       C
ATOM   1144  O   TYR A 168      29.167 -15.298   7.279  1.00100.85           O
ANISOU 1144  O   TYR A 168    15596  12034  10687   -889   1010  -1841       O
ATOM   1145  CB  TYR A 168      30.152 -12.563   8.720  1.00107.36           C
ANISOU 1145  CB  TYR A 168    15643  13118  12030   -868   1444  -2757       C
ATOM   1146  CG  TYR A 168      30.639 -11.769   9.912  1.00106.35           C
ANISOU 1146  CG  TYR A 168    15284  13256  11867  -1011   1533  -3213       C
ATOM   1147  CD1 TYR A 168      29.798 -11.495  10.983  1.00109.58           C
ANISOU 1147  CD1 TYR A 168    15489  14107  12040  -1264   1694  -3612       C
ATOM   1148  CD2 TYR A 168      31.942 -11.300   9.966  1.00106.34           C
ANISOU 1148  CD2 TYR A 168    15229  13143  12030   -903   1448  -3275       C
ATOM   1149  CE1 TYR A 168      30.246 -10.769  12.075  1.00112.69           C
ANISOU 1149  CE1 TYR A 168    15660  14786  12371  -1370   1756  -4103       C
ATOM   1150  CE2 TYR A 168      32.398 -10.579  11.046  1.00109.29           C
ANISOU 1150  CE2 TYR A 168    15395  13757  12374  -1054   1497  -3726       C
ATOM   1151  CZ  TYR A 168      31.549 -10.315  12.098  1.00112.44           C
ANISOU 1151  CZ  TYR A 168    15623  14556  12544  -1270   1644  -4160       C
ATOM   1152  OH  TYR A 168      32.015  -9.594  13.170  1.00115.90           O
ANISOU 1152  OH  TYR A 168    15843  15268  12924  -1395   1674  -4678       O
ATOM   1153  N   VAL A 169      27.525 -13.755   7.329  1.00108.57           N
ANISOU 1153  N   VAL A 169    15951  13219  12082   -983   1478  -2317       N
ATOM   1154  CA  VAL A 169      26.821 -14.240   6.150  1.00102.21           C
ANISOU 1154  CA  VAL A 169    15253  12199  11382   -871   1411  -2030       C
ATOM   1155  C   VAL A 169      26.838 -13.149   5.091  1.00 99.57           C
ANISOU 1155  C   VAL A 169    14650  11558  11623   -492   1542  -2094       C
ATOM   1156  O   VAL A 169      26.679 -11.964   5.403  1.00100.45           O
ANISOU 1156  O   VAL A 169    14427  11671  12070   -422   1732  -2434       O
ATOM   1157  CB  VAL A 169      25.372 -14.651   6.482  1.00111.31           C
ANISOU 1157  CB  VAL A 169    16314  12491  12487  -1226   1491  -2111       C
ANISOU 1157  CB  VAL A 169    16314  13709  12272  -1226   1491  -2051       C
ATOM   1158  CG1 VAL A 169      24.737 -15.357   5.288  1.00101.34           C
ANISOU 1158  CG1 VAL A 169    15225  12228  11050  -1165   1347  -1726       C
ATOM   1159  CG2 VAL A 169      25.338 -15.529   7.723  1.00105.47           C
```

[2091]

```
ANISOU 1159  CG2 VAL A 169    15772  13360  10940  -1707   1384  -1970       C
ATOM   1160  N   GLN A 170      27.031 -13.555   3.837  1.00106.23           N
ANISOU 1160  N   GLN A 170    15652  12138  12573   -245   1406  -1767       N
ATOM   1161  CA  GLN A 170      27.060 -12.643   2.706  1.00 95.89           C
ANISOU 1161  CA  GLN A 170    14117  10579  11739     78   1488  -1694       C
ATOM   1162  C   GLN A 170      25.941 -12.985   1.732  1.00 98.84           C
ANISOU 1162  C   GLN A 170    14473  10943  12136    145   1468  -1521       C
ATOM   1163  O   GLN A 170      25.394 -14.092   1.742  1.00 98.47           O
ANISOU 1163  O   GLN A 170    14662  11016  11735    -41   1334  -1404       O
ATOM   1164  CB  GLN A 170      28.411 -12.692   1.982  1.00 94.39           C
ANISOU 1164  CB  GLN A 170    14027  10229  11607    334   1360  -1455       C
ATOM   1165  CG  GLN A 170      29.531 -11.927   2.663  1.00 95.24           C
ANISOU 1165  CG  GLN A 170    14004  10326  11858    306   1409  -1619       C
ATOM   1166  CD  GLN A 170      29.890 -12.481   4.030  1.00102.57           C
ANISOU 1166  CD  GLN A 170    15090  11477  12403     62   1351  -1820       C
ATOM   1167  OE1 GLN A 170      30.057 -11.728   4.988  1.00104.82           O
ANISOU 1167  OE1 GLN A 170    15197  11842  12788    -92   1463  -2140       O
ATOM   1168  NE2 GLN A 170      30.010 -13.802   4.126  1.00 96.72           N
ANISOU 1168  NE2 GLN A 170    14702  10826  11221     29   1136  -1637       N
ATOM   1169  N   TRP A 171      25.609 -12.014   0.882  1.00104.33           N
ANISOU 1169  N   TRP A 171    14897  11480  13263    389   1566  -1485       N
ATOM   1170  CA  TRP A 171      24.638 -12.193  -0.190  1.00105.24           C
ANISOU 1170  CA  TRP A 171    14944  11607  13436    515   1536  -1302       C
ATOM   1171  C   TRP A 171      25.195 -11.600  -1.475  1.00 99.52           C
ANISOU 1171  C   TRP A 171    14129  10672  13013    847   1497  -1004       C
ATOM   1172  O   TRP A 171      25.662 -10.456  -1.480  1.00 99.34           O
ANISOU 1172  O   TRP A 171    13910  10445  13388    950   1575  -1019       O
ATOM   1173  CB  TRP A 171      23.299 -11.531   0.146  1.00105.65           C
ANISOU 1173  CB  TRP A 171    14660  11808  13676    467   1696  -1570       C
ATOM   1174  CG  TRP A 171      22.514 -12.236   1.200  1.00106.21           C
ANISOU 1174  CG  TRP A 171    14741  12271  13341     89   1742  -1789       C
ATOM   1175  CD1 TRP A 171      22.508 -11.963   2.533  1.00101.20           C
ANISOU 1175  CD1 TRP A 171    13991  11876  12584   -127   1871  -2143       C
ATOM   1176  CD2 TRP A 171      21.607 -13.327   1.009  1.00107.21           C
ANISOU 1176  CD2 TRP A 171    14979  12660  13096   -175   1646  -1646       C
ATOM   1177  NE1 TRP A 171      21.658 -12.818   3.188  1.00104.64           N
ANISOU 1177  NE1 TRP A 171    14436  12768  12556   -528   1881  -2183       N
ATOM   1178  CE2 TRP A 171      21.090 -13.664   2.274  1.00102.35           C
ANISOU 1178  CE2 TRP A 171    14296  12464  12129   -593   1732  -1865       C
ATOM   1179  CE3 TRP A 171      21.182 -14.051  -0.109  1.00104.88           C
ANISOU 1179  CE3 TRP A 171    14825  12314  12713   -131   1477  -1358       C
ATOM   1180  CZ2 TRP A 171      20.172 -14.694   2.455  1.00109.08           C
ANISOU 1180  CZ2 TRP A 171    15220  13665  12560  -1027   1649  -1740       C
ATOM   1181  CZ3 TRP A 171      20.270 -15.073   0.073  1.00108.24           C
ANISOU 1181  CZ3 TRP A 171    15346  13020  12759   -533   1375  -1295       C
ATOM   1182  CH2 TRP A 171      19.774 -15.385   1.347  1.00106.56           C
ANISOU 1182  CH2 TRP A 171    15068  13204  12217  -1005   1458  -1453       C
ATOM   1183  N   TYR A 172      25.135 -12.371  -2.559  1.00102.37           N
ANISOU 1183  N   TYR A 172    14629  11099  13169    984   1353   -732       N
ATOM   1184  CA  TYR A 172      25.612 -11.938  -3.864  1.00 98.05           C
ANISOU 1184  CA  TYR A 172    13967  10510  12779   1276   1312   -407       C
ATOM   1185  C   TYR A 172      24.504 -12.069  -4.899  1.00 93.96           C
ANISOU 1185  C   TYR A 172    13343  10093  12263   1400   1265   -257       C
ATOM   1186  O   TYR A 172      23.644 -12.950  -4.807  1.00 93.87           O
ANISOU 1186  O   TYR A 172    13458  10214  11995   1264   1189   -363       O
ATOM   1187  CB  TYR A 172      26.830 -12.753  -4.320  1.00 95.40           C
ANISOU 1187  CB  TYR A 172    13846  10294  12108   1414   1160   -257       C
ATOM   1188  CG  TYR A 172      27.893 -12.899  -3.263  1.00 93.85           C
ANISOU 1188  CG  TYR A 172    13780  10073  11804   1298   1154   -419       C
ATOM   1189  CD1 TYR A 172      28.780 -11.866  -2.992  1.00102.19           C
ANISOU 1189  CD1 TYR A 172    14628  11064  13137   1278   1263   -392       C
ATOM   1190  CD2 TYR A 172      28.014 -14.074  -2.536  1.00104.80           C
ANISOU 1190  CD2 TYR A 172    14243  10228  11550   1182    999   -572       C
ATOM   1191  CE1 TYR A 172      29.756 -11.996  -2.019  1.00105.28           C
ANISOU 1191  CE1 TYR A 172    15104  11491  13407   1165   1245   -558       C
ATOM   1192  CE2 TYR A 172      28.983 -14.215  -1.562  1.00104.23           C
ANISOU 1192  CE2 TYR A 172    15547  11436  12621   1099    966   -699       C
ATOM   1193  CZ  TYR A 172      29.852 -13.175  -1.305  1.00106.77           C
```

[2092]

```
ANISOU 1193  CZ  TYR A 172    15613  11761  13193   1101   1102   -713       C
ATOM   1194  OH  TYR A 172       30.816 -13.321  -0.330  1.00102.12           O
ANISOU 1194  OH  TYR A 172    15103  11243  12457   1012   1056   -857       O
ATOM   1195  N   GLN A 173       24.540 -11.187  -5.894  1.00102.90           N
ANISOU 1195  N   GLN A 173    14239  11181  13676   1621   1284     26       N
ATOM   1196  CA  GLN A 173       23.608 -11.210  -7.014  1.00 99.13           C
ANISOU 1196  CA  GLN A 173    13624  10848  13194   1787   1218    225       C
ATOM   1197  C   GLN A 173       24.368 -11.536  -8.291  1.00 95.83           C
ANISOU 1197  C   GLN A 173    13229  10653  12530   2003   1104    570       C
ATOM   1198  O   GLN A 173       25.395 -10.915  -8.581  1.00 99.16           O
ANISOU 1198  O   GLN A 173    13551  11067  13057   2069   1138    811       O
ATOM   1199  CB  GLN A 173       22.890  -9.867  -7.161  1.00 98.46           C
ANISOU 1199  CB  GLN A 173    13218  10568  13624   1901   1291    301       C
ATOM   1200  CG  GLN A 173       21.911  -9.814  -8.322  1.00103.00           C
ANISOU 1200  CG  GLN A 173    13613  11326  14197   2100   1201    537       C
ATOM   1201  CD  GLN A 173       21.294  -8.442  -8.504  1.00104.42           C
ANISOU 1201  CD  GLN A 173    13499  11248  14925   2287   1206    649       C
ATOM   1202  OE1 GLN A 173       20.079  -8.312  -8.653  1.00109.82           O
ANISOU 1202  OE1 GLN A 173    13987  12041  15699   2402   1180    545       O
ATOM   1203  NE2 GLN A 173       22.131  -7.410  -8.498  1.00105.13           N
ANISOU 1203  NE2 GLN A 173    13558  10987  15398   2319   1202    865       N
ATOM   1204  N   GLN A 174       23.865 -12.505  -9.053  1.00 96.50           N
ANISOU 1204  N   GLN A 174    13415  10990  12259   2091    960    576       N
ATOM   1205  CA  GLN A 174       24.463 -12.877 -10.333  1.00103.17           C
ANISOU 1205  CA  GLN A 174    14240  12167  12794   2347    840    821       C
ATOM   1206  C   GLN A 174       23.389 -12.845 -11.410  1.00 97.84           C
ANISOU 1206  C   GLN A 174    13390  11714  12072   2475    760    983       C
ATOM   1207  O   GLN A 174       22.510 -13.712 -11.438  1.00 97.73           O
ANISOU 1207  O   GLN A 174    13511  11763  11858   2400    638    765       O
ATOM   1208  CB  GLN A 174       25.115 -14.256 -10.268  1.00 97.20           C
ANISOU 1208  CB  GLN A 174    13825  11530  11575   2411    660    579       C
ATOM   1209  CG  GLN A 174       25.844 -14.624 -11.545  1.00 96.69           C
ANISOU 1209  CG  GLN A 174    13686  11907  11142   2749    540    726       C
ATOM   1210  CD  GLN A 174       26.500 -15.987 -11.477  1.00 99.00           C
ANISOU 1210  CD  GLN A 174    14332  12269  11016   2918    301    399       C
ATOM   1211  OE1 GLN A 174       25.932 -16.937 -10.935  1.00 96.18           O
ANISOU 1211  OE1 GLN A 174    14331  11637  10577   2775    119    121       O
ATOM   1212  NE2 GLN A 174       27.706 -16.091 -12.030  1.00 97.84           N
ANISOU 1212  NE2 GLN A 174    14074  12504  10595   3221    270    437       N
ATOM   1213  N   ARG A 175       23.460 -11.849 -12.292  1.00101.32           N
ANISOU 1213  N   ARG A 175    13529  12281  12687   2628    802   1397       N
ATOM   1214  CA  ARG A 175       22.581 -11.813 -13.448  1.00106.76           C
ANISOU 1214  CA  ARG A 175    14028  13272  13266   2792    698   1612       C
ATOM   1215  C   ARG A 175       23.111 -12.742 -14.541  1.00109.13           C
ANISOU 1215  C   ARG A 175    14383  14087  12994   2997    549   1642       C
ATOM   1216  O   ARG A 175       24.311 -13.026 -14.593  1.00104.53           O
ANISOU 1216  O   ARG A 175    13871  13671  12175   3078    557   1636       O
ATOM   1217  CB  ARG A 175       22.462 -10.391 -13.987  1.00104.64           C
ANISOU 1217  CB  ARG A 175    13440  12927  13391   2879    743   2105       C
ATOM   1218  CG  ARG A 175       21.833  -9.422 -13.010  1.00107.97           C
ANISOU 1218  CG  ARG A 175    13789  12825  14410   2784    829   1994       C
ATOM   1219  CD  ARG A 175       21.478  -8.105 -13.668  1.00109.02           C
ANISOU 1219  CD  ARG A 175    13655  12803  14966   2933    763   2473       C
ATOM   1220  NE  ARG A 175       20.945  -7.155 -12.695  1.00116.38           N
ANISOU 1220  NE  ARG A 175    14531  13186  16503   2925    801   2267       N
ATOM   1221  CZ  ARG A 175       20.572  -5.913 -12.986  1.00125.43           C
ANISOU 1221  CZ  ARG A 175    15505  13988  18165   3084    689   2583       C
ATOM   1222  NH1 ARG A 175       20.670  -5.460 -14.231  1.00123.99           N
ANISOU 1222  NH1 ARG A 175    15189  13975  17947   3202    540   3214       N
ATOM   1223  NH2 ARG A 175       20.100  -5.122 -12.031  1.00123.78           N
ANISOU 1223  NH2 ARG A 175    15257  13277  18497   3140    695   2258       N
ATOM   1224  N   PRO A 176       22.234 -13.240 -15.414  1.00113.07           N
ANISOU 1224  N   PRO A 176    14824  14895  13241   3108    398   1621       N
ATOM   1225  CA  PRO A 176       22.683 -14.154 -16.479  1.00111.20           C
ANISOU 1225  CA  PRO A 176    14634  15186  12433   3349    223   1548       C
ATOM   1226  C   PRO A 176       23.786 -13.530 -17.321  1.00113.69           C
ANISOU 1226  C   PRO A 176    14677  15963  12559   3540    301   1967       C
ATOM   1227  O   PRO A 176       23.586 -12.512 -17.988  1.00111.70           O
```

[2093]

```
ANISOU 1227  O   PRO A 176    14104  15892  12445   3557    359   2481       O
ATOM   1228  CB  PRO A 176      21.409 -14.393 -17.297  1.00107.14           C
ANISOU 1228  CB  PRO A 176    13995  14928  11785   3397     70   1548       C
ATOM   1229  CG  PRO A 176      20.297 -14.147 -16.347  1.00109.88           C
ANISOU 1229  CG  PRO A 176    14363  14840  12547   3129    130   1412       C
ATOM   1230  CD  PRO A 176      20.770 -13.059 -15.423  1.00111.47           C
ANISOU 1230  CD  PRO A 176    14495  14625  13235   3030    359   1584       C
ATOM   1231  N   GLY A 177      24.965 -14.148 -17.274  1.00117.31           N
ANISOU 1231  N   GLY A 177    15247  16639  12685   3675    280   1768       N
ATOM   1232  CA  GLY A 177      26.113 -13.666 -18.008  1.00123.26           C
ANISOU 1232  CA  GLY A 177    15691  17977  13167   3817    367   2126       C
ATOM   1233  C   GLY A 177      26.966 -12.653 -17.276  1.00124.62           C
ANISOU 1233  C   GLY A 177    15751  17881  13718   3582    571   2438       C
ATOM   1234  O   GLY A 177      28.032 -12.281 -17.786  1.00131.59           O
ANISOU 1234  O   GLY A 177    16355  19289  14355   3620    647   2747       O
ATOM   1235  N   LYS A 178      26.540 -12.193 -16.106  1.00113.06           N
ANISOU 1235  N   LYS A 178    14463  15682  12813   3323    653   2351       N
ATOM   1236  CA  LYS A 178      27.293 -11.214 -15.339  1.00110.35           C
ANISOU 1236  CA  LYS A 178    14042  15013  12874   3080    810   2574       C
ATOM   1237  C   LYS A 178      28.104 -11.900 -14.246  1.00106.90           C
ANISOU 1237  C   LYS A 178    13861  14388  12370   3045    830   2117       C
ATOM   1238  O   LYS A 178      27.901 -13.071 -13.920  1.00108.65           O
ANISOU 1238  O   LYS A 178    14384  14555  12345   3172    705   1644       O
ATOM   1239  CB  LYS A 178      26.358 -10.167 -14.726  1.00110.09           C
ANISOU 1239  CB  LYS A 178    14006  14319  13505   2870    864   2714       C
ATOM   1240  CG  LYS A 178      25.687  -9.255 -15.737  1.00114.81           C
ANISOU 1240  CG  LYS A 178    14338  15017  14269   2914    807   3265       C
ATOM   1241  CD  LYS A 178      24.977  -8.105 -15.038  1.00117.48           C
ANISOU 1241  CD  LYS A 178    14669  14637  15329   2778    821   3360       C
ATOM   1242  CE  LYS A 178      24.290  -7.182 -16.034  1.00120.64           C
ANISOU 1242  CE  LYS A 178    14836  15065  15937   2870    696   3938       C
ATOM   1243  NZ  LYS A 178      23.583  -6.060 -15.350  1.00121.41           N
ANISOU 1243  NZ  LYS A 178    14940  14411  16780   2837    648   3953       N
ATOM   1244  N   SER A 179      29.027 -11.161 -13.694  1.00104.20           N
ANISOU 1244  N   SER A 179    13406  13932  12252   2851    949   2286       N
ATOM   1245  CA  SER A 179      29.757 -11.734 -12.578  1.00105.72           C
ANISOU 1245  CA  SER A 179    13824  13942  12404   2811    956   1868       C
ATOM   1246  C   SER A 179      29.053 -11.410 -11.263  1.00100.00           C
ANISOU 1246  C   SER A 179    13324  12498  12173   2554   1014   1620       C
ATOM   1247  O   SER A 179      28.373 -10.384 -11.150  1.00100.48           O
ANISOU 1247  O   SER A 179    13274  12203  12702   2392   1083   1822       O
ATOM   1248  CB  SER A 179      31.186 -11.201 -12.547  1.00103.94           C
ANISOU 1248  CB  SER A 179    13335  14048  12108   2716   1045   2098       C
ATOM   1249  OG  SER A 179      31.889 -11.594 -13.711  1.00106.68           O
ANISOU 1249  OG  SER A 179    13414  15226  11894   2976   1006   2261       O
ATOM   1250  N   PRO A 180      29.184 -12.281 -10.263  1.00 98.30           N
ANISOU 1250  N   PRO A 180    13418  12092  11840   2535    960   1175       N
ATOM   1251  CA  PRO A 180      28.482 -12.057  -8.993  1.00 96.16           C
ANISOU 1251  CA  PRO A 180    13321  12276  11927   2276   1025    914       C
ATOM   1252  C   PRO A 180      29.025 -10.835  -8.265  1.00 99.37           C
ANISOU 1252  C   PRO A 180    13559  11426  12769   2044   1169   1009       C
ATOM   1253  O   PRO A 180      30.239 -10.659  -8.131  1.00 97.29           O
ANISOU 1253  O   PRO A 180    13204  11335  12428   2007   1189   1086       O
ATOM   1254  CB  PRO A 180      28.748 -13.346  -8.205  1.00 97.52           C
ANISOU 1254  CB  PRO A 180    13859  11429  11767   2294    891    519       C
ATOM   1255  CG  PRO A 180      29.135 -14.355  -9.226  1.00 97.42           C
ANISOU 1255  CG  PRO A 180    13925  11810  11282   2634    699    503       C
ATOM   1256  CD  PRO A 180      29.853 -13.592 -10.297  1.00103.40           C
ANISOU 1256  CD  PRO A 180    14284  13016  11989   2782    792    876       C
ATOM   1257  N   THR A 181      28.113  -9.996  -7.786  1.00100.70           N
ANISOU 1257  N   THR A 181    13674  11190  13398   1900   1243    960       N
ATOM   1258  CA  THR A 181      28.453  -8.799  -7.033  1.00103.15           C
ANISOU 1258  CA  THR A 181    13868  11130  14196   1694   1326    950       C
ATOM   1259  C   THR A 181      27.880  -8.895  -5.627  1.00103.70           C
ANISOU 1259  C   THR A 181    14082  10925  14394   1548   1387    444       C
ATOM   1260  O   THR A 181      26.772  -9.403  -5.431  1.00103.44           O
ANISOU 1260  O   THR A 181    14129  10905  14270   1576   1391    230       O
ATOM   1261  CB  THR A 181      27.922  -7.538  -7.724  1.00110.25           C
```

[2094]

```
ANISOU 1261  CB  THR A 181    14547  11760  15582   1712   1306   1315       C
ATOM   1262  OG1 THR A 181      27.866  -6.462  -6.779  1.00108.57           O
ANISOU 1262  OG1 THR A 181    14303  11028  15920   1550   1329   1118       O
ATOM   1263  CG2 THR A 181      26.530  -7.783  -8.300  1.00105.40           C
ANISOU 1263  CG2 THR A 181    13914  11179  14953   1906   1267   1316       C
ATOM   1264  N   ILE A 182      28.646  -8.405  -4.651  1.00107.72           N
ANISOU 1264  N   ILE A 182    14590  11264  15075   1362   1433    254       N
ATOM   1265  CA  ILE A 182      28.192  -8.391  -3.267  1.00104.07           C
ANISOU 1265  CA  ILE A 182    14213  10637  14693   1211   1501   -242       C
ATOM   1266  C   ILE A 182      27.057  -7.386  -3.111  1.00107.20           C
ANISOU 1266  C   ILE A 182    14446  10706  15580   1259   1541   -401       C
ATOM   1267  O   ILE A 182      27.099  -6.278  -3.665  1.00106.62           O
ANISOU 1267  O   ILE A 182    14220  10313  15977   1323   1487   -163       O
ATOM   1268  CB  ILE A 182      29.368  -8.067  -2.329  1.00103.91           C
ANISOU 1268  CB  ILE A 182    14199  10567  14714   1016   1516   -415       C
ATOM   1269  CG1 ILE A 182      28.895  -7.942  -0.880  1.00108.33           C
ANISOU 1269  CG1 ILE A 182    14801  11030  15328    858   1589   -952       C
ATOM   1270  CG2 ILE A 182      30.075  -6.797  -2.769  1.00105.06           C
ANISOU 1270  CG2 ILE A 182    14145  10452  15323    936   1484   -136       C
ATOM   1271  CD1 ILE A 182      28.444  -9.246  -0.278  1.00106.33           C
ANISOU 1271  CD1 ILE A 182    14765  11086  14551    798   1591  -1148       C
ATOM   1272  N   VAL A 183      26.021  -7.778  -2.368  1.00109.98           N
ANISOU 1272  N   VAL A 183    14816  11160  15813   1232   1608   -792       N
ATOM   1273  CA  VAL A 183      24.889  -6.893  -2.110  1.00110.81           C
ANISOU 1273  CA  VAL A 183    14709  11066  16327   1350   1645  -1063       C
ATOM   1274  C   VAL A 183      24.690  -6.744  -0.608  1.00111.37           C
ANISOU 1274  C   VAL A 183    14740  11201  16375   1200   1748  -1663       C
ATOM   1275  O   VAL A 183      24.239  -5.697  -0.132  1.00114.88           O
ANISOU 1275  O   VAL A 183    14996  11397  17256   1318   1756  -2018       O
ATOM   1276  CB  VAL A 183      23.604  -7.399  -2.796  1.00111.44           C
ANISOU 1276  CB  VAL A 183    14705  11386  16253   1495   1638   -977       C
ATOM   1277  CG1 VAL A 183      23.852  -7.633  -4.278  1.00107.75           C
ANISOU 1277  CG1 VAL A 183    14273  10955  15712   1641   1529   -412       C
ATOM   1278  CG2 VAL A 183      23.079  -8.666  -2.132  1.00106.86           C
ANISOU 1278  CG2 VAL A 183    14244  11238  15121   1276   1700  -1213       C
ATOM   1279  N   ILE A 184      25.035  -7.785   0.148  1.00113.68           N
ANISOU 1279  N   ILE A 184    15209  11836  16148    961   1797  -1791       N
ATOM   1280  CA  ILE A 184      24.895  -7.776   1.600  1.00108.34           C
ANISOU 1280  CA  ILE A 184    14486  11365  15312    767   1898  -2315       C
ATOM   1281  C   ILE A 184      25.991  -8.643   2.200  1.00105.38           C
ANISOU 1281  C   ILE A 184    14372  11171  14497    526   1860  -2247       C
ATOM   1282  O   ILE A 184      26.139  -9.814   1.836  1.00103.86           O
ANISOU 1282  O   ILE A 184    14416  11159  13888    459   1779  -1955       O
ATOM   1283  CB  ILE A 184      23.502  -8.267   2.043  1.00105.44           C
ANISOU 1283  CB  ILE A 184    13973  11428  14660    696   1998  -2580       C
ATOM   1284  CG1 ILE A 184      22.477  -7.132   1.977  1.00113.98           C
ANISOU 1284  CG1 ILE A 184    14697  12397  16213    985   2045  -2912       C
ATOM   1285  CG2 ILE A 184      23.555  -8.838   3.447  1.00107.82           C
ANISOU 1285  CG2 ILE A 184    14316  12021  15631    366   2084  -2921       C
ATOM   1286  CD1 ILE A 184      22.804  -5.964   2.883  1.00118.35           C
ANISOU 1286  CD1 ILE A 184    15102  12712  17154   1078   2064  -3435       C
ATOM   1287  N   PHE A 185      26.770  -8.074   3.115  1.00104.19           N
ANISOU 1287  N   PHE A 185    14186  10955  14447    420   1879  -2539       N
ATOM   1288  CA  PHE A 185      27.825  -8.794   3.809  1.00107.87           C
ANISOU 1288  CA  PHE A 185    14855  11628  14503    217   1824  -2519       C
ATOM   1289  C   PHE A 185      27.734  -8.500   5.301  1.00109.68           C
ANISOU 1289  C   PHE A 185    14977  12104  14592     16   1904  -3061       C
ATOM   1290  O   PHE A 185      26.988  -7.621   5.740  1.00111.50           O
ANISOU 1290  O   PHE A 185    14957  12309  15100     79   2009  -3498       O
ATOM   1291  CB  PHE A 185      29.208  -8.416   3.267  1.00104.04           C
ANISOU 1291  CB  PHE A 185    14400  10910  14222    278   1725  -2249       C
ATOM   1292  CG  PHE A 185      29.612  -7.007   3.575  1.00110.15           C
ANISOU 1292  CG  PHE A 185    14969  11348  15533    251   1734  -2500       C
ATOM   1293  CD1 PHE A 185      29.071  -5.948   2.868  1.00114.89           C
ANISOU 1293  CD1 PHE A 185    15416  11526  16712    411   1720  -2445       C
ATOM   1294  CD2 PHE A 185      30.536  -6.740   4.569  1.00105.35           C
ANISOU 1294  CD2 PHE A 185    14343  10816  14869     60   1708  -2784       C
ANISOU 1294  CD2 PHE A 185    14343  10816  14869     60   1708  -2784       C
ATOM   1295  CE1 PHE A 185      29.438  -4.650   3.149  1.00115.86           C
```

[2095]

```
ANISOU 1295  CE1 PHE A 185    15414  11220  17389    369   1650  -2671       C
ATOM   1296  CE2 PHE A 185      30.910  -5.443   4.853  1.00109.95           C
ANISOU 1296  CE2 PHE A 185    14766  11031  15978     -2   1665  -3046       C
ATOM   1297  CZ  PHE A 185      30.360  -4.397   4.142  1.00111.28           C
ANISOU 1297  CZ  PHE A 185    14826  10691  16764    146   1621  -2989       C
ATOM   1298  N   ALA A 186      28.512  -9.254   6.081  1.00105.62           N
ANISOU 1298  N   ALA A 186    14643  11866  13621   -189   1850  -3053       N
ATOM   1299  CA  ALA A 186      28.499  -9.148   7.540  1.00110.38           C
ANISOU 1299  CA  ALA A 186    15155  12839  13944   -419   1917  -3520       C
ATOM   1300  C   ALA A 186      27.073  -9.228   8.078  1.00115.55           C
ANISOU 1300  C   ALA A 186    15626  13881  14398   -518   2069  -3823       C
ATOM   1301  O   ALA A 186      26.666  -8.444   8.938  1.00115.69           O
ANISOU 1301  O   ALA A 186    15362  14108  14487   -529   2188  -4389       O
ATOM   1302  CB  ALA A 186      29.191  -7.867   8.008  1.00109.11           C
ANISOU 1302  CB  ALA A 186    14794  12450  14211   -382   1924  -3931       C
ATOM   1303  N   ASN A 187      26.307 -10.178   7.537  1.00108.63           N
ANISOU 1303  N   ASN A 187    14879  13139  13255   -584   2050  -3471       N
ATOM   1304  CA  ASN A 187      24.909 -10.417   7.884  1.00112.50           C
ANISOU 1304  CA  ASN A 187    15164  14090  13491   -736   2184  -3647       C
ATOM   1305  C   ASN A 187      24.003  -9.276   7.429  1.00117.82           C
ANISOU 1305  C   ASN A 187    15459  14622  14687   -412   2312  -3990       C
ATOM   1306  O   ASN A 187      23.101  -9.489   6.612  1.00116.85           O
ANISOU 1306  O   ASN A 187    15267  14496  14637   -319   2323  -3792       O
ATOM   1307  CB  ASN A 187      24.757 -10.663   9.389  1.00117.57           C
ANISOU 1307  CB  ASN A 187    15693  15395  13583  -1092   2272  -3985       C
ATOM   1308  CG  ASN A 187      25.662 -11.773   9.887  1.00116.75           C
ANISOU 1308  CG  ASN A 187    15988  15400  12973  -1391   2088  -3611       C
ATOM   1309  OD1 ASN A 187      26.130 -12.603   9.105  1.00114.73           O
ANISOU 1309  OD1 ASN A 187    16101  14795  12695  -1351   1887  -3104       O
ATOM   1310  ND2 ASN A 187      25.917 -11.793  11.191  1.00116.14           N
ANISOU 1310  ND2 ASN A 187    15831  15825  12474  -1655   2127  -3883       N
ATOM   1311  N   ASN A 188      24.227  -8.062   7.939  1.00120.54           N
ANISOU 1311  N   ASN A 188    15566  14821  15412   -220   2367  -4518       N
ATOM   1312  CA  ASN A 188      23.346  -6.940   7.645  1.00123.10           C
ANISOU 1312  CA  ASN A 188    15545  14974  16256    145   2426  -4922       C
ATOM   1313  C   ASN A 188      24.024  -5.758   6.966  1.00119.73           C
ANISOU 1313  C   ASN A 188    15158  13737  16598    468   2286  -4921       C
ATOM   1314  O   ASN A 188      23.320  -4.856   6.497  1.00121.58           O
ANISOU 1314  O   ASN A 188    15181  13668  17345    820   2255  -5127       O
ATOM   1315  CB  ASN A 188      22.663  -6.442   8.932  1.00124.30           C
ANISOU 1315  CB  ASN A 188    15307  15721  16200    138   2578  -5703       C
ATOM   1316  CG  ASN A 188      23.657  -6.021  10.003  1.00125.80           C
ANISOU 1316  CG  ASN A 188    15533  15939  16327     18   2554  -6112       C
ATOM   1317  OD1 ASN A 188      24.864  -5.967   9.767  1.00123.25           O
ANISOU 1317  OD1 ASN A 188    15497  15135  16198    -42   2418  -5829       O
ATOM   1318  ND2 ASN A 188      23.145  -5.714  11.190  1.00136.38           N
ANISOU 1318  ND2 ASN A 188    16534  17928  17356    -17   2686  -6811       N
ATOM   1319  N   GLN A 189      25.351  -5.726   6.900  1.00116.53           N
ANISOU 1319  N   GLN A 189    14998  12992  16285    346   2176  -4676       N
ATOM   1320  CA  GLN A 189      26.030  -4.573   6.326  1.00117.07           C
ANISOU 1320  CA  GLN A 189    15086  12336  17061    533   2024  -4633       C
ATOM   1321  C   GLN A 189      25.863  -4.552   4.813  1.00116.48           C
ANISOU 1321  C   GLN A 189    15091  11860  17305    723   1939  -4009       C
ATOM   1322  O   GLN A 189      25.973  -5.581   4.141  1.00112.78           O
ANISOU 1322  O   GLN A 189    14789  11591  16470    639   1951  -3489       O
ATOM   1323  CB  GLN A 189      27.512  -4.584   6.699  1.00117.96           C
ANISOU 1323  CB  GLN A 189    15369  12338  17112    286   1937  -4532       C
ATOM   1324  CG  GLN A 189      27.773  -4.373   8.183  1.00121.10           C
ANISOU 1324  CG  GLN A 189    15663  13082  17269    118   1981  -5191       C
ATOM   1325  CD  GLN A 189      27.263  -3.033   8.686  1.00126.82           C
ANISOU 1325  CD  GLN A 189    16148  13510  18528    342   1937  -5921       C
ATOM   1326  OE1 GLN A 189      27.174  -2.064   7.931  1.00128.62           O
ANISOU 1326  OE1 GLN A 189    16366  13047  19457    572   1788  -5862       O
ATOM   1327  NE2 GLN A 189      26.923  -2.974   9.969  1.00136.05           N
ANISOU 1327  NE2 GLN A 189    17124  15211  19356    290   2034  -6622       N
ATOM   1328  N   ARG A 190      25.589  -3.366   4.280  1.00121.29           N
ANISOU 1328  N   ARG A 190    15591  11894  18599    993   1816  -4074       N
ATOM   1329  CA  ARG A 190      25.336  -3.185   2.863  1.00119.16           C
```

[2096]

```
ANISOU 1329  CA  ARG A 190    15355  11269  18651   1189   1714  -3489       C
ATOM   1330  C   ARG A 190      26.442  -2.354   2.239  1.00120.26           C
ANISOU 1330  C   ARG A 190    15609  10792  19293   1113   1523  -3096       C
ATOM   1331  O   ARG A 190      26.722  -1.247   2.721  1.00122.95           O
ANISOU 1331  O   ARG A 190    15916  10644  20156   1125   1381  -3448       O
ATOM   1332  CB  ARG A 190      23.983  -2.500   2.648  1.00121.86           C
ANISOU 1332  CB  ARG A 190    15463  11468  19373   1578   1677  -3782       C
ATOM   1333  CG  ARG A 190      23.664  -2.206   1.200  1.00127.40           C
ANISOU 1333  CG  ARG A 190    16180  11800  20426   1804   1536  -3174       C
ATOM   1334  CD  ARG A 190      22.280  -1.598   1.046  1.00133.17           C
ANISOU 1334  CD  ARG A 190    16650  12460  21490   2241   1477  -3495       C
ATOM   1335  NE  ARG A 190      22.154  -0.315   1.730  1.00136.28           N
ANISOU 1335  NE  ARG A 190    16942  12341  22498   2498   1315  -4117       N
ATOM   1336  CZ  ARG A 190      21.531  -0.145   2.892  1.00140.02           C
ANISOU 1336  CZ  ARG A 190    17180  13157  22865   2645   1414  -4961       C
ATOM   1337  NH1 ARG A 190      20.971  -1.180   3.503  1.00136.45           N
ANISOU 1337  NH1 ARG A 190    16559  13595  21692   2484   1690  -5194       N
ATOM   1338  NH2 ARG A 190      21.466   1.061   3.442  1.00141.10           N
ANISOU 1338  NH2 ARG A 190    17246  12764  23603   2939   1212  -5578       N
ATOM   1339  N   PRO A 191      27.092  -2.845   1.183  1.00120.66           N
ANISOU 1339  N   PRO A 191    15776  10882  19187   1014   1494  -2392       N
ATOM   1340  CA  PRO A 191      28.164  -2.066   0.552  1.00118.12           C
ANISOU 1340  CA  PRO A 191    15499  10110  19270    862   1324  -1944       C
ATOM   1341  C   PRO A 191      27.634  -0.761  -0.018  1.00124.14           C
ANISOU 1341  C   PRO A 191    16207  10167  20793   1057   1106  -1842       C
ATOM   1342  O   PRO A 191      26.532  -0.704  -0.567  1.00127.46           O
ANISOU 1342  O   PRO A 191    16555  10542  21332   1374   1088  -1785       O
ATOM   1343  CB  PRO A 191      28.675  -2.994  -0.557  1.00117.85           C
ANISOU 1343  CB  PRO A 191    15523  10462  18791    811   1369  -1256       C
ATOM   1344  CG  PRO A 191      28.229  -4.358  -0.160  1.00119.38           C
ANISOU 1344  CG  PRO A 191    15793  11241  18326    855   1531  -1456       C
ATOM   1345  CD  PRO A 191      26.931  -4.169   0.564  1.00118.96           C
ANISOU 1345  CD  PRO A 191    15646  11181  18373   1010   1599  -2006       C
ATOM   1346  N   SER A 192      28.430   0.295   0.132  1.00126.71           N
ANISOU 1346  N   SER A 192    16574   9921  21649    855    901  -1816       N
ATOM   1347  CA  SER A 192      28.072   1.587  -0.435  1.00132.76           C
ANISOU 1347  CA  SER A 192    17360   9873  23208    994    600  -1631       C
ATOM   1348  C   SER A 192      27.879   1.449  -1.938  1.00139.57           C
ANISOU 1348  C   SER A 192    18212  10777  24042   1068    546   -766       C
ATOM   1349  O   SER A 192      28.780   0.998  -2.651  1.00138.93           O
ANISOU 1349  O   SER A 192    18128  11038  23622    786    602   -137       O
ATOM   1350  CB  SER A 192      29.154   2.619  -0.121  1.00137.78           C
ANISOU 1350  CB  SER A 192    17579   9896  24368    621    349  -1606       C
ATOM   1351  N   GLY A 193      26.690   1.822  -2.415  1.00148.89           N
ANISOU 1351  N   GLY A 193    19345  11694  25533   1477    434   -765       N
ATOM   1352  CA  GLY A 193      26.299   1.656  -3.799  1.00148.32           C
ANISOU 1352  CA  GLY A 193    19233  11740  25382   1611    380    -16       C
ATOM   1353  C   GLY A 193      25.202   0.628  -3.997  1.00143.98           C
ANISOU 1353  C   GLY A 193    18561  11832  24313   1934    598   -184       C
ATOM   1354  O   GLY A 193      24.429   0.737  -4.957  1.00145.21           O
ANISOU 1354  O   GLY A 193    18643  11970  24559   2201    495    196       O
ATOM   1355  N   VAL A 194      25.126  -0.365  -3.121  1.00139.24           N
ANISOU 1355  N   VAL A 194    17940  11801  23163   1875    867   -705       N
ATOM   1356  CA  VAL A 194      24.018  -1.325  -3.169  1.00137.31           C
ANISOU 1356  CA  VAL A 194    17583  12139  22450   2097   -911       C
ATOM   1357  C   VAL A 194      22.742  -0.626  -2.709  1.00140.20           C
ANISOU 1357  C   VAL A 194    17766  12279  23224   2496   -964  -1473       C
ATOM   1358  O   VAL A 194      22.761   0.069  -1.677  1.00138.89           O
ANISOU 1358  O   VAL A 194    17574  11802  23395   2550   2092  -2092       O
ATOM   1359  CB  VAL A 194      24.333  -2.541  -2.296  1.00130.48           C
ANISOU 1359  CB  VAL A 194    16781  11885  20909   1854   1294  -1254       C
ATOM   1360  CG1 VAL A 194      23.190  -3.545  -2.336  1.00130.36           C
ANISOU 1360  CG1 VAL A 194    16669  12442  20419   1974   1435  -1414       C
ATOM   1361  CG2 VAL A 194      25.636  -3.190  -2.743  1.00123.85           C
ANISOU 1361  CG2 VAL A 194    16100  11262  19697   1562   1326   -766       C
ATOM   1362  N   PRO A 195      21.629  -0.757  -3.433  1.00139.35           N
ANISOU 1362  N   PRO A 195    17497  12357  23094   2812    929  -1330       N
ATOM   1363  CA  PRO A 195      20.418  -0.012  -3.064  1.00141.06           C
```

[2097]

```
ANISOU 1363  CA  PRO A 195    17477  12397  23724   3273    820  -1876       C
ATOM   1364  C   PRO A 195      19.895  -0.417  -1.693  1.00141.26           C
ANISOU 1364  C   PRO A 195    17320  12929  23425   3272   1051  -2746       C
ATOM   1365  O   PRO A 195      19.971  -1.581  -1.295  1.00141.22           O
ANISOU 1365  O   PRO A 195    17327  13589  22742   2954   1308  -2804       O
ATOM   1366  CB  PRO A 195      19.425  -0.372  -4.177  1.00141.21           C
ANISOU 1366  CB  PRO A 195    17329  12738  23587   3532    778  -1473       C
ATOM   1367  CG  PRO A 195      19.955  -1.634  -4.778  1.00138.28           C
ANISOU 1367  CG  PRO A 195    17093  12909  22537   3163    957   -968       C
ATOM   1368  CD  PRO A 195      21.443  -1.538  -4.667  1.00138.66           C
ANISOU 1368  CD  PRO A 195    17407  12668  22609   2799    955   -688       C
ATOM   1369  N   ASP A 196      19.352   0.569  -0.972  1.00144.89           N
ANISOU 1369  N   ASP A 196    17607  13076  24369   3640    925  -3429       N
ATOM   1370  CA  ASP A 196      18.905   0.369   0.402  1.00144.95           C
ANISOU 1370  CA  ASP A 196    17383  13615  24075   3658   1132  -4322       C
ATOM   1371  C   ASP A 196      17.681  -0.531   0.511  1.00144.25           C
ANISOU 1371  C   ASP A 196    16943  14474  23391   3720   1366  -4534       C
ATOM   1372  O   ASP A 196      17.350  -0.958   1.622  1.00142.62           O
ANISOU 1372  O   ASP A 196    16525  14932  22733   3587   1592  -5142       O
ATOM   1373  CB  ASP A 196      18.611   1.720   1.059  1.00148.70           C
ANISOU 1373  CB  ASP A 196    17734  13523  25243   4126    892  -5067       C
ATOM   1374  CG  ASP A 196      17.510   2.485   0.352  1.00154.67           C
ANISOU 1374  CG  ASP A 196    18273  13974  26521   4768    626  -5103       C
ATOM   1375  OD1 ASP A 196      17.316   2.263  -0.861  1.00153.09           O
ANISOU 1375  OD1 ASP A 196    18132  13699  26338   4795    540  -4341       O
ATOM   1376  OD2 ASP A 196      16.841   3.310   1.009  1.00161.25           O
ANISOU 1376  OD2 ASP A 196    18861  14676  27732   5284    483  -5922       O
ATOM   1377  N   ARG A 197      17.001  -0.827  -0.598  1.00144.58           N
ANISOU 1377  N   ARG A 197    16894  14652  23388   3874   1307  -4038       N
ATOM   1378  CA  ARG A 197      15.890  -1.769  -0.546  1.00143.81           C
ANISOU 1378  CA  ARG A 197    16468  15486  22689   3819   1513  -4173       C
ATOM   1379  C   ARG A 197      16.356  -3.209  -0.381  1.00139.21           C
ANISOU 1379  C   ARG A 197    16093  15452  21346   3188   1746  -3857       C
ATOM   1380  O   ARG A 197      15.528  -4.083  -0.103  1.00139.57           O
ANISOU 1380  O   ARG A 197    15906  16288  20838   2988   1916  -4000       O
ATOM   1381  CB  ARG A 197      15.023  -1.636  -1.800  1.00143.25           C
ANISOU 1381  CB  ARG A 197    16227  15401  22802   4175   1342  -3757       C
ATOM   1382  CG  ARG A 197      15.721  -1.989  -3.102  1.00143.44           C
ANISOU 1382  CG  ARG A 197    16599  15083  22819   3983   1225  -2839       C
ATOM   1383  CD  ARG A 197      14.768  -1.847  -4.281  1.00141.45           C
ANISOU 1383  CD  ARG A 197    16127  14927  22691   4349   1049  -2478       C
ATOM   1384  NE  ARG A 197      15.366  -2.297  -5.534  1.00141.28           N
ANISOU 1384  NE  ARG A 197    16381  14773  22525   4151    962  -1638       N
ATOM   1385  CZ  ARG A 197      15.996  -1.499  -6.389  1.00140.64           C
ANISOU 1385  CZ  ARG A 197    16501  14023  22912   4295    715  -1073       C
ATOM   1386  NH1 ARG A 197      16.113  -0.204  -6.130  1.00141.01           N
ANISOU 1386  NH1 ARG A 197    16568  13334  23674   4620    483  -1233       N
ATOM   1387  NH2 ARG A 197      16.511  -1.997  -7.503  1.00140.96           N
ANISOU 1387  NH2 ARG A 197    16720  14146  22690   4100    673   -351       N
ATOM   1388  N   PHE A 198      17.651  -3.474  -0.542  1.00136.13           N
ANISOU 1388  N   PHE A 198    16011  14720  19898   2340   1883  -3203       C
ATOM   1389  CA  PHE A 198      18.232  -4.786  -0.266  1.00133.25           C
ANISOU 1389  CA  PHE A 198    16011  14720  19898   2340   1883  -3203       C
ATOM   1390  C   PHE A 198      18.683  -4.798   1.190  1.00132.62           C
ANISOU 1390  C   PHE A 198    15939  14836  19614   2102   2025  -3747       C
ATOM   1391  O   PHE A 198      19.707  -4.206   1.540  1.00133.15           O
ANISOU 1391  O   PHE A 198    16193  14425  19972   2080   1963  -3816       O
ATOM   1392  CB  PHE A 198      19.395  -5.076  -1.208  1.00128.87           C
ANISOU 1392  CB  PHE A 198    15842  13752  19371   2197   1773  -2514       C
ATOM   1393  CG  PHE A 198      18.975  -5.429  -2.607  1.00131.24           C
ANISOU 1393  CG  PHE A 198    16143  14098  19622   2325   1666  -1959       C
ATOM   1394  CD1 PHE A 198      18.447  -4.467  -3.453  1.00134.09           C
ANISOU 1394  CD1 PHE A 198    16327  14128  20493   2738   1498  -1785       C
ATOM   1395  CD2 PHE A 198      19.122  -6.722  -3.081  1.00124.14           C
ANISOU 1395  CD2 PHE A 198    15440  13556  18170   2051   1691  -2620       C
ATOM   1396  CE1 PHE A 198      18.064  -4.789  -4.741  1.00130.64           C
ANISOU 1396  CE1 PHE A 198    15868  13811  19959   2851   1391  -1268       C
ATOM   1397  CE2 PHE A 198      18.742  -7.050  -4.369  1.00120.73           C
```

[2098]

```
ANISOU 1397  CE2 PHE A 198    14996  13216  17661   2178   1578  -1173       C
ATOM   1398  CZ  PHE A 198      18.212  -6.083  -5.199  1.00125.18           C
ANISOU 1398  CZ  PHE A 198    15343  13541  18680   2566   1445   -987       C
ATOM   1399  N   SER A 199      17.917  -5.468   2.044  1.00128.95           N
ANISOU 1399  N   SER A 199    15248  15133  18616   1882   2206  -4117       N
ATOM   1400  CA  SER A 199      18.234  -5.566   3.460  1.00131.87           C
ANISOU 1400  CA  SER A 199    15576  15863  18666   1624   2352  -4621       C
ATOM   1401  C   SER A 199      18.579  -7.004   3.824  1.00128.36           C
ANISOU 1401  C   SER A 199    15394  15880  17498   1042   2438  -4291       C
ATOM   1402  O   SER A 199      18.106  -7.955   3.195  1.00123.70           O
ANISOU 1402  O   SER A 199    14880  15535  16587    841   2417  -3877       O
ATOM   1403  CB  SER A 199      17.070  -5.074   4.326  1.00135.67           C
ANISOU 1403  CB  SER A 199    15518  16966  19065   1834   2482  -5379       C
ATOM   1404  OG  SER A 199      15.928  -5.896   4.163  1.00136.18           O
ANISOU 1404  OG  SER A 199    15305  17792  18644   1654   2593  -5283       O
ATOM   1405  N   GLY A 200      19.415  -7.150   4.849  1.00127.90           N
ANISOU 1405  N   GLY A 200    15491  15906  17200    775   2491  -4482       N
ATOM   1406  CA  GLY A 200      19.823  -8.457   5.318  1.00123.83           C
ANISOU 1406  CA  GLY A 200    15263  15758  16027    248   2512  -4175       C
ATOM   1407  C   GLY A 200      19.616  -8.625   6.808  1.00130.40           C
ANISOU 1407  C   GLY A 200    15894  17298  16356    -65   2669  -4646       C
ATOM   1408  O   GLY A 200      20.034  -7.776   7.602  1.00129.56           O
ANISOU 1408  O   GLY A 200    15652  17153  16422     81   2717  -5160       O
ATOM   1409  N   SER A 201      18.964  -9.715   7.200  1.00130.57           N
ANISOU 1409  N   SER A 201    15886  17993  15729   -532   2728  -4469       N
ATOM   1410  CA  SER A 201      18.706 -10.010   8.600  1.00126.73           C
ANISOU 1410  CA  SER A 201    15187  18334  14631   -930   2877  -4804       C
ATOM   1411  C   SER A 201      19.038 -11.470   8.869  1.00127.89           C
ANISOU 1411  C   SER A 201    15756  18681  14156  -1553   2760  -4216       C
ATOM   1412  O   SER A 201      19.277 -12.258   7.949  1.00127.00           O
ANISOU 1412  O   SER A 201    16051  18108  14097  -1631   2566  -3645       O
ATOM   1413  CB  SER A 201      17.249  -9.711   8.980  1.00132.98           C
ANISOU 1413  CB  SER A 201    15338  19987  15201   -909   3078  -5271       C
ATOM   1414  OG  SER A 201      16.349 -10.480   8.201  1.00133.79           O
ANISOU 1414  OG  SER A 201    15403  20296  15133  -1120   3040  -4842       O
ATOM   1415  N   ILE A 202      19.056 -11.827  10.152  1.00132.29           N
ANISOU 1415  N   ILE A 202    16222  19932  14111  -1985   2845  -4372       N
ATOM   1416  CA  ILE A 202      19.329 -13.194  10.578  1.00130.90           C
ANISOU 1416  CA  ILE A 202    16455  19964  13316  -2620   2685  -3800       C
ATOM   1417  C   ILE A 202      18.415 -13.521  11.753  1.00131.28           C
ANISOU 1417  C   ILE A 202    16091  21164  12624  -3172   2862  -3971       C
ATOM   1418  O   ILE A 202      18.397 -12.795  12.753  1.00135.09           O
ANISOU 1418  O   ILE A 202    16172  22234  12923  -3097   3064  -4559       O
ATOM   1419  CB  ILE A 202      20.810 -13.404  10.953  1.00127.31           C
ANISOU 1419  CB  ILE A 202    16478  19040  12854  -2612   3627  -3627       C
ATOM   1420  CG1 ILE A 202      21.303 -12.309  11.897  1.00124.77           C
ANISOU 1420  CG1 ILE A 202    15849  18944  12614  -2380   2676  -4287       C
ATOM   1421  CG2 ILE A 202      21.688 -13.417   9.706  1.00116.81           C
ANISOU 1421  CG2 ILE A 202    15569  16721  12091  -2200   2302  -3297       C
ATOM   1422  CD1 ILE A 202      22.774 -12.424  12.228  1.00122.44           C
ANISOU 1422  CD1 ILE A 202    15956  18231  12337  -2351   2501  -4150       C
ATOM   1423  N   ASP A 203      17.638 -14.594  11.623  1.00139.89           N
ANISOU 1423  N   ASP A 203    17254  22624  13272  -3746   2775  -3474       N
ATOM   1424  CA  ASP A 203      16.806 -15.114  12.702  1.00139.39           C
ANISOU 1424  CA  ASP A 203    16840  23723  12400  -4444   2902  -3445       C
ATOM   1425  C   ASP A 203      17.603 -16.213  13.397  1.00140.05           C
ANISOU 1425  C   ASP A 203    17500  23740  11973  -5040   2638  -2849       C
ATOM   1426  O   ASP A 203      17.833 -17.282  12.821  1.00137.66           O
ANISOU 1426  O   ASP A 203    17791  22840  11674  -5333   2301  -2174       O
ATOM   1427  CB  ASP A 203      15.475 -15.640  12.166  1.00141.98           C
ANISOU 1427  CB  ASP A 203    16891  24516  12538  -4814   2924  -3201       C
ATOM   1428  CG  ASP A 203      14.438 -15.846  13.259  1.00149.90           C
ANISOU 1428  CG  ASP A 203    17276  26957  12722  -5460   3153  -3331       C
ATOM   1429  OD1 ASP A 203      14.826 -16.074  14.424  1.00153.26           O
ANISOU 1429  OD1 ASP A 203    17711  27948  12572  -5866   3187  -3303       O
ATOM   1430  OD2 ASP A 203      13.229 -15.782  12.950  1.00153.25           O
ANISOU 1430  OD2 ASP A 203    17163  28029  13036  -5572   3299  -3452       O
ATOM   1431  N   SER A 204      18.013 -15.948  14.640  1.00148.41           N
```

[2099]

```
ANISOU 1431  N   SER A 204    18385  25416  12588  -5192   2757  -3123       N
ATOM   1432  CA  SER A 204      18.952 -16.824  15.331  1.00143.56           C
ANISOU 1432  CA  SER A 204    18325  24667  11552  -5621   2477  -2602       C
ATOM   1433  C   SER A 204      18.305 -18.115  15.810  1.00148.68           C
ANISOU 1433  C   SER A 204    19137  25897  11457  -6574   2294  -1885       C
ATOM   1434  O   SER A 204      18.962 -19.161  15.823  1.00148.03           O
ANISOU 1434  O   SER A 204    19747  25262  11236  -6907   1887  -1202       O
ATOM   1435  CB  SER A 204      19.578 -16.086  16.512  1.00146.08           C
ANISOU 1435  CB  SER A 204    18369  25530  11604  -5485   2653  -3144       C
ATOM   1436  OG  SER A 204      20.756 -16.735  16.947  1.00144.91           O
ANISOU 1436  OG  SER A 204    18807  24986  11265  -5649   2343  -2701       O
ATOM   1437  N   SER A 205      17.032 -18.070  16.207  1.00154.48           N
ANISOU 1437  N   SER A 205    19243  27743  11707  -7030   2553  -2014       N
ATOM   1438  CA  SER A 205      16.380 -19.278  16.703  1.00160.46           C
ANISOU 1438  CA  SER A 205    20116  29136  11716  -8065   2371  -1271       C
ATOM   1439  C   SER A 205      16.180 -20.293  15.583  1.00157.87           C
ANISOU 1439  C   SER A 205    20391  27875  11715  -8307   1975   -584       C
ATOM   1440  O   SER A 205      16.577 -21.458  15.706  1.00159.25           O
ANISOU 1440  O   SER A 205    21256  27593  11660  -8863   1526    184       O
ATOM   1441  CB  SER A 205      15.045 -18.927  17.366  1.00167.93           C
ANISOU 1441  CB  SER A 205    20131  31646  12029  -8495   2776  -1618       C
ATOM   1442  OG  SER A 205      14.183 -18.242  16.474  1.00166.32           O
ANISOU 1442  OG  SER A 205    19427  31464  12303  -8009   3012  -2111       O
ATOM   1443  N   SER A 206      15.578 -19.864  14.473  1.00160.07           N
ANISOU 1443  N   SER A 206    20440  27834  12545  -7868   2093   -868       N
ATOM   1444  CA  SER A 206      15.411 -20.753  13.331  1.00157.57           C
ANISOU 1444  CA  SER A 206    20673  26627  12568  -8014   1714   -324       C
ATOM   1445  C   SER A 206      16.718 -21.007  12.591  1.00150.83           C
ANISOU 1445  C   SER A 206    20623  24381  12306  -7429   1354   -150       C
ATOM   1446  O   SER A 206      16.735 -21.842  11.680  1.00152.96           O
ANISOU 1446  O   SER A 206    21437  23854  12829  -7512    971    282       O
ATOM   1447  CB  SER A 206      14.371 -20.180  12.369  1.00156.52           C
ANISOU 1447  CB  SER A 206    19999  26671  12801  -7694   1949   -697       C
ATOM   1448  OG  SER A 206      14.767 -18.903  11.901  1.00151.48           O
ANISOU 1448  OG  SER A 206    19082  25686  12786  -6689   2215  -1394       O
ATOM   1449  N   ASN A 207      17.796 -20.306  12.950  1.00142.07           N
ANISOU 1449  N   ASN A 207    19562  23018  11401  -6842   1457   -512       N
ATOM   1450  CA  ASN A 207      19.128 -20.525  12.385  1.00136.57           C
ANISOU 1450  CA  ASN A 207    19539  21185  11166  -6303   1136   -367       C
ATOM   1451  C   ASN A 207      19.128 -20.273  10.875  1.00137.38           C
ANISOU 1451  C   ASN A 207    19745  20480  11971  -5676   1092   -494       C
ATOM   1452  O   ASN A 207      19.390 -21.164  10.063  1.00129.39           O
ANISOU 1452  O   ASN A 207    19316  18704  11140  -5672    691    -85       O
ATOM   1453  CB  ASN A 207      19.630 -21.936  12.715  1.00139.20           C
ANISOU 1453  CB  ASN A 207    20643  21095  11153  -6851    593    381       C
ATOM   1454  CG  ASN A 207      21.139 -22.011  12.807  1.00137.01           C
ANISOU 1454  CG  ASN A 207    20870  20108  11078  -6346    339    411       C
ATOM   1455  OD1 ASN A 207      21.782 -21.134  13.391  1.00134.55           O
ANISOU 1455  OD1 ASN A 207    20265  20075  10784  -5986    600    -21       O
ATOM   1456  ND2 ASN A 207      21.717 -23.063  12.230  1.00135.11           N
ANISOU 1456  ND2 ASN A 207    21378  18964  10992  -6298   -198    883       N
ATOM   1457  N   SER A 208      18.834 -19.027  10.509  1.00135.16           N
ANISOU 1457  N   SER A 208    18889  20385  12079  -5122   1483  -1086       N
ATOM   1458  CA  SER A 208      18.654 -18.685   9.110  1.00124.52           C
ANISOU 1458  CA  SER A 208    17527  18454  11329  -4582   1479  -1187       C
ATOM   1459  C   SER A 208      18.944 -17.210   8.891  1.00126.51           C
ANISOU 1459  C   SER A 208    17336  18944  11786  -3984   1773  -1793       C
ATOM   1460  O   SER A 208      18.716 -16.377   9.773  1.00124.37           O
ANISOU 1460  O   SER A 208    16573  18992  11690  -3816   2109  -2262       O
ATOM   1461  CB  SER A 208      17.234 -19.003   8.637  1.00130.97           C
ANISOU 1461  CB  SER A 208    18040  19703  12018  -4962   1520  -1082       C
ATOM   1462  OG  SER A 208      16.314 -18.067   9.168  1.00131.12           O
ANISOU 1462  OG  SER A 208    17271  20637  11912  -4948   1939  -1579       O
ATOM   1463  N   ALA A 209      19.440 -16.902   7.695  1.00121.80           N
ANISOU 1463  N   ALA A 209    16924  17293  12060  -3268   1720  -1779       N
ATOM   1464  CA  ALA A 209      19.652 -15.540   7.230  1.00119.78           C
ANISOU 1464  CA  ALA A 209    16314  16822  12373  -2603   1950  -2226       C
ATOM   1465  C   ALA A 209      18.694 -15.250   6.083  1.00124.96           C
```

[2100]

```
ANISOU 1465  C   ALA A 209    16708  17418  13354  -2359   1999  -2240       C
ATOM   1466  O   ALA A 209      18.439 -16.117   5.241  1.00121.92           O
ANISOU 1466  O   ALA A 209    16612  16786  12924  -2497   1773  -1852       O
ATOM   1467  CB  ALA A 209      21.096 -15.330   6.768  1.00120.59           C
ANISOU 1467  CB  ALA A 209    16794  16185  12841  -2157   1805  -2138       C
ATOM   1468  N   SER A 210      18.171 -14.027   6.044  1.00124.96           N
ANISOU 1468  N   SER A 210    16170  17621  13688  -1968   2253  -2710       N
ATOM   1469  CA  SER A 210      17.166 -13.656   5.058  1.00120.59           C
ANISOU 1469  CA  SER A 210    15288  17111  13420  -1706   2299  -2756       C
ATOM   1470  C   SER A 210      17.574 -12.370   4.357  1.00120.07           C
ANISOU 1470  C   SER A 210    15080  16501  14040   -999   2351  -2985       C
ATOM   1471  O   SER A 210      17.893 -11.373   5.013  1.00124.70           O
ANISOU 1471  O   SER A 210    15447  17080  14851   -745   2490  -3425       O
ATOM   1472  CB  SER A 210      15.793 -13.488   5.715  1.00126.06           C
ANISOU 1472  CB  SER A 210    15364  18746  13785  -1959   2515  -3093       C
ATOM   1473  OG  SER A 210      15.410 -14.668   6.402  1.00132.76           O
ANISOU 1473  OG  SER A 210    16330  20149  13963  -2726   2453  -2800       O
ATOM   1474  N   LEU A 211      17.569 -12.401   3.027  1.00119.51           N
ANISOU 1474  N   LEU A 211    15145  15977  14288   -714   2210  -2675       N
ATOM   1475  CA  LEU A 211      17.748 -11.215   2.202  1.00115.83           C
ANISOU 1475  CA  LEU A 211    14516  15039  14453   -107   2220  -2767       C
ATOM   1476  C   LEU A 211      16.378 -10.729   1.748  1.00114.52           C
ANISOU 1476  C   LEU A 211    13851  15226  14436    113   2288  -2954       C
ATOM   1477  O   LEU A 211      15.563 -11.524   1.269  1.00114.36           O
ANISOU 1477  O   LEU A 211    13782  15541  14131   -128   2226  -2736       O
ATOM   1478  CB  LEU A 211      18.635 -11.515   0.994  1.00106.53           C
ANISOU 1478  CB  LEU A 211    13750  13257  13471     82   2020  -2280       C
ATOM   1479  CG  LEU A 211      18.914 -10.350   0.042  1.00110.75           C
ANISOU 1479  CG  LEU A 211    14158  13306  14615    619   1992  -2216       C
ATOM   1480  CD1 LEU A 211      19.776  -9.299   0.718  1.00111.41           C
ANISOU 1480  CD1 LEU A 211    14214  13060  15058    788   2059  -2488       C
ATOM   1481  CD2 LEU A 211      19.568 -10.836  -1.252  1.00111.46           C
ANISOU 1481  CD2 LEU A 211    14564  13061  14725    741   1809  -1702       C
ATOM   1482  N   THR A 212      16.124  -9.434   1.908  1.00118.58           N
ANISOU 1482  N   THR A 212    13995  15655  15405    578   2376  -3377       N
ATOM   1483  CA  THR A 212      14.810  -8.858   1.651  1.00123.06           C
ANISOU 1483  CA  THR A 212    14018  16615  16123    882   2428  -3668       C
ATOM   1484  C   THR A 212      14.933  -7.702   0.670  1.00126.84           C
ANISOU 1484  C   THR A 212    14448  16428  17316   1525   2289  -3607       C
ATOM   1485  O   THR A 212      15.741  -6.790   0.876  1.00126.73           O
ANISOU 1485  O   THR A 212    14557  15840  17752   1794   2247  -3753       O
ATOM   1486  CB  THR A 212      14.155  -8.380   2.952  1.00126.37           C
ANISOU 1486  CB  THR A 212    13944  17712  16358    881   2632  -4364       C
ATOM   1487  OG1 THR A 212      13.883  -9.510   3.789  1.00126.91           O
ANISOU 1487  OG1 THR A 212    14008  18525  15687    200   2748  -4311       O
ATOM   1488  CG2 THR A 212      12.855  -7.646   2.660  1.00131.52           C
ANISOU 1488  CG2 THR A 212    13980  18760  17230   1343   2658  -4747       C
ATOM   1489  N   ILE A 213      14.126  -7.745  -0.387  1.00127.78           N
ANISOU 1489  N   ILE A 213    14389  16630  17530   1729   2188  -3365       N
ATOM   1490  CA  ILE A 213      14.102  -6.718  -1.422  1.00132.39           C
ANISOU 1490  CA  ILE A 213    14914  16645  18742   2312   2011  -3197       C
ATOM   1491  C   ILE A 213      12.717  -6.089  -1.410  1.00139.61           C
ANISOU 1491  C   ILE A 213    15228  18008  19809   2722   2014  -3618       C
ATOM   1492  O   ILE A 213      11.744  -6.705  -1.864  1.00138.94           O
ANISOU 1492  O   ILE A 213    14881  18507  19403   2610   2017  -3509       O
ATOM   1493  CB  ILE A 213      14.428  -7.288  -2.808  1.00129.92           C
ANISOU 1493  CB  ILE A 213    14906  16070  18387   2265   1847  -2737       C
ATOM   1494  CG1 ILE A 213      15.642  -8.217  -2.737  1.00126.68           C
ANISOU 1494  CG1 ILE A 213    15022  15458  17653   1835   1851  -2174       C
ATOM   1495  CG2 ILE A 213      14.678  -6.161  -3.798  1.00135.21           C
ANISOU 1495  CG2 ILE A 213    15582  16101  19690   2793   1652  -2225       C
ATOM   1496  CD1 ILE A 213      15.873  -9.008  -4.005  1.00113.81           C
ANISOU 1496  CD1 ILE A 213    13654  13759  15829   1767   1696  -1615       C
ATOM   1497  N   SER A 214      12.622  -4.867  -0.894  1.00146.01           N
ANISOU 1497  N   SER A 214    15808  18556  21113   3214   1983  -4133       N
ATOM   1498  CA  SER A 214      11.365  -4.132  -0.881  1.00152.50           C
ANISOU 1498  CA  SER A 214    16041  19748  22156   3758   1936  -4614       C
ATOM   1499  C   SER A 214      11.221  -3.330  -2.167  1.00154.07           C
```

[2101]

```
ANISOU 1499  C   SER A 214    16275  19296  22969   4319   1631  -4220       C
ATOM   1500  O   SER A 214      12.177  -2.705  -2.633  1.00152.76           O
ANISOU 1500  O   SER A 214    16516  18227  23299   4459   1449  -3868       O
ATOM   1501  CB  SER A 214      11.291  -3.204   0.333  1.00157.87           C
ANISOU 1501  CB  SER A 214    16448  20466  23070   4093   1998  -5463       C
ATOM   1502  OG  SER A 214      12.378  -2.295   0.352  1.00157.62           O
ANISOU 1502  OG  SER A 214    16822  19406  23659   4315   1823  -5436       O
ATOM   1503  N   GLY A 215      10.018  -3.353  -2.738  1.00153.19           N
ANISOU 1503  N   GLY A 215    15713  19699  22792   4604   1563  -4246       N
ATOM   1504  CA  GLY A 215       9.774  -2.670  -3.993  1.00150.20           C
ANISOU 1504  CA  GLY A 215    15335  18814  22919   5127   1250  -3817       C
ATOM   1505  C   GLY A 215      10.601  -3.243  -5.124  1.00148.55           C
ANISOU 1505  C   GLY A 215    15627  18202  22615   4791   1159  -2940       C
ATOM   1506  O   GLY A 215      11.614  -2.660  -5.522  1.00146.72           O
ANISOU 1506  O   GLY A 215    15804  17135  22808   4869   1006  -2555       O
ATOM   1507  N   LEU A 216      10.178  -4.390  -5.647  1.00149.71           N
ANISOU 1507  N   LEU A 216    15723  18979  22182   4398   1238  -2643       N
ATOM   1508  CA  LEU A 216      10.944  -5.075  -6.676  1.00145.41           C
ANISOU 1508  CA  LEU A 216    15623  18188  21439   4087   1161  -1923       C
ATOM   1509  C   LEU A 216      10.947  -4.290  -7.981  1.00142.27           C
ANISOU 1509  C   LEU A 216    15247  17330  21480   4562    864  -1389       C
ATOM   1510  O   LEU A 216      10.008  -3.556  -8.299  1.00143.86           O
ANISOU 1510  O   LEU A 216    15059  17608  21993   5085    692  -1507       O
ATOM   1511  CB  LEU A 216      10.381  -6.474  -6.922  1.00145.76           C
ANISOU 1511  CB  LEU A 216    15603  18990  20790   3588   1250  -1818       C
ATOM   1512  CG  LEU A 216      10.932  -7.592  -6.038  1.00141.40           C
ANISOU 1512  CG  LEU A 216    15350  18650  19725   2914   1453  -1935       C
ATOM   1513  CD1 LEU A 216      10.251  -8.909  -6.368  1.00143.70           C
ANISOU 1513  CD1 LEU A 216    15592  19594  19415   2426   1444  -1807       C
ATOM   1514  CD2 LEU A 216      12.436  -7.709  -6.214  1.00134.50           C
ANISOU 1514  CD2 LEU A 216    15064  17106  18933   2772   1427  -1569       C
ATOM   1515  N   LYS A 217      12.027  -4.454  -8.738  1.00141.24           N
ANISOU 1515  N   LYS A 217    15554  16771  21340   4383    790   -783       N
ATOM   1516  CA  LYS A 217      12.155  -3.905 -10.076  1.00138.86           C
ANISOU 1516  CA  LYS A 217    15307  16162  21292   4687    521   -130       C
ATOM   1517  C   LYS A 217      12.459  -5.032 -11.053  1.00138.10           C
ANISOU 1517  C   LYS A 217    15394  16465  20610   4345    531    342       C
ATOM   1518  O   LYS A 217      12.860  -6.131 -10.659  1.00137.31           O
ANISOU 1518  O   LYS A 217    15507  16635  20031   3884    707    204       O
ATOM   1519  CB  LYS A 217      13.255  -2.837 -10.141  1.00139.10           C
ANISOU 1519  CB  LYS A 217    15645  15314  21891   4814    381    193       C
ATOM   1520  CG  LYS A 217      13.006  -1.638  -9.241  1.00142.93           C
ANISOU 1520  CG  LYS A 217    16006  15266  23037   5204    286   -308       C
ATOM   1521  CD  LYS A 217      14.120  -0.613  -9.368  1.00145.68           C
ANISOU 1521  CD  LYS A 217    16702  14684  23966   5231     89     73       C
ATOM   1522  CE  LYS A 217      13.873   0.584  -8.464  1.00149.46           C
ANISOU 1522  CE  LYS A 217    17101  14539  25147   5642    -72   -504       C
ATOM   1523  NZ  LYS A 217      15.000   1.557  -8.509  1.00151.46           N
ANISOU 1523  NZ  LYS A 217    17732  13828  25989   5560   -297   -146       N
ATOM   1524  N   THR A 218      12.262  -4.749 -12.342  1.00141.75           N
ANISOU 1524  N   THR A 218    15781  16965  21113   4599    302    892       N
ATOM   1525  CA  THR A 218      12.508  -5.765 -13.361  1.00138.74           C
ANISOU 1525  CA  THR A 218    15535  17022  20159   4350    276  1282       C
ATOM   1526  C   THR A 218      13.986  -6.127 -13.452  1.00135.07           C
ANISOU 1526  C   THR A 218    15504  16300  19516   4043    363  1566       C
ATOM   1527  O   THR A 218      14.323  -7.244 -13.861  1.00136.09           O
ANISOU 1527  O   THR A 218    15807  16802  19099   3773    403  1623       O
ATOM   1528  CB  THR A 218      11.992  -5.289 -14.720  1.00142.73           C
ANISOU 1528  CB  THR A 218    15823  17691  20716   4712      3  1819       C
ATOM   1529  OG1 THR A 218      12.572  -4.018 -15.037  1.00146.05           O
ANISOU 1529  OG1 THR A 218    16336  17462  21693   4993   -174  2289       O
ATOM   1530  CG2 THR A 218      10.474  -5.159 -14.700  1.00146.87           C
ANISOU 1530  CG2 THR A 218    15865  18646  21292   5010    -93  1503       C
ATOM   1531  N   GLU A 219      14.877  -5.209 -13.075  1.00134.44           N
ANISOU 1531  N   GLU A 219    15592  15600  19890   4091    366  1710       N
ATOM   1532  CA  GLU A 219      16.308  -5.482 -13.103  1.00131.99           C
ANISOU 1532  CA  GLU A 219    15621  15118  19413   3802    454  1960       C
ATOM   1533  C   GLU A 219      16.772  -6.355 -11.944  1.00127.00           C
```

[2102]

```
ANISOU 1533  C   GLU A 219    15206  14531  18518   3451    682   1442       C
ATOM   1534  O   GLU A 219      17.903  -6.852 -11.981  1.00123.82           O
ANISOU 1534  O   GLU A 219    15066  14125  17855   3227    748   1579       O
ATOM   1535  CB  GLU A 219      17.095  -4.169 -13.101  1.00132.85           C
ANISOU 1535  CB  GLU A 219    15813  14558  20107   3898    345   2329       C
ATOM   1536  CG  GLU A 219      16.815  -3.278 -11.900  1.00136.99           C
ANISOU 1536  CG  GLU A 219    16297  14518  21235   4031    353   1839       C
ATOM   1537  CD  GLU A 219      17.734  -2.073 -11.840  1.00137.57           C
ANISOU 1537  CD  GLU A 219    16534  13844  21894   4025    203   2178       C
ATOM   1538  OE1 GLU A 219      18.925  -2.214 -12.191  1.00137.00           O
ANISOU 1538  OE1 GLU A 219    16654  13761  21639   3721    243   2604       O
ATOM   1539  OE2 GLU A 219      17.264  -0.984 -11.446  1.00138.45           O
ANISOU 1539  OE2 GLU A 219    16569  13387  22648   4325     20   2003       O
ATOM   1540  N   ASP A 220      15.936  -6.552 -10.923  1.00126.84           N
ANISOU 1540  N   ASP A 220    15054  14616  18525   3402    791    866       N
ATOM   1541  CA  ASP A 220      16.306  -7.400  -9.796  1.00122.97           C
ANISOU 1541  CA  ASP A 220    14766  14216  17742   3029    980    433       C
ATOM   1542  C   ASP A 220      16.339  -8.879 -10.157  1.00118.66           C
ANISOU 1542  C   ASP A 220    14414  14110  16563   2734    972    458       C
ATOM   1543  O   ASP A 220      16.904  -9.670  -9.394  1.00114.59           O
ANISOU 1543  O   ASP A 220    14169  13593  15778   2418   1061    243       O
ATOM   1544  CB  ASP A 220      15.336  -7.178  -8.634  1.00125.93           C
ANISOU 1544  CB  ASP A 220    14880  14717  18251   3031   1096   -158       C
ATOM   1545  CG  ASP A 220      15.276  -5.727  -8.193  1.00132.39           C
ANISOU 1545  CG  ASP A 220    15527  15048  19728   3391   1054   -323       C
ATOM   1546  OD1 ASP A 220      16.326  -5.049  -8.227  1.00131.89           O
ANISOU 1546  OD1 ASP A 220    15682  14436  19996   3419   1003    -88       O
ATOM   1547  OD2 ASP A 220      14.178  -5.262  -7.811  1.00135.52           O
ANISOU 1547  OD2 ASP A 220    15557  15619  20314   3649   1047   -710       O
ATOM   1548  N   GLU A 221      15.760  -9.264 -11.293  1.00121.50           N
ANISOU 1548  N   GLU A 221    14661  14816  16687   2842    826    704       N
ATOM   1549  CA  GLU A 221      15.710 -10.659 -11.717  1.00116.70           C
ANISOU 1549  CA  GLU A 221    14252  14574  15515   2593    746    674       C
ATOM   1550  C   GLU A 221      17.109 -11.210 -11.959  1.00107.12           C
ANISOU 1550  C   GLU A 221    13421  13220  14058   2521    725    838       C
ATOM   1551  O   GLU A 221      17.770 -10.832 -12.931  1.00108.94           O
ANISOU 1551  O   GLU A 221    13640  13470  14285   2745    658   1230       O
ATOM   1552  CB  GLU A 221      14.855 -10.789 -12.980  1.00119.94           C
ANISOU 1552  CB  GLU A 221    14425  15391  15754   2778    565    897       C
ATOM   1553  CG  GLU A 221      14.637 -12.213 -13.463  1.00115.89           C
ANISOU 1553  CG  GLU A 221    14103  15240  14690   2526    420    791       C
ATOM   1554  CD  GLU A 221      13.509 -12.311 -14.476  1.00120.52           C
ANISOU 1554  CD  GLU A 221    14371  16299  15121   2651    248    888       C
ATOM   1555  OE1 GLU A 221      12.668 -11.387 -14.518  1.00120.00           O
ANISOU 1555  OE1 GLU A 221    13902  16325  15367   2886    265    942       O
ATOM   1556  OE2 GLU A 221      13.463 -13.305 -15.232  1.00122.27           O
ANISOU 1556  OE2 GLU A 221    14741  16802  14914   2544     65    878       O
ATOM   1557  N   ALA A 222      17.560 -12.106 -11.087  1.00110.49           N
ANISOU 1557  N   ALA A 222    14161  13567  14253   2216    766    555       N
ATOM   1558  CA  ALA A 222      18.902 -12.676 -11.154  1.00104.40           C
ANISOU 1558  CA  ALA A 222    13738  12677  13252   2196    729    623       C
ATOM   1559  C   ALA A 222      18.989 -13.808 -10.138  1.00102.88           C
ANISOU 1559  C   ALA A 222    13887  12410  12792   1839    697    285       C
ATOM   1560  O   ALA A 222      18.020 -14.119  -9.438  1.00103.65           O
ANISOU 1560  O   ALA A 222    13929  12597  12855   1551    720     57       O
ATOM   1561  CB  ALA A 222      19.976 -11.620 -10.888  1.00105.81           C
ANISOU 1561  CB  ALA A 222    13879  12555  13768   2324    862    808       C
ATOM   1562  N   ASP A 223      20.166 -14.425 -10.066  1.00 98.44           N
ANISOU 1562  N   ASP A 223    13658  11727  12018   1854    624    278       N
ATOM   1563  CA  ASP A 223      20.464 -15.416  -9.042  1.00 97.36           C
ANISOU 1563  CA  ASP A 223    13898  11427  11667   1550    549     28       C
ATOM   1564  C   ASP A 223      20.967 -14.718  -7.787  1.00100.31           C
ANISOU 1564  C   ASP A 223    14236  11588  12288   1426    765    -73       C
ATOM   1565  O   ASP A 223      21.707 -13.732  -7.865  1.00 99.90           O
ANISOU 1565  O   ASP A 223    14025  11428  12505   1633    899     59       O
ATOM   1566  CB  ASP A 223      21.511 -16.417  -9.533  1.00 96.77           C
ANISOU 1566  CB  ASP A 223    14195  11317  11256   1713    317     15       C
ANISOU 1566  CB  ASP A 223    14195  11317  11256   1713    317     15       C
ATOM   1567  CG  ASP A 223      20.945 -17.422 -10.518  1.00110.50           C
```

[2103]

```
ANISOU 1567  CG  ASP A 223    16080  13219  12684   1757     27    -42       C
ATOM   1568  OD1 ASP A 223      19.830 -17.924 -10.270  1.00111.20           O
ANISOU 1568  OD1 ASP A 223    16210  13324  12718   1420    -67   -147       O
ATOM   1569  OD2 ASP A 223      21.612 -17.708 -11.540  1.00107.81           O
ANISOU 1569  OD2 ASP A 223    15785  13046  12130   2113   -113     -2       O
ATOM   1570  N   TYR A 224      20.560 -15.233  -6.629  1.00104.36           N
ANISOU 1570  N   TYR A 224    14891  12071  12689   1047    779   -294       N
ATOM   1571  CA  TYR A 224      20.987 -14.698  -5.339  1.00 97.87           C
ANISOU 1571  CA  TYR A 224    14042  11131  12014    896    964   -455       C
ATOM   1572  C   TYR A 224      21.569 -15.834  -4.512  1.00 98.51           C
ANISOU 1572  C   TYR A 224    14564  11113  11754    615    808   -535       C
ATOM   1573  O   TYR A 224      20.849 -16.761  -4.126  1.00 97.07           O
ANISOU 1573  O   TYR A 224    14561  11015  11305    245    672   -583       O
ATOM   1574  CB  TYR A 224      19.829 -14.024  -4.608  1.00 97.76           C
ANISOU 1574  CB  TYR A 224    13665  11305  12174    721   1160   -665       C
ATOM   1575  CG  TYR A 224      19.348 -12.756  -5.272  1.00 99.04           C
ANISOU 1575  CG  TYR A 224    13409  11462  12758   1073   1273   -610       C
ATOM   1576  CD1 TYR A 224      20.010 -11.552  -5.074  1.00100.51           C
ANISOU 1576  CD1 TYR A 224    13456  11375  13357   1305   1392   -615       C
ATOM   1577  CD2 TYR A 224      18.227 -12.760  -6.089  1.00100.71           C
ANISOU 1577  CD2 TYR A 224    13379  11916  12972   1160   1215   -539       C
ATOM   1578  CE1 TYR A 224      19.572 -10.388  -5.674  1.00102.40           C
ANISOU 1578  CE1 TYR A 224    13374  11503  14029   1625   1419   -521       C
ATOM   1579  CE2 TYR A 224      17.781 -11.601  -6.693  1.00106.29           C
ANISOU 1579  CE2 TYR A 224    13723  12586  14076   1520   1263   -454       C
ATOM   1580  CZ  TYR A 224      18.457 -10.417  -6.483  1.00107.77           C
ANISOU 1580  CZ  TYR A 224    13827  12421  14701   1757   1350   -430       C
ATOM   1581  OH  TYR A 224      18.017  -9.259  -7.085  1.00107.96           O
ANISOU 1581  OH  TYR A 224    13548  12304  15166   2113   1324   -301       O
ATOM   1582  N   TYR A 225      22.869 -15.763  -4.247  1.00101.95           N
ANISOU 1582  N   TYR A 225    15165  11379  12193    769    796   -518       N
ATOM   1583  CA  TYR A 225      23.586 -16.772  -3.481  1.00100.51           C
ANISOU 1583  CA  TYR A 225    15407  11071  11711    598    605   -570       C
ATOM   1584  C   TYR A 225      23.956 -16.206  -2.116  1.00100.68           C
ANISOU 1584  C   TYR A 225    15345  11105  11804    393    795   -721       C
ATOM   1585  O   TYR A 225      24.484 -15.092  -2.026  1.00 93.20           O
ANISOU 1585  O   TYR A 225    14127  10132  11152    573    998   -768       O
ATOM   1586  CB  TYR A 225      24.852 -17.222  -4.220  1.00 97.64           C
ANISOU 1586  CB  TYR A 225    15264  10606  11228    990    408   -486       C
ATOM   1587  CG  TYR A 225      24.623 -17.887  -5.565  1.00 95.51           C
ANISOU 1587  CG  TYR A 225    15098  10382  10808   1243    180   -414       C
ATOM   1588  CD1 TYR A 225      24.603 -17.143  -6.740  1.00102.91           C
ANISOU 1588  CD1 TYR A 225    15697  11516  11886   1560    298   -275       C
ATOM   1589  CD2 TYR A 225      24.456 -19.262  -5.660  1.00 95.08           C
ANISOU 1589  CD2 TYR A 225    15497  10166  10463   1159   -192   -484       C
ATOM   1590  CE1 TYR A 225      24.408 -17.752  -7.973  1.00 96.22           C
ANISOU 1590  CE1 TYR A 225    14914  10806  10839   1803     88   -246       C
ATOM   1591  CE2 TYR A 225      24.259 -19.877  -6.878  1.00 98.33           C
ANISOU 1591  CE2 TYR A 225    16008  10622  10730   1412   -432   -504       C
ATOM   1592  CZ  TYR A 225      24.235 -19.120  -8.035  1.00105.25           C
ANISOU 1592  CZ  TYR A 225    16498  11797  11695   1744   -273   -404       C
ATOM   1593  OH  TYR A 225      24.037 -19.737  -9.252  1.00 97.36           O
ANISOU 1593  OH  TYR A 225    15569  10934  10491   2004   -514   -459       O
ATOM   1594  N   CYS A 226      23.673 -16.967  -1.062  1.00106.12           N
ANISOU 1594  N   CYS A 226    16268  11843  12210    -16    704   -782       N
ATOM   1595  CA  CYS A 226      24.154 -16.663   0.278  1.00105.38           C
ANISOU 1595  CA  CYS A 226    16157  11827  12057   -221    825   -927       C
ATOM   1596  C   CYS A 226      25.405 -17.481   0.571  1.00103.20           C
ANISOU 1596  C   CYS A 226    16302  11358  11549   -137    560   -839       C
ATOM   1597  O   CYS A 226      25.637 -18.538  -0.020  1.00101.25           O
ANISOU 1597  O   CYS A 226    16435  10915  11123    -28    234   -701       O
ATOM   1598  CB  CYS A 226      23.081 -16.941   1.337  1.00107.65           C
ANISOU 1598  CB  CYS A 226    16378  12426  12100   -754    898  -1018       C
ATOM   1599  SG  CYS A 226      22.424 -18.629   1.349  1.00114.71           S
ANISOU 1599  SG  CYS A 226    17753  13279  12553  -1231    516   -754       S
ATOM   1600  N   GLN A 227      26.215 -16.980   1.502  1.00104.30           N
ANISOU 1600  N   GLN A 227    16369  11561  11701   -156    671   -963       N
ATOM   1601  CA  GLN A 227      27.516 -17.596   1.751  1.00107.03           C
```

[2104]

```
ANISOU 1601  CA  GLN A 227    17030  11779  11858     13    428   -901       C
ATOM   1602  C   GLN A 227      27.992 -17.231   3.145  1.00 96.66           C
ANISOU 1602  C   GLN A 227    15649  10643  10436   -222    534  -1049       C
ATOM   1603  O   GLN A 227      28.132 -16.045   3.460  1.00 99.08           O
ANISOU 1603  O   GLN A 227    15574  11072  10999   -198    820  -1256       O
ATOM   1604  CB  GLN A 227      28.533 -17.149   0.694  1.00 93.95           C
ANISOU 1604  CB  GLN A 227    15234  10057  10406    522    435   -867       C
ATOM   1605  CG  GLN A 227      29.987 -17.446   1.042  1.00 99.80           C
ANISOU 1605  CG  GLN A 227    16114  10815  10992    747    266   -883       C
ATOM   1606  CD  GLN A 227      30.669 -16.296   1.767  1.00 94.34           C
ANISOU 1606  CD  GLN A 227    15081  10279  10487    679    519  -1026       C
ATOM   1607  OE1 GLN A 227      30.360 -15.129   1.536  1.00 93.03           O
ANISOU 1607  OE1 GLN A 227    14548  10127  10671    646    795  -1087       O
ATOM   1608  NE2 GLN A 227      31.599 -16.627   2.649  1.00 94.56           N
ANISOU 1608  NE2 GLN A 227    15242  10392  10295    661    382  -1086       N
ATOM   1609  N   THR A 228      28.239 -18.243   3.976  1.00 98.11           N
ANISOU 1609  N   THR A 228    16215  10821  10241   -452    266   -943       N
ATOM   1610  CA  THR A 228      28.948 -18.035   5.233  1.00102.63           C
ANISOU 1610  CA  THR A 228    16763  11596  10634   -607    294  -1050       C
ATOM   1611  C   THR A 228      30.220 -18.874   5.234  1.00101.01           C
ANISOU 1611  C   THR A 228    16927  11213  10240   -316    -79   -917       C
ATOM   1612  O   THR A 228      30.738 -19.216   4.167  1.00108.90           O
ANISOU 1612  O   THR A 228    18040  11995  11342    122   -253   -854       O
ATOM   1613  CB  THR A 228      28.068 -18.374   6.440  1.00102.28           C
ANISOU 1613  CB  THR A 228    16768  11852  10240  -1193    323  -1029       C
ATOM   1614  OG1 THR A 228      28.832 -18.214   7.641  1.00107.46           O
ANISOU 1614  OG1 THR A 228    17406  12757  10665  -1318    321  -1130       O
ATOM   1615  CG2 THR A 228      27.557 -19.804   6.362  1.00105.09           C
ANISOU 1615  CG2 THR A 228    17634  12010  10285  -1471    -65   -674       C
ATOM   1616  N   TYR A 229      30.733 -19.213   6.410  1.00109.19           N
ANISOU 1616  N   TYR A 229    18122  12396  10969   -516   -219   -894       N
ATOM   1617  CA  TYR A 229      32.001 -19.922   6.495  1.00111.05           C
ANISOU 1617  CA  TYR A 229    18655  12506  11033   -175   -591   -805       C
ATOM   1618  C   TYR A 229      32.057 -20.686   7.809  1.00106.52           C
ANISOU 1618  C   TYR A 229    18416  12027  10029   -551   -858   -629       C
ATOM   1619  O   TYR A 229      31.094 -20.716   8.579  1.00108.23           O
ANISOU 1619  O   TYR A 229    18626  12451  10045  -1107   -745   -551       O
ATOM   1620  CB  TYR A 229      33.183 -18.955   6.370  1.00104.33           C
ANISOU 1620  CB  TYR A 229    17404  11859  10379    177   -402  -1029       C
ATOM   1621  CG  TYR A 229      33.124 -17.772   7.314  1.00103.11           C
ANISOU 1621  CG  TYR A 229    16831  12040  10306   -139    -37  -1282       C
ATOM   1622  CD1 TYR A 229      32.343 -16.662   7.019  1.00106.22           C
ANISOU 1622  CD1 TYR A 229    16841  12468  11050   -264    349  -1471       C
ATOM   1623  CD2 TYR A 229      33.860 -17.758   8.491  1.00113.60           C
ANISOU 1623  CD2 TYR A 229    18151  13644  11367   -272   -117  -1367       C
ATOM   1624  CE1 TYR A 229      32.288 -15.581   7.867  1.00101.37           C
ANISOU 1624  CE1 TYR A 229    15870  12101  10545   -489    626  -1788       C
ATOM   1625  CE2 TYR A 229      33.810 -16.675   9.352  1.00104.35           C
ANISOU 1625  CE2 TYR A 229    16598  12788  10261   -540    187  -1681       C
ATOM   1626  CZ  TYR A 229      33.022 -15.591   9.031  1.00103.10           C
ANISOU 1626  CZ  TYR A 229    16086  12606  10483   -635    550  -1916       C
ATOM   1627  OH  TYR A 229      32.964 -14.508   9.871  1.00104.55           O
ANISOU 1627  OH  TYR A 229    15913  13044  10769   -842    801  -2310       O
ATOM   1628  N   ASP A 230      33.190 -21.344   8.021  1.00111.15           N
ANISOU 1628  N   ASP A 230    19282  12509  10443   -227  -1240   -545       N
ATOM   1629  CA  ASP A 230      33.601 -21.893   9.307  1.00116.10           C
ANISOU 1629  CA  ASP A 230    20163  13285  10666   -477  -1514   -378       C
ATOM   1630  C   ASP A 230      35.113 -21.762   9.359  1.00116.36           C
ANISOU 1630  C   ASP A 230    20086  13436  10689     54  -1662   -525       C
ATOM   1631  O   ASP A 230      35.740 -21.367   8.367  1.00122.47           O
ANISOU 1631  O   ASP A 230    20617  14179  11736    557  -1571   -714       O
ATOM   1632  CB  ASP A 230      33.146 -23.354   9.468  1.00115.84           C
ANISOU 1632  CB  ASP A 230    20813  12829  10371   -691  -2061     44       C
ATOM   1633  CG  ASP A 230      33.940 -24.323   8.606  1.00117.00           C
ANISOU 1633  CG  ASP A 230    21399  12445  10611    -37  -2595     98       C
ATOM   1634  OD1 ASP A 230      34.365 -23.941   7.496  1.00122.95           O
ANISOU 1634  OD1 ASP A 230    21908  13156  11652    510  -2462   -166       O
ATOM   1635  OD2 ASP A 230      34.134 -25.479   9.038  1.00121.53           O
```

[2105]

```
ANISOU 1635  OD2 ASP A 230    22563  12657  10955    -60  -3177    404       O
ATOM   1636  N   PRO A 231      35.741 -22.056  10.503  1.00119.87           N
ANISOU 1636  N   PRO A 231    20652  14108  10786    -61  -1887   -433       N
ATOM   1637  CA  PRO A 231      37.207 -21.918  10.573  1.00125.82           C
ANISOU 1637  CA  PRO A 231    21237  15061  11507    451  -2038   -593       C
ATOM   1638  C   PRO A 231      37.966 -22.738   9.543  1.00123.03           C
ANISOU 1638  C   PRO A 231    21139  14360  11245   1172  -2455   -571       C
ATOM   1639  O   PRO A 231      39.169 -22.506   9.368  1.00126.93           O
ANISOU 1639  O   PRO A 231    21359  15126  11744   1658  -2511   -762       O
ATOM   1640  CB  PRO A 231      37.537 -22.382  11.996  1.00120.38           C
ANISOU 1640  CB  PRO A 231    20765  14618  10357    167  -2322   -401       C
ATOM   1641  CG  PRO A 231      36.336 -22.041  12.763  1.00120.71           C
ANISOU 1641  CG  PRO A 231    20737  14886  10240   -570  -2018   -332       C
ATOM   1642  CD  PRO A 231      35.171 -22.286  11.847  1.00121.28           C
ANISOU 1642  CD  PRO A 231    20972  14554  10554   -704  -1924   -224       C
ATOM   1643  N   TYR A 232      37.316 -23.675   8.853  1.00123.36           N
ANISOU 1643  N   TYR A 232    21660  13864  11346   1263  -2758   -388       N
ATOM   1644  CA  TYR A 232      38.013 -24.582   7.956  1.00122.33           C
ANISOU 1644  CA  TYR A 232    21829  13391  11258   2000  -3240   -437       C
ATOM   1645  C   TYR A 232      37.605 -24.478   6.491  1.00122.42           C
ANISOU 1645  C   TYR A 232    21731  13220  11562   2302  -3086   -604       C
ATOM   1646  O   TYR A 232      38.293 -25.059   5.644  1.00126.04           O
ANISOU 1646  O   TYR A 232    22295  13556  12038   3002  -3415   -766       O
ATOM   1647  CB  TYR A 232      37.824 -26.037   8.419  1.00127.65           C
ANISOU 1647  CB  TYR A 232    23300  13481  11719   1978  -3951    -99       C
ATOM   1648  CG  TYR A 232      38.485 -26.353   9.747  1.00139.51           C
ANISOU 1648  CG  TYR A 232    24973  15158  12878   1864  -4263    108       C
ATOM   1649  CD1 TYR A 232      39.578 -25.621  10.195  1.00136.25           C
ANISOU 1649  CD1 TYR A 232    24048  15355  12364   2112  -4064   -123       C
ATOM   1650  CD2 TYR A 232      38.015 -27.385  10.553  1.00140.70           C
ANISOU 1650  CD2 TYR A 232    25789  14884  12784   1466  -4781    570       C
ATOM   1651  CE1 TYR A 232      40.184 -25.905  11.405  1.00145.36           C
ANISOU 1651  CE1 TYR A 232    25333  16726  13171   2019  -4363     60       C
ATOM   1652  CE2 TYR A 232      38.615 -27.677  11.768  1.00145.82           C
ANISOU 1652  CE2 TYR A 232    26593  15734  13077   1353  -5090    814       C
ATOM   1653  CZ  TYR A 232      39.699 -26.934  12.188  1.00148.30           C
ANISOU 1653  CZ  TYR A 232    26373  16690  13284   1658  -4874    536       C
ATOM   1654  OH  TYR A 232      40.303 -27.219  13.389  1.00144.56           O
ANISOU 1654  OH  TYR A 232    26028  16471  12426   1561  -5195    769       O
ATOM   1655  N   SER A 233      36.529 -23.766   6.155  1.00122.75           N
ANISOU 1655  N   SER A 233    21540  13295  11805   1847  -2620   -598       N
ATOM   1656  CA  SER A 233      36.060 -23.773   4.774  1.00111.49           C
ANISOU 1656  CA  SER A 233    20058  11692  10609   2109  -2534   -705       C
ATOM   1657  C   SER A 233      35.074 -22.635   4.544  1.00109.64           C
ANISOU 1657  C   SER A 233    19387  11657  10613   1642  -1934   -727       C
ATOM   1658  O   SER A 233      34.587 -22.001   5.481  1.00112.94           O
ANISOU 1658  O   SER A 233    19630  12270  11013   1099  -1639   -682       O
ATOM   1659  CB  SER A 233      35.408 -25.113   4.424  1.00116.15           C
ANISOU 1659  CB  SER A 233    21335  11650  11147   2136  -3075   -552       C
ATOM   1660  OG  SER A 233      34.259 -25.334   5.221  1.00114.93           O
ANISOU 1660  OG  SER A 233    21453  11302  10912   1362  -3065   -253       O
ATOM   1661  N   VAL A 234      34.786 -22.392   3.266  1.00115.09           N
ANISOU 1661  N   VAL A 234    19893  12327  11510   1903  -1786   -821       N
ATOM   1662  CA  VAL A 234      33.736 -21.478   2.834  1.00107.28           C
ANISOU 1662  CA  VAL A 234    18566  11424  10771   1556  -1323   -815       C
ATOM   1663  C   VAL A 234      32.659 -22.303   2.145  1.00102.60           C
ANISOU 1663  C   VAL A 234    18342  10457  10185   1467  -1543   -716       C
ATOM   1664  O   VAL A 234      32.950 -23.334   1.529  1.00108.18           O
ANISOU 1664  O   VAL A 234    19434  10877  10793   1865  -1990   -747       O
ATOM   1665  CB  VAL A 234      34.286 -20.385   1.894  1.00 99.57           C
ANISOU 1665  CB  VAL A 234    17018  10787  10025   1876   -965   -941       C
ATOM   1666  CG1 VAL A 234      33.232 -19.324   1.626  1.00 98.29           C
ANISOU 1666  CG1 VAL A 234    16514  10671  10161   1516   -522   -915       C
ATOM   1667  CG2 VAL A 234      35.542 -19.764   2.479  1.00 99.97           C
ANISOU 1667  CG2 VAL A 234    16747  11196  10041   1996   -864  -1039       C
ATOM   1668  N   VAL A 235      31.406 -21.863   2.263  1.00101.32           N
ANISOU 1668  N   VAL A 235    18050  10310  10135    956  -1259   -639       N
ATOM   1669  CA  VAL A 235      30.281 -22.598   1.690  1.00102.32           C
```

[2106]

```
ANISOU 1669  CA  VAL A 235    18477  10146  10256    757  -1452   -534       C
ATOM   1670  C   VAL A 235      29.331 -21.618   1.015  1.00103.79           C
ANISOU 1670  C   VAL A 235    18194  10550  10690    620  -1007   -581       C
ATOM   1671  O   VAL A 235      28.853 -20.673   1.654  1.00102.18           O
ANISOU 1671  O   VAL A 235    17626  10608  10590    279   -616   -611       O
ATOM   1672  CB  VAL A 235      29.525 -23.429   2.740  1.00105.47           C
ANISOU 1672  CB  VAL A 235    19305  10344  10425    128  -1706   -299       C
ATOM   1673  CG1 VAL A 235      28.149 -23.812   2.223  1.00106.28           C
ANISOU 1673  CG1 VAL A 235    19513  10306  10560   -260  -1748   -193       C
ATOM   1674  CG2 VAL A 235      30.319 -24.678   3.091  1.00109.28           C
ANISOU 1674  CG2 VAL A 235    20407  10417  10698    330  -2325   -188       C
ATOM   1675  N   PHE A 236      29.052 -21.852  -0.270  1.00 99.25           N
ANISOU 1675  N   PHE A 236    17629   9882  10200    922  -1098   -617       N
ATOM   1676  CA  PHE A 236      28.081 -21.086  -1.043  1.00 97.47           C
ANISOU 1676  CA  PHE A 236    17018   9832  10186    833   -772   -618       C
ATOM   1677  C   PHE A 236      26.764 -21.844  -1.120  1.00 99.28           C
ANISOU 1677  C   PHE A 236    17503   9890  10329    402   -957   -523       C
ATOM   1678  O   PHE A 236      26.746 -23.034  -1.454  1.00101.76           O
ANISOU 1678  O   PHE A 236    18307   9866  10492    452  -1421   -498       O
ATOM   1679  CB  PHE A 236      28.590 -20.819  -2.461  1.00 97.48           C
ANISOU 1679  CB  PHE A 236    16804   9959  10276   1406   -749   -686       C
ATOM   1680  CG  PHE A 236      29.517 -19.649  -2.567  1.00 94.62           C
ANISOU 1680  CG  PHE A 236    15976   9902  10075   1659   -419   -702       C
ATOM   1681  CD1 PHE A 236      29.017 -18.369  -2.731  1.00 92.99           C
ANISOU 1681  CD1 PHE A 236    15306   9865  10163   1514    -16   -640       C
ATOM   1682  CD2 PHE A 236      30.888 -19.828  -2.515  1.00 95.29           C
ANISOU 1682  CD2 PHE A 236    16081  10098  10027   2037   -551   -774       C
ATOM   1683  CE1 PHE A 236      29.867 -17.290  -2.835  1.00 92.20           C
ANISOU 1683  CE1 PHE A 236    14819   9965  10248   1669    229   -609       C
ATOM   1684  CE2 PHE A 236      31.743 -18.753  -2.615  1.00 94.31           C
ANISOU 1684  CE2 PHE A 236    15504  10289  10040   2175   -264   -753       C
ATOM   1685  CZ  PHE A 236      31.233 -17.482  -2.778  1.00 92.83           C
ANISOU 1685  CZ  PHE A 236    14904  10195  10172   1956    115   -650       C
ATOM   1686  N   GLY A 237      25.666 -21.150  -0.834  1.00 98.69           N
ANISOU 1686  N   GLY A 237    17083  10056  10358     -6   -623   -495       N
ATOM   1687  CA  GLY A 237      24.359 -21.748  -0.991  1.00102.45           C
ANISOU 1687  CA  GLY A 237    17675  10507  10744   -446   -751   -404       C
ATOM   1688  C   GLY A 237      24.038 -22.061  -2.441  1.00100.87           C
ANISOU 1688  C   GLY A 237    17503  10210  10612   -132   -917   -443       C
ATOM   1689  O   GLY A 237      24.665 -21.560  -3.375  1.00 98.81           O
ANISOU 1689  O   GLY A 237    17037  10029  10479    414   -821   -527       O
ATOM   1690  N   CYS A 238      23.026 -22.912  -2.625  1.00103.39           N
ANISOU 1690  N   CYS A 238    18063  10411  10810   -534  -1182   -365       N
ATOM   1691  CA  CYS A 238      22.647 -23.333  -3.969  1.00109.73           C
ANISOU 1691  CA  CYS A 238    18929  11132  11633   -285  -1401   -441       C
ATOM   1692  C   CYS A 238      22.173 -22.163  -4.820  1.00105.48           C
ANISOU 1692  C   CYS A 238    17773  11010  11293    -30   -990   -485       C
ATOM   1693  O   CYS A 238      22.419 -22.140  -6.032  1.00106.76           O
ANISOU 1693  O   CYS A 238    17869  11218  11476    437  -1068   -561       O
ATOM   1694  CB  CYS A 238      21.565 -24.410  -3.898  1.00112.95           C
ANISOU 1694  CB  CYS A 238    19684  11345  11888   -886  -1770   -340       C
ATOM   1695  SG  CYS A 238      22.185 -26.058  -3.469  1.00137.81           S
ANISOU 1695  SG  CYS A 238    23741  13766  14855  -1022  -2504   -273       S
ATOM   1696  N   GLY A 239      21.502 -21.195  -4.221  1.00100.74           N
ANISOU 1696  N   GLY A 239    16717  10734  10825   -299   -584   -448       N
ATOM   1697  CA  GLY A 239      21.052 -20.056  -4.993  1.00101.47           C
ANISOU 1697  CA  GLY A 239    16259  11140  11154    -23   -257   -465       C
ATOM   1698  C   GLY A 239      19.562 -20.105  -5.272  1.00105.09           C
ANISOU 1698  C   GLY A 239    16470  11869  11589   -367   -234   -452       C
ATOM   1699  O   GLY A 239      18.963 -21.173  -5.436  1.00113.41           O
ANISOU 1699  O   GLY A 239    17818  12838  12434   -714   -557   -426       O
ATOM   1700  N   THR A 240      18.950 -18.926  -5.329  1.00104.38           N
ANISOU 1700  N   THR A 240    15826  12101  11731   -268    117   -480       N
ATOM   1701  CA  THR A 240      17.517 -18.789  -5.559  1.00109.82           C
ANISOU 1701  CA  THR A 240    16151  13165  12412   -521    182   -500       C
ATOM   1702  C   THR A 240      17.299 -17.898  -6.770  1.00106.49           C
ANISOU 1702  C   THR A 240    15343  12889  12229    -17    291   -453       C
ATOM   1703  O   THR A 240      17.709 -16.732  -6.767  1.00101.04           O
```

[2107]

```
ANISOU 1703  O   THR A 240    14371  12181  11841    341    539   -440       O
ATOM   1704  CB  THR A 240      16.812 -18.200  -4.335  1.00113.76           C
ANISOU 1704  CB  THR A 240    16282  14008  12934   -871    478   -622       C
ATOM   1705  OG1 THR A 240      17.035 -19.046  -3.201  1.00113.44           O
ANISOU 1705  OG1 THR A 240    16597  13898  12607  -1389    364   -595       O
ATOM   1706  CG2 THR A 240      15.317 -18.084  -4.588  1.00120.44           C
ANISOU 1706  CG2 THR A 240    16676  15354  13732  -1102    537   -674       C
ATOM   1707  N   LYS A 241      16.656 -18.445  -7.798  1.00109.55           N
ANISOU 1707  N   LYS A 241    15733  13410  12481    -14     71   -408       N
ATOM   1708  CA  LYS A 241      16.345 -17.681  -9.001  1.00110.29           C
ANISOU 1708  CA  LYS A 241    15454  13718  12734    429    131   -313       C
ATOM   1709  C   LYS A 241      15.143 -16.792  -8.714  1.00108.70           C
ANISOU 1709  C   LYS A 241    14685  13891  12723    360    362   -366       C
ATOM   1710  O   LYS A 241      14.015 -17.280  -8.587  1.00114.56           O
ANISOU 1710  O   LYS A 241    15272  14964  13292    -26    289   -447       O
ATOM   1711  CB  LYS A 241      16.077 -18.618 -10.177  1.00105.60           C
ANISOU 1711  CB  LYS A 241    15047  13198  11877    461   -211   -299       C
ATOM   1712  CG  LYS A 241      17.198 -19.613 -10.422  1.00110.32           C
ANISOU 1712  CG  LYS A 241    16212  13442  12263    581   -500   -356       C
ATOM   1713  CD  LYS A 241      17.016 -20.362 -11.721  1.00119.67           C
ANISOU 1713  CD  LYS A 241    17527  14734  13207    757   -837   -423       C
ATOM   1714  N   LEU A 242      15.380 -15.490  -8.598  1.00104.88           N
ANISOU 1714  N   LEU A 242    13884  13363  12602    731    610   -338       N
ATOM   1715  CA  LEU A 242      14.295 -14.542  -8.387  1.00110.82           C
ANISOU 1715  CA  LEU A 242    14085  14430  13590    823    787   -447       C
ATOM   1716  C   LEU A 242      13.693 -14.167  -9.733  1.00111.97           C
ANISOU 1716  C   LEU A 242    13942  14788  13812   1177    671   -259       C
ATOM   1717  O   LEU A 242      14.370 -13.574 -10.578  1.00112.34           O
ANISOU 1717  O   LEU A 242    14013  14636  14036   1594    642     -6       O
ATOM   1718  CB  LEU A 242      14.795 -13.299  -7.655  1.00106.89           C
ANISOU 1718  CB  LEU A 242    13420  13695  13499   1091   1026   -544       C
ATOM   1719  CG  LEU A 242      13.777 -12.160  -7.592  1.00110.23           C
ANISOU 1719  CG  LEU A 242    13278  14348  14256   1378   1147   -697       C
ATOM   1720  CD1 LEU A 242      12.545 -12.586  -6.808  1.00117.60           C
ANISOU 1720  CD1 LEU A 242    13891  15857  14935    999   1225  -1011       C
ATOM   1721  CD2 LEU A 242      14.390 -10.903  -6.999  1.00110.38           C
ANISOU 1721  CD2 LEU A 242    13212  13983  14743   1696   1297   -809       C
ATOM   1722  N   THR A 243      12.427 -14.516  -9.934  1.00113.27           N
ANISOU 1722  N   THR A 243    13810  15419  13810    977    597   -353       N
ATOM   1723  CA  THR A 243      11.718 -14.224 -11.172  1.00120.79           C
ANISOU 1723  CA  THR A 243    14445  16669  14782   1284    461   -193       C
ATOM   1724  C   THR A 243      10.827 -13.006 -10.960  1.00124.66           C
ANISOU 1724  C   THR A 243    14346  17398  15622   1608    607   -289       C
ATOM   1725  O   THR A 243       9.949 -13.018 -10.091  1.00128.72           O
ANISOU 1725  O   THR A 243    14540  18283  16087   1363    725   -589       O
ATOM   1726  CB  THR A 243      10.887 -15.426 -11.623  1.00124.73           C
ANISOU 1726  CB  THR A 243    14977  17554  14863    865    226   -254       C
ATOM   1727  OG1 THR A 243      11.754 -16.527 -11.925  1.00116.55           O
ANISOU 1727  OG1 THR A 243    14529  16203  13553    678     13   -208       O
ATOM   1728  CG2 THR A 243      10.073 -15.076 -12.857  1.00118.82           C
ANISOU 1728  CG2 THR A 243    13831  17207  14107   1184     86   -117       C
ATOM   1729  N   VAL A 244      11.058 -11.962 -11.745  1.00120.69           N
ANISOU 1729  N   VAL A 244    13691  16709  15458   2161    575    -34       N
ATOM   1730  CA  VAL A 244      10.238 -10.757 -11.704  1.00127.55           C
ANISOU 1730  CA  VAL A 244    14042  17699  16723   2591    617   -104       C
ATOM   1731  C   VAL A 244       9.123 -10.893 -12.730  1.00125.62           C
ANISOU 1731  C   VAL A 244    13416  17999  16313   2727    425      7       C
ATOM   1732  O   VAL A 244       9.344 -11.373 -13.848  1.00130.35           O
ANISOU 1732  O   VAL A 244    14179  18680  16670   2744    241    309       O
ATOM   1733  CB  VAL A 244      11.093  -9.502 -11.964  1.00127.34           C
ANISOU 1733  CB  VAL A 244    14098  17081  17206   3079    615    174       C
ATOM   1734  CG1 VAL A 244      10.230  -8.251 -11.931  1.00132.92           C
ANISOU 1734  CG1 VAL A 244    14324  17794  18385   3586    570     81       C
ATOM   1735  CG2 VAL A 244      12.207  -9.405 -10.936  1.00128.66           C
ANISOU 1735  CG2 VAL A 244    14617  16762  17508   2902    791     35       C
ATOM   1736  N   LEU A 245       7.918 -10.478 -12.351  1.00132.87           N
ANISOU 1736  N   LEU A 245    13787  19369  17326   2843    461   -277       N
ATOM   1737  CA  LEU A 245       6.761 -10.596 -13.231  1.00136.99           C
```

[2108]

```
ANISOU 1737  CA  LEU A 245    13866  20508  17677   2965    275   -219       C
ATOM   1738  C   LEU A 245       6.348  -9.241 -13.799  1.00140.40           C
ANISOU 1738  C   LEU A 245    13909  20860  18578   3708    154    -54       C
ATOM   1739  O   LEU A 245       6.902  -8.779 -14.798  1.00138.31           O
ANISOU 1739  O   LEU A 245    13822  20266  18464   4044    -11    418       O
ATOM   1740  CB  LEU A 245       5.589 -11.230 -12.482  1.00139.81           C
ANISOU 1740  CB  LEU A 245    13805  21600  17717   2517    359   -643       C
ATOM   1741  CG  LEU A 245       5.901 -12.564 -11.802  1.00141.34           C
ANISOU 1741  CG  LEU A 245    14395  21835  17471   1710    426   -763       C
ATOM   1742  CD1 LEU A 245       4.673 -13.106 -11.084  1.00143.20           C
ANISOU 1742  CD1 LEU A 245    14145  22889  17373   1196    496  -1098       C
ATOM   1743  CD2 LEU A 245       6.428 -13.570 -12.815  1.00130.73           C
ANISOU 1743  CD2 LEU A 245    13540  20310  15820   1468    185   -470       C
TER
END
```

[2109]

[2110] [표 22]

CATscFv_LH/IL-17(scFv-Cat2200a)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3 정밀화.
REMARK   3  프로그램      : PHENIX (1.18_3855: ???)
REMARK   3  저자          : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                : Hintze,Hung,Ioerger,Liebschner,McCoy,McKee,Moriarty,
REMARK   3                : Oeffner,Poon,Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,
REMARK   3                : Sauter,Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  X선 데이터.
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)         : 2.68
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)        : 43.69
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)     : 1.35
REMARK   3   범위의 완전성          (%)  : 92.06
REMARK   3   반사 수                    : 18344
REMARK   3   반사 수 (비이상)           : 18344
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값      (작업 + 시험 세트)     : 0.2240
REMARK   3   R값             (작업 세트)     : 0.2220
REMARK   3   자유 R값                       : 0.2659
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈    (%) : 4.66
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트        : 854
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3  BIN       분해능 범위    COMPL.    NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWORK CCFREE
REMARK   3    1   43.69 -    4.87    0.99     3204   159  0.2008 0.2360   0.897  0.853
REMARK   3    2    4.87 -    3.86    0.92     2907   130  0.1823 0.2418   0.919  0.859
REMARK   3    3    3.86 -    3.38    0.69     2156   132  0.2486 0.2773   0.857  0.843
REMARK   3    4    3.38 -    3.07    0.99     3112   160  0.2471 0.2620   0.878  0.851
REMARK   3    5    3.07 -    2.85    0.99     3109   136  0.2623 0.3200   0.860  0.748
REMARK   3    6    2.85 -    2.68    0.96     3002   137  0.3112 0.3952   0.833  0.731
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법        : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경          : 1.11
REMARK   3   수축 반경          : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자    : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)      : 0.42
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반) : 29.68
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  기하학적 구조 제한 라이브러리: GEOSTD + 모노머 라이브러리 + CDL V1.2
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3    결합    :  0.002   0.024   4973
REMARK   3    각도    :  0.507   9.083   6771
REMARK   3    키랄성  :  0.042   0.135    757
REMARK   3    평면성  :  0.003   0.038    870
REMARK   3    이면각  : 15.181 179.903   1730
REMARK   3    최소 비결합 거리 : 1.907
REMARK   3
```

[2111]

```
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3    모든 원자 충돌 점수 : 6.12
REMARK   3    라마찬드란 플롯:
REMARK   3      이상치 :  0.00 %
REMARK   3      허용   :  3.35 %
REMARK   3      선호   : 96.65 %
REMARK   3    회전 이성질체 이상치 :  1.72 %
REMARK   3    CBETA 편차          :  0.00 %
REMARK   3    펩티드 평면:
REMARK   3      CIS-프롤린     : 10.00 %
REMARK   3      CIS-전반       : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 프롤린 : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 전반   : 0.00 %
REMARK   3
REMARK   3  RAMA-Z (라마찬드란 플롯 Z 점수):
REMARK   3  해석: 불량 |RAMA-Z| > 3; 의심 2 < |RAMA-Z| < 3; 양호 |RAMA-Z| < 2.
REMARK   3  전체/나선/시트/루프에 대한 점수는 독립적으로 스케일링됨;
REMARK   3  따라서, 값은 단순하게 관련되어 있지 않음.
REMARK   3    전체: -0.76 (0.33), 잔기: 626
REMARK   3    나선:   없음  (없음), 잔기: 0
REMARK   3    시트: -0.60 (0.29), 잔기: 277
REMARK   3    루프: -0.30 (0.34), 잔기: 349
REMARK   3
REMARK   3                 min    max   평균  <Bi,j>   iso aniso
REMARK   3     전체:     22.05  94.45  48.82   4.52  4944     0
REMARK   3     단백질:   22.05  94.45  48.85   4.50  4852     0
REMARK   3     물  :     26.95  66.18  45.29    N/A    72     0
REMARK   3     기타:     39.93  66.79  52.93    N/A    20     0
REMARK   3     사슬  A:  26.27  91.08  50.11    N/A   773     0
REMARK   3     사슬  C:  25.26  94.45  51.21    N/A  1702     0
REMARK   3     사슬  B:  28.95  83.52  51.59    N/A   664     0
REMARK   3     사슬  E:  39.93  66.79  52.93    N/A    20     0
REMARK   3     사슬  D:  22.05  84.96  44.88    N/A  1713     0
REMARK   3     사슬  S:  26.95  66.18  45.29    N/A    72     0
REMARK   3     히스토그램:
REMARK   3            값            원자 수
REMARK   3      22.05 - 29.29         44
REMARK   3      29.29 - 36.53        609
REMARK   3      36.53 - 43.77       1363
REMARK   3      43.77 - 51.01       1148
REMARK   3      51.01 - 58.25        712
REMARK   3      58.25 - 65.49        512
REMARK   3      65.49 - 72.73        340
REMARK   3      72.73 - 79.97        149
REMARK   3      79.97 - 87.21         54
REMARK   3      87.21 - 94.45         13
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  비틀림 NCS 세부사항.
REMARK   3   NCS 군의 수           : 1
REMARK   3   NCS 군 : 1
REMARK   3      선택               : (사슬 'C' 및 (resid 2 내지
REMARK   3                         : 110 또는 resid 131 내지 148 또는
REMARK   3                         : resid 150 내지 194 또는 resid 196
REMARK   3                         : 내지 205 또는 resid 207 내지
REMARK   3                         : 247))
REMARK   3      선택               : (사슬 'D' 및 (resid 2 내지
REMARK   3                         : 110 또는 resid 131 내지 140 또는
REMARK   3                         : (resid 141 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                         : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB ))
REMARK   3                         : 또는 resid 142 내지 148 또는 resid
```

[2112]

```
REMARK   3                      : 150 내지 194 또는 resid 196
REMARK   3                      : 내지 205 또는 resid 207 내지
REMARK   3                      : 247))
REMARK   3     제한된 비틀림        : 1940
REMARK   3     한계 미만 RMSD       : 0.508
REMARK   3     모든 제한 RMSD       : 11.980
REMARK   3    한계 미만 차이의 히스토그램:
REMARK   3       0.000 -    1.500: 1870
REMARK   3       1.500 -    3.000: 25
REMARK   3       3.000 -    4.500: 0
REMARK   3       4.500 -    6.000: 1
REMARK   3       6.000 -    7.500: 0
REMARK   3       7.500 -    9.000: 0
REMARK   3       9.000 -   10.500: 0
REMARK   3      10.500 -   12.000: 0
REMARK   3      12.000 -   13.500: 0
REMARK   3      13.500 -   15.000: 0
REMARK   3    한계 초과 차이의 히스토그램:
REMARK   3      15.000 -   29.900: 0
REMARK   3      29.900 -   44.800: 4
REMARK   3      44.800 -   59.700: 18
REMARK   3      59.700 -   74.600: 10
REMARK   3      74.600 -   89.500: 6
REMARK   3      89.500 -  104.400: 0
REMARK   3     104.400 -  119.300: 0
REMARK   3     119.300 -  134.200: 1
REMARK   3     134.200 -  149.100: 2
REMARK   3     149.100 -  164.000: 3
REMARK   3
CRYST1   51.930   62.050  111.710  90.00  99.69  90.00 P 1 21 1
SCALE1      0.019257  0.000000  0.003288        0.00000
SCALE2      0.000000  0.016116  0.000000        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.009081        0.00000
ATOM      1  N   ALA B  19     -26.362 -12.725 -63.768  1.00 80.92           N
ATOM      2  CA  ALA B  19     -26.159 -14.070 -64.298  1.00 74.69           C
ATOM      3  C   ALA B  19     -27.499 -14.768 -64.514  1.00 77.09           C
ATOM      4  O   ALA B  19     -28.373 -14.733 -63.647  1.00 83.52           O
ATOM      5  CB  ALA B  19     -25.275 -14.881 -63.363  1.00 64.26           C
ATOM      6  N   ARG B  20     -27.657 -15.398 -65.675  1.00 76.22           N
ATOM      7  CA  ARG B  20     -28.908 -16.051 -66.044  1.00 80.10           C
ATOM      8  C   ARG B  20     -28.763 -17.556 -66.195  1.00 77.25           C
ATOM      9  O   ARG B  20     -29.589 -18.309 -65.665  1.00 72.86           O
ATOM     10  CB  ARG B  20     -29.457 -15.448 -67.349  1.00 71.38           C
ATOM     11  N   THR B  21     -27.737 -18.020 -66.906  1.00 74.48           N
ATOM     12  CA  THR B  21     -27.539 -19.444 -67.135  1.00 72.18           C
ATOM     13  C   THR B  21     -26.050 -19.746 -67.133  1.00 73.14           C
ATOM     14  O   THR B  21     -25.273 -19.045 -67.787  1.00 73.48           O
ATOM     15  CB  THR B  21     -28.168 -19.887 -68.462  1.00 65.29           C
ATOM     16  OG1 THR B  21     -29.397 -19.181 -68.668  1.00 72.70           O
ATOM     17  CG2 THR B  21     -28.458 -21.380 -68.441  1.00 69.33           C
ATOM     18  N   VAL B  22     -25.656 -20.784 -66.395  1.00 69.25           N
ATOM     19  CA  VAL B  22     -24.263 -21.191 -66.285  1.00 64.16           C
ATOM     20  C   VAL B  22     -24.158 -22.676 -66.615  1.00 63.83           C
ATOM     21  O   VAL B  22     -25.155 -23.396 -66.675  1.00 63.35           O
ATOM     22  CB  VAL B  22     -23.674 -20.901 -64.888  1.00 67.60           C
ATOM     23  CG1 VAL B  22     -23.749 -19.414 -64.574  1.00 56.38           C
ATOM     24  CG2 VAL B  22     -24.400 -21.712 -63.826  1.00 63.67           C
ATOM     25  N   MET B  23     -22.924 -23.125 -66.832  1.00 69.11           N
ATOM     26  CA  MET B  23     -22.630 -24.520 -67.138  1.00 68.20           C
ATOM     27  C   MET B  23     -22.209 -25.228 -65.856  1.00 65.59           C
ATOM     28  O   MET B  23     -21.266 -24.795 -65.184  1.00 63.04           O
ATOM     29  CB  MET B  23     -21.534 -24.625 -68.198  1.00 67.81           C
ATOM     30  N   VAL B  24     -22.903 -26.314 -65.523  1.00 68.89           N
ATOM     31  CA  VAL B  24     -22.709 -27.024 -64.263  1.00 67.70           C
ATOM     32  C   VAL B  24     -22.331 -28.467 -64.570  1.00 63.71           C
ATOM     33  O   VAL B  24     -23.121 -29.208 -65.169  1.00 59.05           O
ATOM     34  CB  VAL B  24     -23.965 -26.967 -63.379  1.00 67.50           C
```

[2113]

```
ATOM     35  CG1 VAL B  24     -23.707 -27.652 -62.043  1.00 60.98           C
ATOM     36  CG2 VAL B  24     -24.406 -25.525 -63.171  1.00 63.28           C
ATOM     37  N   ASN B  25     -21.131 -28.864 -64.151  1.00 66.96           N
ATOM     38  CA  ASN B  25     -20.695 -30.248 -64.267  1.00 63.18           C
ATOM     39  C   ASN B  25     -21.340 -31.081 -63.165  1.00 67.77           C
ATOM     40  O   ASN B  25     -21.224 -30.755 -61.980  1.00 71.36           O
ATOM     41  CB  ASN B  25     -19.169 -30.330 -64.177  1.00 60.58           C
ATOM     42  CG  ASN B  25     -18.624 -31.719 -64.495  1.00 68.25           C
ATOM     43  OD1 ASN B  25     -19.220 -32.738 -64.146  1.00 75.34           O
ATOM     44  ND2 ASN B  25     -17.475 -31.758 -65.158  1.00 66.48           N
ATOM     45  N   LEU B  26     -22.016 -32.157 -63.557  1.00 59.64           N
ATOM     46  CA  LEU B  26     -22.635 -33.062 -62.595  1.00 57.06           C
ATOM     47  C   LEU B  26     -21.849 -34.365 -62.487  1.00 62.24           C
ATOM     48  O   LEU B  26     -21.252 -34.656 -61.450  1.00 63.00           O
ATOM     49  CB  LEU B  26     -24.087 -33.357 -62.980  1.00 55.44           C
ATOM     50  CG  LEU B  26     -25.166 -32.404 -62.457  1.00 59.03           C
ATOM     51  CD1 LEU B  26     -25.031 -31.015 -63.063  1.00 61.75           C
ATOM     52  CD2 LEU B  26     -26.554 -32.974 -62.714  1.00 52.31           C
ATOM     53  N   ALA B  37     -29.189 -39.900 -47.024  1.00 65.12           N
ATOM     54  CA  ALA B  37     -28.766 -40.844 -45.997  1.00 70.55           C
ATOM     55  C   ALA B  37     -27.963 -40.144 -44.905  1.00 77.92           C
ATOM     56  O   ALA B  37     -26.919 -39.548 -45.175  1.00 75.62           O
ATOM     57  CB  ALA B  37     -27.953 -41.971 -46.616  1.00 70.66           C
ATOM     58  N   ALA B  38     -28.457 -40.218 -43.672  1.00 74.86           N
ATOM     59  CA  ALA B  38     -27.806 -39.619 -42.513  1.00 72.61           C
ATOM     60  C   ALA B  38     -27.747 -40.612 -41.362  1.00 76.64           C
ATOM     61  O   ALA B  38     -28.012 -40.272 -40.206  1.00 73.60           O
ATOM     62  CB  ALA B  38     -28.517 -38.336 -42.087  1.00 62.73           C
ATOM     63  N   ALA B  39     -27.395 -41.862 -41.665  1.00 78.32           N
ATOM     64  CA  ALA B  39     -27.340 -42.910 -40.654  1.00 73.94           C
ATOM     65  C   ALA B  39     -26.044 -42.903 -39.854  1.00 69.98           C
ATOM     66  O   ALA B  39     -25.957 -43.615 -38.848  1.00 67.13           O
ATOM     67  CB  ALA B  39     -27.529 -44.282 -41.306  1.00 72.29           C
ATOM     68  N   ALA B  40     -25.045 -42.123 -40.269  1.00 70.63           N
ATOM     69  CA  ALA B  40     -23.771 -42.043 -39.565  1.00 61.42           C
ATOM     70  C   ALA B  40     -23.820 -41.126 -38.349  1.00 53.05           C
ATOM     71  O   ALA B  40     -22.763 -40.744 -37.832  1.00 56.44           O
ATOM     72  CB  ALA B  40     -22.669 -41.581 -40.521  1.00 58.01           C
ATOM     73  N   SER B  41     -25.012 -40.762 -37.882  1.00 52.49           N
ATOM     74  CA  SER B  41     -25.160 -39.867 -36.746  1.00 50.94           C
ATOM     75  C   SER B  41     -26.379 -40.270 -35.934  1.00 49.88           C
ATOM     76  O   SER B  41     -27.434 -40.582 -36.495  1.00 50.80           O
ATOM     77  CB  SER B  41     -25.292 -38.406 -37.195  1.00 52.11           C
ATOM     78  OG  SER B  41     -25.497 -37.549 -36.084  1.00 51.61           O
ATOM     79  N   ASP B  42     -26.229 -40.262 -34.610  1.00 37.68           N
ATOM     80  CA  ASP B  42     -27.333 -40.564 -33.708  1.00 45.23           C
ATOM     81  C   ASP B  42     -27.525 -39.452 -32.683  1.00 44.23           C
ATOM     82  O   ASP B  42     -28.004 -39.698 -31.574  1.00 44.26           O
ATOM     83  CB  ASP B  42     -27.126 -41.912 -33.015  1.00 41.51           C
ATOM     84  CG  ASP B  42     -25.779 -42.021 -32.326  1.00 42.78           C
ATOM     85  OD1 ASP B  42     -25.040 -41.016 -32.275  1.00 48.15           O
ATOM     86  OD2 ASP B  42     -25.457 -43.123 -31.837  1.00 44.84           O
ATOM     87  N   TYR B  43     -27.145 -38.221 -33.038  1.00 39.06           N
ATOM     88  CA  TYR B  43     -27.448 -37.090 -32.169  1.00 39.04           C
ATOM     89  C   TYR B  43     -28.950 -36.899 -32.022  1.00 44.31           C
ATOM     90  O   TYR B  43     -29.418 -36.447 -30.971  1.00 45.26           O
ATOM     91  CB  TYR B  43     -26.802 -35.810 -32.704  1.00 34.38           C
ATOM     92  CG  TYR B  43     -25.293 -35.785 -32.619  1.00 29.64           C
ATOM     93  CD1 TYR B  43     -24.605 -36.692 -31.823  1.00 40.99           C
ATOM     94  CD2 TYR B  43     -24.557 -34.848 -33.330  1.00 28.95           C
ATOM     95  CE1 TYR B  43     -23.224 -36.670 -31.742  1.00 35.45           C
ATOM     96  CE2 TYR B  43     -23.176 -34.817 -33.257  1.00 33.35           C
ATOM     97  CZ  TYR B  43     -22.515 -35.730 -32.461  1.00 39.81           C
ATOM     98  OH  TYR B  43     -21.140 -35.704 -32.385  1.00 37.87           O
ATOM     99  N   TYR B  44     -29.722 -37.250 -33.055  1.00 42.91           N
ATOM    100  CA  TYR B  44     -31.174 -37.132 -32.980  1.00 42.37           C
ATOM    101  C   TYR B  44     -31.767 -37.982 -31.865  1.00 42.80           C
ATOM    102  O   TYR B  44     -32.922 -37.764 -31.482  1.00 41.96           O
```

[2114]

```
ATOM    103  CB  TYR B  44     -31.804 -37.521 -34.320  1.00 40.05           C
ATOM    104  CG  TYR B  44     -31.707 -38.995 -34.646  1.00 47.00           C
ATOM    105  CD1 TYR B  44     -30.576 -39.518 -35.260  1.00 48.63           C
ATOM    106  CD2 TYR B  44     -32.750 -39.864 -34.346  1.00 44.71           C
ATOM    107  CE1 TYR B  44     -30.485 -40.863 -35.560  1.00 47.53           C
ATOM    108  CE2 TYR B  44     -32.667 -41.210 -34.642  1.00 40.79           C
ATOM    109  CZ  TYR B  44     -31.533 -41.704 -35.249  1.00 44.86           C
ATOM    110  OH  TYR B  44     -31.450 -43.045 -35.546  1.00 50.22           O
ATOM    111  N   ASN B  45     -31.012 -38.947 -31.342  1.00 40.35           N
ATOM    112  CA  ASN B  45     -31.487 -39.810 -30.274  1.00 42.49           C
ATOM    113  C   ASN B  45     -30.711 -39.643 -28.975  1.00 44.91           C
ATOM    114  O   ASN B  45     -31.143 -40.172 -27.946  1.00 47.58           O
ATOM    115  CB  ASN B  45     -31.429 -41.279 -30.717  1.00 40.89           C
ATOM    116  CG  ASN B  45     -32.464 -42.138 -30.021  1.00 51.50           C
ATOM    117  OD1 ASN B  45     -33.386 -42.652 -30.655  1.00 50.06           O
ATOM    118  ND2 ASN B  45     -32.319 -42.299 -28.710  1.00 55.61           N
ATOM    119  N   ARG B  46     -29.587 -38.924 -28.993  1.00 39.37           N
ATOM    120  CA  ARG B  46     -28.782 -38.699 -27.802  1.00 42.26           C
ATOM    121  C   ARG B  46     -28.806 -37.257 -27.316  1.00 43.54           C
ATOM    122  O   ARG B  46     -28.328 -36.987 -26.208  1.00 40.11           O
ATOM    123  CB  ARG B  46     -27.326 -39.114 -28.058  1.00 37.09           C
ATOM    124  CG  ARG B  46     -27.128 -40.599 -28.295  1.00 40.64           C
ATOM    125  CD  ARG B  46     -25.820 -40.853 -29.021  1.00 45.22           C
ATOM    126  NE  ARG B  46     -24.677 -40.297 -28.304  1.00 41.06           N
ATOM    127  CZ  ARG B  46     -23.512 -40.006 -28.872  1.00 44.74           C
ATOM    128  NH1 ARG B  46     -23.337 -40.208 -30.172  1.00 40.86           N
ATOM    129  NH2 ARG B  46     -22.524 -39.503 -28.144  1.00 42.40           N
ATOM    130  N   SER B  47     -29.339 -36.330 -28.105  1.00 33.38           N
ATOM    131  CA  SER B  47     -29.358 -34.928 -27.723  1.00 35.78           C
ATOM    132  C   SER B  47     -30.433 -34.664 -26.678  1.00 38.50           C
ATOM    133  O   SER B  47     -31.454 -35.355 -26.614  1.00 38.47           O
ATOM    134  CB  SER B  47     -29.599 -34.042 -28.947  1.00 36.98           C
ATOM    135  OG  SER B  47     -29.907 -32.710 -28.573  1.00 33.43           O
ATOM    136  N   THR B  48     -30.189 -33.647 -25.846  1.00 34.73           N
ATOM    137  CA  THR B  48     -31.232 -33.163 -24.950  1.00 39.08           C
ATOM    138  C   THR B  48     -32.372 -32.512 -25.719  1.00 37.99           C
ATOM    139  O   THR B  48     -33.453 -32.313 -25.158  1.00 39.17           O
ATOM    140  CB  THR B  48     -30.653 -32.172 -23.938  1.00 40.22           C
ATOM    141  OG1 THR B  48     -30.183 -31.005 -24.624  1.00 47.77           O
ATOM    142  CG2 THR B  48     -29.501 -32.804 -23.174  1.00 29.20           C
ATOM    143  N   SER B  49     -32.148 -32.177 -26.990  1.00 39.04           N
ATOM    144  CA  SER B  49     -33.180 -31.675 -27.892  1.00 39.89           C
ATOM    145  C   SER B  49     -33.312 -32.656 -29.053  1.00 43.28           C
ATOM    146  O   SER B  49     -32.919 -32.355 -30.188  1.00 46.12           O
ATOM    147  CB  SER B  49     -32.840 -30.271 -28.387  1.00 36.86           C
ATOM    148  OG  SER B  49     -31.474 -30.182 -28.755  1.00 34.38           O
ATOM    149  N   PRO B  50     -33.864 -33.841 -28.803  1.00 38.06           N
ATOM    150  CA  PRO B  50     -33.880 -34.880 -29.836  1.00 40.94           C
ATOM    151  C   PRO B  50     -34.903 -34.575 -30.919  1.00 40.07           C
ATOM    152  O   PRO B  50     -35.848 -33.808 -30.725  1.00 40.13           O
ATOM    153  CB  PRO B  50     -34.258 -36.140 -29.054  1.00 43.15           C
ATOM    154  CG  PRO B  50     -35.124 -35.625 -27.954  1.00 39.60           C
ATOM    155  CD  PRO B  50     -34.578 -34.266 -27.585  1.00 34.00           C
ATOM    156  N   TRP B  51     -34.702 -35.202 -32.078  1.00 44.17           N
ATOM    157  CA  TRP B  51     -35.576 -34.988 -33.222  1.00 41.32           C
ATOM    158  C   TRP B  51     -35.752 -36.279 -34.006  1.00 43.44           C
ATOM    159  O   TRP B  51     -35.032 -37.262 -33.811  1.00 44.34           O
ATOM    160  CB  TRP B  51     -35.039 -33.891 -34.146  1.00 42.10           C
ATOM    161  CG  TRP B  51     -33.723 -34.185 -34.797  1.00 41.85           C
ATOM    162  CD1 TRP B  51     -33.526 -34.793 -36.001  1.00 43.02           C
ATOM    163  CD2 TRP B  51     -32.419 -33.858 -34.295  1.00 42.14           C
ATOM    164  NE1 TRP B  51     -32.184 -34.876 -36.276  1.00 44.79           N
ATOM    165  CE2 TRP B  51     -31.482 -34.308 -35.246  1.00 44.56           C
ATOM    166  CE3 TRP B  51     -31.954 -33.233 -33.133  1.00 42.80           C
ATOM    167  CZ2 TRP B  51     -30.106 -34.158 -35.070  1.00 44.47           C
ATOM    168  CZ3 TRP B  51     -30.586 -33.082 -32.961  1.00 41.88           C
ATOM    169  CH2 TRP B  51     -29.680 -33.544 -33.925  1.00 43.79           C
[2115]
ATOM    170  N   ASN B  52     -36.732 -36.256 -34.905  1.00 48.83           N
```

```
ATOM    171  CA  ASN B  52     -36.989 -37.332 -35.848  1.00 47.81           C
ATOM    172  C   ASN B  52     -36.669 -36.856 -37.259  1.00 46.28           C
ATOM    173  O   ASN B  52     -36.728 -35.659 -37.554  1.00 52.21           O
ATOM    174  CB  ASN B  52     -38.448 -37.796 -35.775  1.00 48.00           C
ATOM    175  CG  ASN B  52     -38.844 -38.259 -34.388  1.00 48.87           C
ATOM    176  OD1 ASN B  52     -38.031 -38.816 -33.652  1.00 49.80           O
ATOM    177  ND2 ASN B  52     -40.101 -38.032 -34.025  1.00 47.11           N
ATOM    178  N   LEU B  53     -36.329 -37.802 -38.128  1.00 47.51           N
ATOM    179  CA  LEU B  53     -36.020 -37.507 -39.519  1.00 50.14           C
ATOM    180  C   LEU B  53     -37.205 -37.868 -40.405  1.00 58.90           C
ATOM    181  O   LEU B  53     -37.812 -38.931 -40.245  1.00 68.16           O
ATOM    182  CB  LEU B  53     -34.774 -38.266 -39.984  1.00 47.12           C
ATOM    183  CG  LEU B  53     -33.397 -37.783 -39.517  1.00 47.78           C
ATOM    184  CD1 LEU B  53     -33.248 -36.282 -39.725  1.00 50.66           C
ATOM    185  CD2 LEU B  53     -33.120 -38.167 -38.066  1.00 49.92           C
ATOM    186  N   HIS B  54     -37.530 -36.977 -41.339  1.00 59.17           N
ATOM    187  CA  HIS B  54     -38.617 -37.183 -42.287  1.00 63.65           C
ATOM    188  C   HIS B  54     -38.042 -37.205 -43.695  1.00 63.79           C
ATOM    189  O   HIS B  54     -37.480 -36.205 -44.154  1.00 61.03           O
ATOM    190  CB  HIS B  54     -39.678 -36.088 -42.161  1.00 66.14           C
ATOM    191  CG  HIS B  54     -40.388 -36.083 -40.843  1.00 68.70           C
ATOM    192  ND1 HIS B  54     -40.379 -37.164 -39.988  1.00 63.68           N
ATOM    193  CD2 HIS B  54     -41.126 -35.126 -40.233  1.00 69.36           C
ATOM    194  CE1 HIS B  54     -41.083 -36.874 -38.908  1.00 65.10           C
ATOM    195  NE2 HIS B  54     -41.547 -35.643 -39.031  1.00 66.58           N
ATOM    196  N   ARG B  55     -38.180 -38.342 -44.373  1.00 74.87           N
ATOM    197  CA  ARG B  55     -37.700 -38.457 -45.742  1.00 65.55           C
ATOM    198  C   ARG B  55     -38.520 -37.567 -46.666  1.00 68.07           C
ATOM    199  O   ARG B  55     -39.744 -37.471 -46.540  1.00 66.85           O
ATOM    200  CB  ARG B  55     -37.768 -39.911 -46.210  1.00 63.69           C
ATOM    201  N   ASN B  56     -37.836 -36.911 -47.597  1.00 68.34           N
ATOM    202  CA  ASN B  56     -38.487 -35.991 -48.519  1.00 60.62           C
ATOM    203  C   ASN B  56     -37.855 -36.069 -49.904  1.00 63.74           C
ATOM    204  O   ASN B  56     -36.814 -35.464 -50.155  1.00 65.67           O
ATOM    205  CB  ASN B  56     -38.413 -34.560 -47.983  1.00 69.66           C
ATOM    206  CG  ASN B  56     -39.015 -33.547 -48.935  1.00 68.21           C
ATOM    207  OD1 ASN B  56     -38.337 -33.037 -49.827  1.00 66.20           O
ATOM    208  ND2 ASN B  56     -40.295 -33.245 -48.747  1.00 70.64           N
ATOM    209  N   ARG B  61     -35.798 -33.504 -58.633  1.00 70.87           N
ATOM    210  CA  ARG B  61     -34.983 -32.598 -57.832  1.00 66.80           C
ATOM    211  C   ARG B  61     -33.751 -33.299 -57.272  1.00 63.58           C
ATOM    212  O   ARG B  61     -33.845 -34.409 -56.747  1.00 65.18           O
ATOM    213  CB  ARG B  61     -35.805 -32.007 -56.686  1.00 66.87           C
ATOM    214  CG  ARG B  61     -35.040 -31.014 -55.825  1.00 68.55           C
ATOM    215  CD  ARG B  61     -35.721 -30.810 -54.484  1.00 68.07           C
ATOM    216  NE  ARG B  61     -35.677 -32.018 -53.665  1.00 57.44           N
ATOM    217  CZ  ARG B  61     -36.346 -32.174 -52.528  1.00 53.81           C
ATOM    218  NH1 ARG B  61     -37.120 -31.197 -52.073  1.00 52.43           N
ATOM    219  NH2 ARG B  61     -36.246 -33.307 -51.849  1.00 64.04           N
ATOM    220  N   TYR B  62     -32.594 -32.648 -57.385  1.00 63.30           N
ATOM    221  CA  TYR B  62     -31.369 -33.175 -56.807  1.00 64.99           C
ATOM    222  C   TYR B  62     -30.918 -32.292 -55.654  1.00 65.04           C
ATOM    223  O   TYR B  62     -30.797 -31.072 -55.828  1.00 57.02           O
ATOM    224  CB  TYR B  62     -30.260 -33.269 -57.859  1.00 58.34           C
ATOM    225  CG  TYR B  62     -29.039 -34.014 -57.368  1.00 67.31           C
ATOM    226  CD1 TYR B  62     -29.068 -35.392 -57.194  1.00 63.57           C
ATOM    227  CD2 TYR B  62     -27.861 -33.341 -57.072  1.00 67.68           C
ATOM    228  CE1 TYR B  62     -27.958 -36.080 -56.741  1.00 60.93           C
ATOM    229  CE2 TYR B  62     -26.744 -34.020 -56.620  1.00 64.65           C
ATOM    230  CZ  TYR B  62     -26.799 -35.389 -56.456  1.00 68.55           C
ATOM    231  OH  TYR B  62     -25.690 -36.071 -56.005  1.00 74.14           O
ATOM    232  N   PRO B  63     -30.657 -32.859 -54.463  1.00 63.69           N
ATOM    233  CA  PRO B  63     -30.739 -34.293 -54.159  1.00 61.37           C
ATOM    234  C   PRO B  63     -32.172 -34.820 -54.096  1.00 63.17           C
ATOM    235  O   PRO B  63     -33.104 -34.062 -53.822  1.00 58.53           O
ATOM    236  CB  PRO B  63     -30.064 -34.397 -52.791  1.00 60.36           C
ATOM    237  CG  PRO B  63     -30.299 -33.072 -52.167  1.00 60.64           C
ATOM    238  CD  PRO B  63     -30.238 -32.074 -53.288  1.00 62.58           C
```

[2116]

```
ATOM    239  N   SER B  64     -32.333 -36.118 -54.359  1.00 66.99           N
ATOM    240  CA  SER B  64     -33.664 -36.710 -54.428  1.00 66.47           C
ATOM    241  C   SER B  64     -34.343 -36.695 -53.064  1.00 67.80           C
ATOM    242  O   SER B  64     -35.403 -36.083 -52.889  1.00 69.57           O
ATOM    243  CB  SER B  64     -33.569 -38.136 -54.973  1.00 71.22           C
ATOM    244  OG  SER B  64     -32.827 -38.169 -56.180  1.00 71.42           O
ATOM    245  N   VAL B  65     -33.745 -37.364 -52.084  1.00 64.14           N
ATOM    246  CA  VAL B  65     -34.286 -37.436 -50.732  1.00 62.99           C
ATOM    247  C   VAL B  65     -33.472 -36.520 -49.832  1.00 59.83           C
ATOM    248  O   VAL B  65     -32.236 -36.574 -49.830  1.00 55.51           O
ATOM    249  CB  VAL B  65     -34.275 -38.880 -50.202  1.00 59.26           C
ATOM    250  N   ILE B  66     -34.162 -35.672 -49.075  1.00 63.90           N
ATOM    251  CA  ILE B  66     -33.537 -34.823 -48.071  1.00 62.44           C
ATOM    252  C   ILE B  66     -34.140 -35.165 -46.717  1.00 61.12           C
ATOM    253  O   ILE B  66     -35.326 -35.494 -46.609  1.00 62.81           O
ATOM    254  CB  ILE B  66     -33.704 -33.319 -48.384  1.00 65.18           C
ATOM    255  CG1 ILE B  66     -35.183 -32.956 -48.522  1.00 63.88           C
ATOM    256  CG2 ILE B  66     -32.946 -32.950 -49.649  1.00 59.89           C
ATOM    257  CD1 ILE B  66     -35.426 -31.492 -48.806  1.00 64.22           C
ATOM    258  N   TRP B  67     -33.310 -35.098 -45.680  1.00 65.35           N
ATOM    259  CA  TRP B  67     -33.717 -35.449 -44.325  1.00 57.81           C
ATOM    260  C   TRP B  67     -33.966 -34.168 -43.540  1.00 54.30           C
ATOM    261  O   TRP B  67     -33.037 -33.396 -43.286  1.00 59.96           O
ATOM    262  CB  TRP B  67     -32.661 -36.319 -43.649  1.00 60.58           C
ATOM    263  CG  TRP B  67     -32.519 -37.660 -44.292  1.00 66.82           C
ATOM    264  CD1 TRP B  67     -31.522 -38.068 -45.128  1.00 69.43           C
ATOM    265  CD2 TRP B  67     -33.417 -38.769 -44.166  1.00 71.26           C
ATOM    266  NE1 TRP B  67     -31.739 -39.366 -45.524  1.00 78.26           N
ATOM    267  CE2 TRP B  67     -32.896 -39.819 -44.947  1.00 80.27           C
ATOM    268  CE3 TRP B  67     -34.610 -38.978 -43.465  1.00 67.48           C
ATOM    269  CZ2 TRP B  67     -33.524 -41.059 -45.047  1.00 74.95           C
ATOM    270  CZ3 TRP B  67     -35.232 -40.210 -43.566  1.00 71.21           C
ATOM    271  CH2 TRP B  67     -34.688 -41.234 -44.350  1.00 70.68           C
ATOM    272  N   GLU B  68     -35.219 -33.951 -43.155  1.00 54.80           N
ATOM    273  CA  GLU B  68     -35.639 -32.744 -42.458  1.00 54.68           C
ATOM    274  C   GLU B  68     -35.887 -33.069 -40.992  1.00 50.99           C
ATOM    275  O   GLU B  68     -36.549 -34.063 -40.675  1.00 55.90           O
ATOM    276  CB  GLU B  68     -36.892 -32.155 -43.112  1.00 58.10           C
ATOM    277  CG  GLU B  68     -36.680 -31.786 -44.578  1.00 66.36           C
ATOM    278  CD  GLU B  68     -37.784 -30.914 -45.144  1.00 75.15           C
ATOM    279  OE1 GLU B  68     -38.875 -31.444 -45.445  1.00 81.65           O
ATOM    280  OE2 GLU B  68     -37.559 -29.694 -45.286  1.00 69.07           O
ATOM    281  N   ALA B  69     -35.350 -32.235 -40.105  1.00 49.77           N
ATOM    282  CA  ALA B  69     -35.395 -32.490 -38.671  1.00 49.26           C
ATOM    283  C   ALA B  69     -36.674 -31.928 -38.065  1.00 46.80           C
ATOM    284  O   ALA B  69     -37.045 -30.780 -38.329  1.00 44.98           O
ATOM    285  CB  ALA B  69     -34.176 -31.881 -37.977  1.00 45.80           C
ATOM    286  N   LYS B  70     -37.340 -32.743 -37.249  1.00 47.40           N
ATOM    287  CA  LYS B  70     -38.526 -32.335 -36.502  1.00 49.60           C
ATOM    288  C   LYS B  70     -38.315 -32.748 -35.055  1.00 49.92           C
ATOM    289  O   LYS B  70     -38.331 -33.942 -34.741  1.00 52.80           O
ATOM    290  CB  LYS B  70     -39.792 -32.976 -37.068  1.00 48.17           C
ATOM    291  N   CYS B  71     -38.118 -31.772 -34.176  1.00 45.12           N
ATOM    292  CA  CYS B  71     -37.812 -32.099 -32.793  1.00 41.08           C
ATOM    293  C   CYS B  71     -39.011 -32.757 -32.124  1.00 44.35           C
ATOM    294  O   CYS B  71     -40.168 -32.425 -32.403  1.00 47.91           O
ATOM    295  CB  CYS B  71     -37.381 -30.844 -32.043  1.00 40.49           C
ATOM    296  SG  CYS B  71     -36.520 -29.683 -33.117  1.00 50.63           S
ATOM    297  N   ARG B  72     -38.719 -33.724 -31.256  1.00 43.69           N
ATOM    298  CA  ARG B  72     -39.771 -34.514 -30.632  1.00 42.88           C
ATOM    299  C   ARG B  72     -40.615 -33.664 -29.692  1.00 38.52           C
ATOM    300  O   ARG B  72     -41.849 -33.679 -29.765  1.00 42.69           O
ATOM    301  CB  ARG B  72     -39.150 -35.696 -29.887  1.00 46.46           C
ATOM    302  CG  ARG B  72     -38.189 -36.530 -30.724  1.00 44.11           C
ATOM    303  CD  ARG B  72     -37.736 -37.748 -29.940  1.00 46.60           C
ATOM    304  NE  ARG B  72     -36.410 -38.207 -30.340  1.00 51.10           N
ATOM    305  CZ  ARG B  72     -36.184 -39.195 -31.197  1.00 51.29           C
ATOM    306  NH1 ARG B  72     -37.200 -39.840 -31.754  1.00 59.03           N
```

[2117]

```
ATOM    307  NH2 ARG B  72     -34.938 -39.539 -31.496  1.00 48.00           N
ATOM    308  N   HIS B  73     -39.969 -32.897 -28.818  1.00 37.47           N
ATOM    309  CA  HIS B  73     -40.662 -32.203 -27.746  1.00 39.88           C
ATOM    310  C   HIS B  73     -40.479 -30.696 -27.855  1.00 36.49           C
ATOM    311  O   HIS B  73     -39.549 -30.198 -28.497  1.00 37.32           O
ATOM    312  CB  HIS B  73     -40.168 -32.673 -26.372  1.00 33.54           C
ATOM    313  CG  HIS B  73     -39.802 -34.122 -26.326  1.00 33.02           C
ATOM    314  ND1 HIS B  73     -38.509 -34.566 -26.495  1.00 33.42           N
ATOM    315  CD2 HIS B  73     -40.559 -35.228 -26.135  1.00 36.31           C
ATOM    316  CE1 HIS B  73     -38.484 -35.884 -26.407  1.00 40.35           C
ATOM    317  NE2 HIS B  73     -39.715 -36.310 -26.188  1.00 43.93           N
ATOM    318  N   LEU B  74     -41.392 -29.974 -27.204  1.00 34.37           N
ATOM    319  CA  LEU B  74     -41.251 -28.529 -27.081  1.00 35.25           C
ATOM    320  C   LEU B  74     -40.128 -28.159 -26.121  1.00 40.47           C
ATOM    321  O   LEU B  74     -39.439 -27.156 -26.334  1.00 37.86           O
ATOM    322  CB  LEU B  74     -42.574 -27.916 -26.622  1.00 36.71           C
ATOM    323  CG  LEU B  74     -42.592 -26.420 -26.304  1.00 39.05           C
ATOM    324  CD1 LEU B  74     -42.138 -25.604 -27.505  1.00 36.99           C
ATOM    325  CD2 LEU B  74     -43.981 -25.997 -25.857  1.00 38.66           C
ATOM    326  N   GLY B  75     -39.925 -28.954 -25.069  1.00 38.51           N
ATOM    327  CA  GLY B  75     -38.874 -28.715 -24.106  1.00 38.41           C
ATOM    328  C   GLY B  75     -37.649 -29.578 -24.353  1.00 35.87           C
ATOM    329  O   GLY B  75     -37.525 -30.272 -25.365  1.00 37.56           O
ATOM    330  N   CYS B  76     -36.723 -29.524 -23.400  1.00 33.65           N
ATOM    331  CA  CYS B  76     -35.491 -30.293 -23.463  1.00 41.85           C
ATOM    332  C   CYS B  76     -35.445 -31.300 -22.322  1.00 42.43           C
ATOM    333  O   CYS B  76     -36.177 -31.189 -21.335  1.00 49.10           O
ATOM    334  CB  CYS B  76     -34.260 -29.383 -23.399  1.00 42.28           C
ATOM    335  SG  CYS B  76     -34.326 -27.955 -24.498  1.00 42.88           S
ATOM    336  N   ILE B  77     -34.567 -32.287 -22.468  1.00 34.54           N
ATOM    337  CA  ILE B  77     -34.408 -33.342 -21.474  1.00 39.12           C
ATOM    338  C   ILE B  77     -33.328 -32.914 -20.489  1.00 48.04           C
ATOM    339  O   ILE B  77     -32.191 -32.637 -20.885  1.00 52.94           O
ATOM    340  CB  ILE B  77     -34.050 -34.680 -22.137  1.00 41.89           C
ATOM    341  CG1 ILE B  77     -35.102 -35.055 -23.183  1.00 38.21           C
ATOM    342  CG2 ILE B  77     -33.919 -35.774 -21.087  1.00 46.48           C
ATOM    343  CD1 ILE B  77     -34.777 -36.319 -23.950  1.00 44.97           C
ATOM    344  N   ASN B  78     -33.680 -32.858 -19.208  1.00 46.22           N
ATOM    345  CA  ASN B  78     -32.737 -32.459 -18.176  1.00 46.49           C
ATOM    346  C   ASN B  78     -31.928 -33.675 -17.728  1.00 46.45           C
ATOM    347  O   ASN B  78     -31.994 -34.750 -18.331  1.00 51.27           O
ATOM    348  CB  ASN B  78     -33.469 -31.789 -17.013  1.00 44.15           C
ATOM    349  CG  ASN B  78     -34.612 -32.630 -16.475  1.00 47.13           C
ATOM    350  OD1 ASN B  78     -34.677 -33.837 -16.703  1.00 54.25           O
ATOM    351  ND2 ASN B  78     -35.525 -31.989 -15.756  1.00 41.29           N
ATOM    352  N   ALA B  79     -31.154 -33.514 -16.652  1.00 55.47           N
ATOM    353  CA  ALA B  79     -30.330 -34.612 -16.157  1.00 51.35           C
ATOM    354  C   ALA B  79     -31.174 -35.749 -15.598  1.00 46.93           C
ATOM    355  O   ALA B  79     -30.757 -36.911 -15.652  1.00 49.73           O
ATOM    356  CB  ALA B  79     -29.358 -34.102 -15.093  1.00 40.84           C
ATOM    357  N   ASP B  80     -32.358 -35.441 -15.067  1.00 49.12           N
ATOM    358  CA  ASP B  80     -33.213 -36.456 -14.463  1.00 52.94           C
ATOM    359  C   ASP B  80     -33.971 -37.291 -15.487  1.00 55.07           C
ATOM    360  O   ASP B  80     -34.651 -38.247 -15.097  1.00 51.03           O
ATOM    361  CB  ASP B  80     -34.207 -35.801 -13.501  1.00 55.18           C
ATOM    362  CG  ASP B  80     -33.521 -34.974 -12.429  1.00 67.39           C
ATOM    363  OD1 ASP B  80     -33.305 -33.764 -12.653  1.00 67.87           O
ATOM    364  OD2 ASP B  80     -33.189 -35.538 -11.364  1.00 78.45           O
ATOM    365  N   GLY B  81     -33.877 -36.960 -16.773  1.00 55.94           N
ATOM    366  CA  GLY B  81     -34.547 -37.714 -17.811  1.00 53.47           C
ATOM    367  C   GLY B  81     -35.927 -37.219 -18.188  1.00 54.96           C
ATOM    368  O   GLY B  81     -36.584 -37.851 -19.026  1.00 57.99           O
ATOM    369  N   ASN B  82     -36.387 -36.117 -17.607  1.00 51.87           N
ATOM    370  CA  ASN B  82     -37.702 -35.569 -17.900  1.00 52.01           C
ATOM    371  C   ASN B  82     -37.595 -34.425 -18.899  1.00 49.23           C
ATOM    372  O   ASN B  82     -36.565 -33.753 -18.997  1.00 48.18           O
ATOM    373  CB  ASN B  82     -38.386 -35.077 -16.624  1.00 54.09           C
ATOM    374  CG  ASN B  82     -38.541 -36.170 -15.588  1.00 62.37           C
```

[2118]

```
ATOM    375  OD1 ASN B  82     -39.525 -36.911 -15.594  1.00 62.95           O
ATOM    376  ND2 ASN B  82     -37.567 -36.278 -14.690  1.00 57.33           N
ATOM    377  N   VAL B  83     -38.676 -34.211 -19.645  1.00 43.68           N
ATOM    378  CA  VAL B  83     -38.752 -33.091 -20.577  1.00 41.45           C
ATOM    379  C   VAL B  83     -38.946 -31.815 -19.763  1.00 38.16           C
ATOM    380  O   VAL B  83     -40.016 -31.589 -19.194  1.00 43.05           O
ATOM    381  CB  VAL B  83     -39.881 -33.280 -21.597  1.00 42.78           C
ATOM    382  CG1 VAL B  83     -39.988 -32.063 -22.504  1.00 41.21           C
ATOM    383  CG2 VAL B  83     -39.649 -34.542 -22.418  1.00 39.03           C
ATOM    384  N   ASP B  84     -37.908 -30.986 -19.698  1.00 37.60           N
ATOM    385  CA  ASP B  84     -37.956 -29.734 -18.955  1.00 44.71           C
ATOM    386  C   ASP B  84     -38.453 -28.620 -19.868  1.00 43.20           C
ATOM    387  O   ASP B  84     -37.951 -28.452 -20.983  1.00 41.08           O
ATOM    388  CB  ASP B  84     -36.574 -29.391 -18.393  1.00 43.97           C
ATOM    389  CG  ASP B  84     -36.611 -28.260 -17.381  1.00 39.92           C
ATOM    390  OD1 ASP B  84     -37.536 -27.423 -17.434  1.00 40.94           O
ATOM    391  OD2 ASP B  84     -35.704 -28.205 -16.525  1.00 52.79           O
ATOM    392  N   TYR B  85     -39.432 -27.855 -19.386  1.00 41.82           N
ATOM    393  CA  TYR B  85     -40.036 -26.785 -20.166  1.00 40.63           C
ATOM    394  C   TYR B  85     -39.527 -25.405 -19.772  1.00 38.22           C
ATOM    395  O   TYR B  85     -40.052 -24.399 -20.262  1.00 32.10           O
ATOM    396  CB  TYR B  85     -41.559 -26.853 -20.056  1.00 41.60           C
ATOM    397  CG  TYR B  85     -42.120 -28.083 -20.731  1.00 44.71           C
ATOM    398  CD1 TYR B  85     -42.322 -28.111 -22.105  1.00 44.32           C
ATOM    399  CD2 TYR B  85     -42.421 -29.224 -20.001  1.00 41.29           C
ATOM    400  CE1 TYR B  85     -42.822 -29.236 -22.730  1.00 41.96           C
ATOM    401  CE2 TYR B  85     -42.922 -30.353 -20.617  1.00 45.02           C
ATOM    402  CZ  TYR B  85     -43.118 -30.354 -21.982  1.00 40.72           C
ATOM    403  OH  TYR B  85     -43.618 -31.477 -22.598  1.00 39.21           O
ATOM    404  N   HIS B  86     -38.519 -25.333 -18.901  1.00 43.04           N
ATOM    405  CA  HIS B  86     -37.765 -24.096 -18.735  1.00 44.98           C
ATOM    406  C   HIS B  86     -36.819 -23.846 -19.898  1.00 43.03           C
ATOM    407  O   HIS B  86     -36.109 -22.832 -19.906  1.00 39.93           O
ATOM    408  CB  HIS B  86     -36.979 -24.125 -17.424  1.00 37.25           C
ATOM    409  CG  HIS B  86     -37.826 -24.382 -16.219  1.00 40.54           C
ATOM    410  ND1 HIS B  86     -38.174 -25.652 -15.812  1.00 45.46           N
ATOM    411  CD2 HIS B  86     -38.398 -23.533 -15.333  1.00 39.90           C
ATOM    412  CE1 HIS B  86     -38.920 -25.574 -14.726  1.00 43.19           C
ATOM    413  NE2 HIS B  86     -39.073 -24.300 -14.415  1.00 40.89           N
ATOM    414  N   MET B  87     -36.791 -24.761 -20.864  1.00 39.85           N
ATOM    415  CA  MET B  87     -35.988 -24.646 -22.067  1.00 40.47           C
ATOM    416  C   MET B  87     -36.832 -25.126 -23.238  1.00 37.34           C
ATOM    417  O   MET B  87     -37.867 -25.771 -23.055  1.00 37.88           O
ATOM    418  CB  MET B  87     -34.696 -25.466 -21.960  1.00 40.47           C
ATOM    419  CG  MET B  87     -33.820 -25.102 -20.772  1.00 52.93           C
ATOM    420  SD  MET B  87     -32.616 -26.382 -20.374  1.00 59.88           S
ATOM    421  CE  MET B  87     -33.701 -27.727 -19.904  1.00 51.39           C
ATOM    422  N   ASN B  88     -36.388 -24.803 -24.450  1.00 36.88           N
ATOM    423  CA  ASN B  88     -37.111 -25.180 -25.657  1.00 37.95           C
ATOM    424  C   ASN B  88     -36.176 -25.852 -26.651  1.00 37.62           C
ATOM    425  O   ASN B  88     -35.000 -25.492 -26.755  1.00 36.31           O
ATOM    426  CB  ASN B  88     -37.776 -23.964 -26.326  1.00 33.05           C
ATOM    427  CG  ASN B  88     -39.073 -23.557 -25.650  1.00 32.11           C
ATOM    428  OD1 ASN B  88     -39.267 -23.785 -24.459  1.00 46.35           O
ATOM    429  ND2 ASN B  88     -39.967 -22.947 -26.414  1.00 33.55           N
ATOM    430  N   SER B  89     -36.705 -26.840 -27.370  1.00 40.09           N
ATOM    431  CA  SER B  89     -36.016 -27.428 -28.515  1.00 34.28           C
ATOM    432  C   SER B  89     -36.369 -26.593 -29.737  1.00 29.84           C
ATOM    433  O   SER B  89     -37.530 -26.561 -30.157  1.00 36.19           O
ATOM    434  CB  SER B  89     -36.420 -28.886 -28.719  1.00 29.05           C
ATOM    435  OG  SER B  89     -35.938 -29.697 -27.669  1.00 43.03           O
ATOM    436  N   VAL B  90     -35.378 -25.909 -30.298  1.00 33.89           N
ATOM    437  CA  VAL B  90     -35.596 -25.061 -31.465  1.00 38.97           C
ATOM    438  C   VAL B  90     -34.727 -25.600 -32.595  1.00 41.27           C
ATOM    439  O   VAL B  90     -33.580 -25.990 -32.347  1.00 41.99           O
ATOM    440  CB  VAL B  90     -35.293 -23.592 -31.149  1.00 32.35           C
ATOM    441  CG1 VAL B  90     -36.335 -22.709 -31.787  1.00 43.31           C
ATOM    442  CG2 VAL B  90     -35.303 -23.385 -29.659  1.00 38.14           C
```

[2119]

```
ATOM    443  N   PRO B  91     -35.229 -25.662 -33.833  1.00 43.67           N
ATOM    444  CA  PRO B  91     -34.473 -26.323 -34.905  1.00 41.28           C
ATOM    445  C   PRO B  91     -33.472 -25.379 -35.538  1.00 42.41           C
ATOM    446  O   PRO B  91     -33.749 -24.197 -35.735  1.00 46.70           O
ATOM    447  CB  PRO B  91     -35.563 -26.716 -35.912  1.00 38.91           C
ATOM    448  CG  PRO B  91     -36.595 -25.623 -35.762  1.00 39.77           C
ATOM    449  CD  PRO B  91     -36.509 -25.110 -34.327  1.00 46.26           C
ATOM    450  N   ILE B  92     -32.310 -25.923 -35.880  1.00 40.27           N
ATOM    451  CA  ILE B  92     -31.270 -25.188 -36.590  1.00 41.37           C
ATOM    452  C   ILE B  92     -31.563 -25.303 -38.082  1.00 45.37           C
ATOM    453  O   ILE B  92     -31.387 -26.367 -38.683  1.00 45.55           O
ATOM    454  CB  ILE B  92     -29.873 -25.717 -36.246  1.00 44.05           C
ATOM    455  CG1 ILE B  92     -29.600 -25.511 -34.752  1.00 48.04           C
ATOM    456  CG2 ILE B  92     -28.811 -25.021 -37.083  1.00 44.90           C
ATOM    457  CD1 ILE B  92     -28.262 -26.039 -34.281  1.00 42.83           C
ATOM    458  N   GLN B  93     -32.018 -24.209 -38.677  1.00 52.59           N
ATOM    459  CA  GLN B  93     -32.362 -24.185 -40.088  1.00 47.54           C
ATOM    460  C   GLN B  93     -31.168 -23.737 -40.921  1.00 45.47           C
ATOM    461  O   GLN B  93     -30.259 -23.057 -40.439  1.00 51.66           O
ATOM    462  CB  GLN B  93     -33.556 -23.265 -40.335  1.00 44.50           C
ATOM    463  CG  GLN B  93     -34.850 -23.773 -39.729  1.00 43.95           C
ATOM    464  CD  GLN B  93     -36.005 -22.821 -39.948  1.00 51.35           C
ATOM    465  OE1 GLN B  93     -35.832 -21.602 -39.936  1.00 50.59           O
ATOM    466  NE2 GLN B  93     -37.194 -23.374 -40.158  1.00 54.90           N
ATOM    467  N   GLN B  94     -31.181 -24.134 -42.189  1.00 45.75           N
ATOM    468  CA  GLN B  94     -30.077 -23.857 -43.092  1.00 46.64           C
ATOM    469  C   GLN B  94     -30.610 -23.792 -44.514  1.00 47.66           C
ATOM    470  O   GLN B  94     -31.481 -24.580 -44.892  1.00 51.17           O
ATOM    471  CB  GLN B  94     -28.989 -24.930 -42.979  1.00 54.74           C
ATOM    472  CG  GLN B  94     -27.752 -24.665 -43.819  1.00 54.84           C
ATOM    473  CD  GLN B  94     -26.780 -25.828 -43.800  1.00 57.35           C
ATOM    474  OE1 GLN B  94     -27.160 -26.966 -43.517  1.00 53.54           O
ATOM    475  NE2 GLN B  94     -25.517 -25.549 -44.099  1.00 55.38           N
ATOM    476  N   GLU B  95     -30.087 -22.848 -45.290  1.00 50.31           N
ATOM    477  CA  GLU B  95     -30.439 -22.714 -46.697  1.00 47.04           C
ATOM    478  C   GLU B  95     -29.443 -23.512 -47.531  1.00 48.83           C
ATOM    479  O   GLU B  95     -28.231 -23.293 -47.436  1.00 49.38           O
ATOM    480  CB  GLU B  95     -30.444 -21.245 -47.116  1.00 44.51           C
ATOM    481  N   ILE B  96     -29.953 -24.439 -48.340  1.00 41.79           N
ATOM    482  CA  ILE B  96     -29.115 -25.322 -49.141  1.00 45.85           C
ATOM    483  C   ILE B  96     -29.453 -25.141 -50.614  1.00 49.13           C
ATOM    484  O   ILE B  96     -30.586 -24.808 -50.980  1.00 48.41           O
ATOM    485  CB  ILE B  96     -29.276 -26.800 -48.726  1.00 47.20           C
ATOM    486  CG1 ILE B  96     -30.720 -27.262 -48.930  1.00 50.09           C
ATOM    487  CG2 ILE B  96     -28.854 -26.997 -47.278  1.00 47.07           C
ATOM    488  CD1 ILE B  96     -30.930 -28.736 -48.670  1.00 47.73           C
ATOM    489  N   LEU B  97     -28.453 -25.366 -51.463  1.00 51.34           N
ATOM    490  CA  LEU B  97     -28.649 -25.308 -52.904  1.00 45.37           C
ATOM    491  C   LEU B  97     -29.272 -26.603 -53.405  1.00 50.81           C
ATOM    492  O   LEU B  97     -28.907 -27.697 -52.964  1.00 50.28           O
ATOM    493  CB  LEU B  97     -27.320 -25.061 -53.621  1.00 39.11           C
ATOM    494  CG  LEU B  97     -26.816 -23.621 -53.734  1.00 39.50           C
ATOM    495  CD1 LEU B  97     -27.911 -22.714 -54.277  1.00 47.08           C
ATOM    496  CD2 LEU B  97     -26.289 -23.104 -52.406  1.00 57.69           C
ATOM    497  N   VAL B  98     -30.220 -26.474 -54.334  1.00 53.53           N
ATOM    498  CA  VAL B  98     -30.898 -27.620 -54.926  1.00 57.93           C
ATOM    499  C   VAL B  98     -31.051 -27.394 -56.424  1.00 62.85           C
ATOM    500  O   VAL B  98     -31.099 -26.256 -56.901  1.00 59.56           O
ATOM    501  CB  VAL B  98     -32.280 -27.875 -54.284  1.00 52.36           C
ATOM    502  CG1 VAL B  98     -32.132 -28.286 -52.826  1.00 58.31           C
ATOM    503  CG2 VAL B  98     -33.155 -26.641 -54.411  1.00 51.80           C
ATOM    504  N   LEU B  99     -31.128 -28.496 -57.167  1.00 65.37           N
ATOM    505  CA  LEU B  99     -31.430 -28.473 -58.594  1.00 59.35           C
ATOM    506  C   LEU B  99     -32.880 -28.911 -58.771  1.00 63.20           C
ATOM    507  O   LEU B  99     -33.209 -30.083 -58.563  1.00 63.84           O
ATOM    508  CB  LEU B  99     -30.480 -29.382 -59.371  1.00 58.15           C
ATOM    509  CG  LEU B  99     -29.013 -28.953 -59.430  1.00 61.55           C
ATOM    510  CD1 LEU B  99     -28.160 -30.050 -60.047  1.00 64.33           C
```

[2120]

```
ATOM    511  CD2 LEU B  99     -28.865 -27.656 -60.210  1.00 59.89           C
ATOM    512  N   ARG B 100     -33.744 -27.971 -59.151  1.00 68.39           N
ATOM    513  CA  ARG B 100     -35.184 -28.214 -59.242  1.00 69.29           C
ATOM    514  C   ARG B 100     -35.571 -28.341 -60.713  1.00 71.11           C
ATOM    515  O   ARG B 100     -35.889 -27.353 -61.377  1.00 70.09           O
ATOM    516  CB  ARG B 100     -35.963 -27.101 -58.550  1.00 63.28           C
ATOM    517  N   ALA B 101     -35.545 -29.575 -61.214  1.00 70.99           N
ATOM    518  CA  ALA B 101     -35.985 -29.902 -62.572  1.00 70.21           C
ATOM    519  C   ALA B 101     -35.296 -29.048 -63.633  1.00 69.80           C
ATOM    520  O   ALA B 101     -35.810 -28.882 -64.740  1.00 67.38           O
ATOM    521  CB  ALA B 101     -37.500 -29.761 -62.684  1.00 54.62           C
ATOM    522  N   PHE B 110     -32.411 -28.334 -64.471  1.00 78.31           N
ATOM    523  CA  PHE B 110     -32.306 -27.193 -65.371  1.00 73.10           C
ATOM    524  C   PHE B 110     -32.422 -25.873 -64.609  1.00 74.58           C
ATOM    525  O   PHE B 110     -32.076 -24.815 -65.133  1.00 75.99           O
ATOM    526  CB  PHE B 110     -33.379 -27.270 -66.460  1.00 73.06           C
ATOM    527  N   ARG B 111     -32.907 -25.940 -63.370  1.00 72.75           N
ATOM    528  CA  ARG B 111     -33.062 -24.763 -62.528  1.00 72.01           C
ATOM    529  C   ARG B 111     -32.339 -24.976 -61.206  1.00 66.75           C
ATOM    530  O   ARG B 111     -32.212 -26.104 -60.723  1.00 67.37           O
ATOM    531  CB  ARG B 111     -34.543 -24.446 -62.269  1.00 69.28           C
ATOM    532  N   LEU B 112     -31.865 -23.877 -60.624  1.00 63.40           N
ATOM    533  CA  LEU B 112     -31.182 -23.891 -59.336  1.00 63.81           C
ATOM    534  C   LEU B 112     -31.952 -23.016 -58.358  1.00 60.57           C
ATOM    535  O   LEU B 112     -32.318 -21.883 -58.690  1.00 65.77           O
ATOM    536  CB  LEU B 112     -29.738 -23.398 -59.466  1.00 65.77           C
ATOM    537  CG  LEU B 112     -28.879 -23.431 -58.199  1.00 64.56           C
ATOM    538  CD1 LEU B 112     -28.399 -24.844 -57.897  1.00 64.40           C
ATOM    539  CD2 LEU B 112     -27.703 -22.474 -58.317  1.00 62.40           C
ATOM    540  N   GLU B 113     -32.195 -23.538 -57.158  1.00 56.18           N
ATOM    541  CA  GLU B 113     -32.966 -22.831 -56.147  1.00 57.72           C
ATOM    542  C   GLU B 113     -32.351 -23.078 -54.776  1.00 53.06           C
ATOM    543  O   GLU B 113     -31.409 -23.860 -54.621  1.00 48.14           O
ATOM    544  CB  GLU B 113     -34.438 -23.261 -56.164  1.00 51.53           C
ATOM    545  N   LYS B 114     -32.901 -22.395 -53.773  1.00 55.88           N
ATOM    546  CA  LYS B 114     -32.462 -22.524 -52.390  1.00 57.86           C
ATOM    547  C   LYS B 114     -33.657 -22.868 -51.513  1.00 60.05           C
ATOM    548  O   LYS B 114     -34.733 -22.281 -51.658  1.00 61.16           O
ATOM    549  CB  LYS B 114     -31.796 -21.236 -51.891  1.00 52.66           C
ATOM    550  N   ILE B 115     -33.461 -23.820 -50.603  1.00 55.64           N
ATOM    551  CA  ILE B 115     -34.518 -24.314 -49.730  1.00 57.80           C
ATOM    552  C   ILE B 115     -34.082 -24.145 -48.281  1.00 60.14           C
ATOM    553  O   ILE B 115     -32.921 -24.395 -47.938  1.00 57.60           O
ATOM    554  CB  ILE B 115     -34.855 -25.792 -50.025  1.00 55.11           C
ATOM    555  CG1 ILE B 115     -35.223 -25.977 -51.496  1.00 61.22           C
ATOM    556  CG2 ILE B 115     -35.994 -26.274 -49.138  1.00 61.02           C
ATOM    557  CD1 ILE B 115     -35.652 -27.388 -51.840  1.00 64.17           C
ATOM    558  N   LEU B 116     -35.016 -23.720 -47.434  1.00 58.47           N
ATOM    559  CA  LEU B 116     -34.792 -23.655 -45.995  1.00 53.20           C
ATOM    560  C   LEU B 116     -35.125 -25.015 -45.390  1.00 57.88           C
ATOM    561  O   LEU B 116     -36.254 -25.499 -45.528  1.00 62.09           O
ATOM    562  CB  LEU B 116     -35.644 -22.554 -45.365  1.00 39.91           C
ATOM    563  CG  LEU B 116     -35.348 -22.219 -43.902  1.00 50.73           C
ATOM    564  CD1 LEU B 116     -33.905 -21.768 -43.741  1.00 46.43           C
ATOM    565  CD2 LEU B 116     -36.306 -21.156 -43.389  1.00 49.17           C
ATOM    566  N   VAL B 117     -34.144 -25.633 -44.733  1.00 52.81           N
ATOM    567  CA  VAL B 117     -34.270 -26.993 -44.222  1.00 51.66           C
ATOM    568  C   VAL B 117     -33.806 -27.029 -42.772  1.00 52.53           C
ATOM    569  O   VAL B 117     -32.800 -26.405 -42.415  1.00 51.41           O
ATOM    570  CB  VAL B 117     -33.459 -27.996 -45.074  1.00 50.28           C
ATOM    571  CG1 VAL B 117     -33.566 -29.404 -44.503  1.00 47.04           C
ATOM    572  CG2 VAL B 117     -33.931 -27.972 -46.519  1.00 57.57           C
ATOM    573  N   SER B 118     -34.540 -27.764 -41.938  1.00 53.96           N
ATOM    574  CA  SER B 118     -34.149 -27.991 -40.550  1.00 48.08           C
ATOM    575  C   SER B 118     -33.129 -29.123 -40.507  1.00 44.48           C
ATOM    576  O   SER B 118     -33.452 -30.273 -40.823  1.00 45.22           O
ATOM    577  CB  SER B 118     -35.371 -28.318 -39.697  1.00 46.84           C
ATOM    578  OG  SER B 118     -36.334 -27.281 -39.762  1.00 48.47           O
```

[2121]

```
ATOM    579  N   VAL B 119     -31.899 -28.802 -40.115  1.00 46.30           N
ATOM    580  CA  VAL B 119     -30.825 -29.790 -40.071  1.00 41.35           C
ATOM    581  C   VAL B 119     -30.805 -30.532 -38.740  1.00 41.54           C
ATOM    582  O   VAL B 119     -30.575 -31.743 -38.701  1.00 44.17           O
ATOM    583  CB  VAL B 119     -29.475 -29.101 -40.354  1.00 46.78           C
ATOM    584  CG1 VAL B 119     -28.338 -30.113 -40.340  1.00 44.20           C
ATOM    585  CG2 VAL B 119     -29.526 -28.365 -41.684  1.00 48.91           C
ATOM    586  N   GLY B 120     -31.039 -29.827 -37.640  1.00 44.29           N
ATOM    587  CA  GLY B 120     -31.037 -30.454 -36.332  1.00 39.60           C
ATOM    588  C   GLY B 120     -31.664 -29.529 -35.314  1.00 43.68           C
ATOM    589  O   GLY B 120     -32.022 -28.387 -35.615  1.00 41.80           O
ATOM    590  N   CYS B 121     -31.789 -30.039 -34.093  1.00 35.89           N
ATOM    591  CA  CYS B 121     -32.409 -29.308 -32.997  1.00 39.12           C
ATOM    592  C   CYS B 121     -31.372 -29.019 -31.920  1.00 41.36           C
ATOM    593  O   CYS B 121     -30.582 -29.898 -31.558  1.00 42.66           O
ATOM    594  CB  CYS B 121     -33.579 -30.097 -32.403  1.00 38.74           C
ATOM    595  SG  CYS B 121     -34.803 -30.646 -33.612  1.00 54.76           S
ATOM    596  N   THR B 122     -31.373 -27.787 -31.421  1.00 39.49           N
ATOM    597  CA  THR B 122     -30.584 -27.402 -30.263  1.00 37.56           C
ATOM    598  C   THR B 122     -31.521 -26.900 -29.173  1.00 34.77           C
ATOM    599  O   THR B 122     -32.684 -26.574 -29.427  1.00 38.05           O
ATOM    600  CB  THR B 122     -29.553 -26.320 -30.610  1.00 38.40           C
ATOM    601  OG1 THR B 122     -28.611 -26.196 -29.537  1.00 35.79           O
ATOM    602  CG2 THR B 122     -30.239 -24.979 -30.826  1.00 42.05           C
ATOM    603  N   CYS B 123     -31.008 -26.845 -27.950  1.00 36.24           N
ATOM    604  CA  CYS B 123     -31.794 -26.459 -26.786  1.00 38.77           C
ATOM    605  C   CYS B 123     -31.404 -25.051 -26.362  1.00 40.23           C
ATOM    606  O   CYS B 123     -30.229 -24.788 -26.087  1.00 38.83           O
ATOM    607  CB  CYS B 123     -31.582 -27.439 -25.635  1.00 40.37           C
ATOM    608  SG  CYS B 123     -32.546 -27.025 -24.181  1.00 45.20           S
ATOM    609  N   VAL B 124     -32.387 -24.155 -26.300  1.00 38.84           N
ATOM    610  CA  VAL B 124     -32.152 -22.774 -25.904  1.00 44.12           C
ATOM    611  C   VAL B 124     -32.855 -22.501 -24.581  1.00 43.20           C
ATOM    612  O   VAL B 124     -33.766 -23.221 -24.161  1.00 42.68           O
ATOM    613  CB  VAL B 124     -32.612 -21.769 -26.980  1.00 40.30           C
ATOM    614  CG1 VAL B 124     -32.148 -22.215 -28.358  1.00 40.37           C
ATOM    615  CG2 VAL B 124     -34.119 -21.585 -26.927  1.00 40.84           C
ATOM    616  N   THR B 125     -32.421 -21.427 -23.921  1.00 40.72           N
ATOM    617  CA  THR B 125     -32.905 -21.058 -22.602  1.00 47.21           C
ATOM    618  C   THR B 125     -33.191 -19.563 -22.559  1.00 41.35           C
ATOM    619  O   THR B 125     -32.474 -18.776 -23.196  1.00 42.05           O
ATOM    620  CB  THR B 125     -31.884 -21.424 -21.515  1.00 42.46           C
ATOM    621  OG1 THR B 125     -32.252 -20.804 -20.277  1.00 49.74           O
ATOM    622  CG2 THR B 125     -30.488 -20.965 -21.915  1.00 37.91           C
ATOM    623  N   PRO B 126     -34.226 -19.141 -21.827  1.00 41.37           N
ATOM    624  CA  PRO B 126     -34.509 -17.702 -21.714  1.00 41.52           C
ATOM    625  C   PRO B 126     -33.462 -16.928 -20.930  1.00 41.34           C
ATOM    626  O   PRO B 126     -33.471 -15.691 -20.979  1.00 35.83           O
ATOM    627  CB  PRO B 126     -35.866 -17.667 -21.000  1.00 39.78           C
ATOM    628  CG  PRO B 126     -35.904 -18.936 -20.225  1.00 36.50           C
ATOM    629  CD  PRO B 126     -35.203 -19.953 -21.081  1.00 42.27           C
ATOM    630  N   ILE B 127     -32.568 -17.603 -20.212  1.00 40.11           N
ATOM    631  CA  ILE B 127     -31.529 -16.946 -19.429  1.00 42.80           C
ATOM    632  C   ILE B 127     -30.191 -17.192 -20.112  1.00 44.65           C
ATOM    633  O   ILE B 127     -29.752 -18.342 -20.240  1.00 47.79           O
ATOM    634  CB  ILE B 127     -31.505 -17.447 -17.978  1.00 40.60           C
ATOM    635  CG1 ILE B 127     -32.873 -17.260 -17.325  1.00 39.74           C
ATOM    636  CG2 ILE B 127     -30.443 -16.706 -17.187  1.00 37.62           C
ATOM    637  CD1 ILE B 127     -32.922 -17.719 -15.881  1.00 47.56           C
ATOM    638  N   VAL B 128     -29.543 -16.116 -20.545  1.00 37.77           N
ATOM    639  CA  VAL B 128     -28.227 -16.198 -21.169  1.00 47.24           C
ATOM    640  C   VAL B 128     -27.172 -15.967 -20.095  1.00 45.07           C
ATOM    641  O   VAL B 128     -27.185 -14.937 -19.413  1.00 44.16           O
ATOM    642  CB  VAL B 128     -28.087 -15.181 -22.311  1.00 47.96           C
ATOM    643  CG1 VAL B 128     -26.739 -15.341 -22.999  1.00 40.61           C
ATOM    644  CG2 VAL B 128     -29.225 -15.344 -23.308  1.00 44.74           C
ATOM    645  N   HIS B 129     -26.262 -16.922 -19.946  1.00 49.42           N
ATOM    646  CA  HIS B 129     -25.228 -16.872 -18.923  1.00 46.05           C
```

[2122]

```
ATOM    647  C   HIS B 129     -23.878 -16.515 -19.536  1.00 47.36           C
ATOM    648  O   HIS B 129     -23.639 -16.706 -20.730  1.00 44.74           O
ATOM    649  CB  HIS B 129     -25.131 -18.212 -18.189  1.00 49.04           C
ATOM    650  CG  HIS B 129     -26.451 -18.745 -17.724  1.00 46.68           C
ATOM    651  ND1 HIS B 129     -26.983 -18.444 -16.489  1.00 43.80           N
ATOM    652  CD2 HIS B 129     -27.343 -19.566 -18.328  1.00 49.49           C
ATOM    653  CE1 HIS B 129     -28.146 -19.056 -16.352  1.00 41.58           C
ATOM    654  NE2 HIS B 129     -28.388 -19.742 -17.454  1.00 45.04           N
ATOM    655  N   HIS B 130     -22.989 -15.997 -18.692  1.00 53.11           N
ATOM    656  CA  HIS B 130     -21.650 -15.594 -19.098  1.00 53.54           C
ATOM    657  C   HIS B 130     -20.622 -16.582 -18.563  1.00 53.80           C
ATOM    658  O   HIS B 130     -20.722 -17.037 -17.418  1.00 52.22           O
ATOM    659  CB  HIS B 130     -21.325 -14.183 -18.599  1.00 50.40           C
ATOM    660  N   HIS B 131     -19.637 -16.904 -19.399  1.00 54.58           N
ATOM    661  CA  HIS B 131     -18.560 -17.833 -19.053  1.00 53.43           C
ATOM    662  C   HIS B 131     -19.098 -19.178 -18.571  1.00 55.88           C
ATOM    663  O   HIS B 131     -19.475 -20.031 -19.375  1.00 52.00           O
ATOM    664  CB  HIS B 131     -17.644 -17.223 -17.989  1.00 46.65           C
TER
ATOM    665  N   ALA A  19     -19.075 -36.392 -64.898  1.00 67.43           N
ATOM    666  CA  ALA A  19     -18.330 -35.834 -66.020  1.00 65.97           C
ATOM    667  C   ALA A  19     -19.270 -35.188 -67.036  1.00 70.82           C
ATOM    668  O   ALA A  19     -18.826 -34.642 -68.047  1.00 68.49           O
ATOM    669  CB  ALA A  19     -17.488 -36.911 -66.684  1.00 60.58           C
ATOM    670  N   ARG A  20     -20.570 -35.252 -66.760  1.00 73.09           N
ATOM    671  CA  ARG A  20     -21.584 -34.680 -67.637  1.00 70.62           C
ATOM    672  C   ARG A  20     -21.821 -33.224 -67.251  1.00 72.05           C
ATOM    673  O   ARG A  20     -22.206 -32.934 -66.113  1.00 74.28           O
ATOM    674  CB  ARG A  20     -22.884 -35.479 -67.552  1.00 65.75           C
ATOM    675  N   THR A  21     -21.593 -32.314 -68.195  1.00 70.78           N
ATOM    676  CA  THR A  21     -21.783 -30.885 -67.973  1.00 71.29           C
ATOM    677  C   THR A  21     -23.074 -30.443 -68.650  1.00 72.43           C
ATOM    678  O   THR A  21     -23.235 -30.614 -69.864  1.00 67.55           O
ATOM    679  CB  THR A  21     -20.598 -30.077 -68.505  1.00 63.28           C
ATOM    680  OG1 THR A  21     -20.476 -30.276 -69.918  1.00 71.34           O
ATOM    681  CG2 THR A  21     -19.307 -30.508 -67.827  1.00 60.45           C
ATOM    682  N   VAL A  22     -23.988 -29.876 -67.865  1.00 74.43           N
ATOM    683  CA  VAL A  22     -25.265 -29.396 -68.380  1.00 71.48           C
ATOM    684  C   VAL A  22     -25.380 -27.903 -68.102  1.00 70.52           C
ATOM    685  O   VAL A  22     -24.448 -27.284 -67.577  1.00 66.86           O
ATOM    686  CB  VAL A  22     -26.445 -30.166 -67.758  1.00 61.55           C
ATOM    687  CG1 VAL A  22     -26.299 -31.658 -68.008  1.00 66.05           C
ATOM    688  CG2 VAL A  22     -26.539 -29.878 -66.269  1.00 67.55           C
ATOM    689  N   MET A  23     -26.519 -27.316 -68.456  1.00 69.88           N
ATOM    690  CA  MET A  23     -26.807 -25.921 -68.169  1.00 72.48           C
ATOM    691  C   MET A  23     -27.838 -25.828 -67.051  1.00 72.37           C
ATOM    692  O   MET A  23     -28.689 -26.708 -66.894  1.00 68.97           O
ATOM    693  CB  MET A  23     -27.318 -25.190 -69.415  1.00 64.94           C
ATOM    694  CG  MET A  23     -26.310 -25.132 -70.551  1.00 69.82           C
ATOM    695  SD  MET A  23     -24.852 -24.147 -70.151  1.00 77.06           S
ATOM    696  CE  MET A  23     -25.520 -22.488 -70.239  1.00 63.95           C
ATOM    697  N   VAL A  24     -27.749 -24.756 -66.270  1.00 71.20           N
ATOM    698  CA  VAL A  24     -28.651 -24.544 -65.143  1.00 74.32           C
ATOM    699  C   VAL A  24     -28.899 -23.050 -64.994  1.00 72.05           C
ATOM    700  O   VAL A  24     -27.970 -22.241 -65.070  1.00 62.53           O
ATOM    701  CB  VAL A  24     -28.084 -25.148 -63.841  1.00 75.17           C
ATOM    702  N   ASN A  25     -30.162 -22.692 -64.780  1.00 74.95           N
ATOM    703  CA  ASN A  25     -30.539 -21.299 -64.589  1.00 72.45           C
ATOM    704  C   ASN A  25     -30.165 -20.849 -63.183  1.00 75.07           C
ATOM    705  O   ASN A  25     -30.480 -21.526 -62.199  1.00 71.93           O
ATOM    706  CB  ASN A  25     -32.038 -21.117 -64.822  1.00 78.18           C
ATOM    707  CG  ASN A  25     -32.495 -21.686 -66.151  1.00 81.59           C
ATOM    708  OD1 ASN A  25     -31.825 -22.537 -66.738  1.00 75.19           O
ATOM    709  ND2 ASN A  25     -33.640 -21.218 -66.633  1.00 88.65           N
ATOM    710  N   LEU A  26     -29.493 -19.706 -63.090  1.00 78.78           N
ATOM    711  CA  LEU A  26     -29.076 -19.167 -61.801  1.00 73.87           C
ATOM    712  C   LEU A  26     -30.248 -18.498 -61.090  1.00 77.40           C
ATOM    713  O   LEU A  26     -31.280 -18.219 -61.700  1.00 74.60           O
```

[2123]

```
ATOM    714  CB  LEU A  26     -27.923 -18.175 -61.982  1.00 73.18           C
ATOM    715  CG  LEU A  26     -27.356 -17.511 -60.726  1.00 70.68           C
ATOM    716  CD1 LEU A  26     -25.835 -17.507 -60.767  1.00 68.37           C
ATOM    717  CD2 LEU A  26     -27.887 -16.092 -60.575  1.00 72.86           C
ATOM    718  N   SER A  40     -28.524 -13.162 -38.645  1.00 53.40           N
ATOM    719  CA  SER A  40     -29.647 -12.628 -37.884  1.00 48.70           C
ATOM    720  C   SER A  40     -29.998 -13.539 -36.712  1.00 55.18           C
ATOM    721  O   SER A  40     -30.316 -13.063 -35.623  1.00 59.75           O
ATOM    722  CB  SER A  40     -30.868 -12.440 -38.786  1.00 51.95           C
ATOM    723  OG  SER A  40     -31.300 -13.678 -39.322  1.00 65.31           O
ATOM    724  N   SER A  41     -29.939 -14.849 -36.942  1.00 48.18           N
ATOM    725  CA  SER A  41     -30.247 -15.807 -35.889  1.00 46.52           C
ATOM    726  C   SER A  41     -29.231 -15.706 -34.757  1.00 45.55           C
ATOM    727  O   SER A  41     -28.044 -15.456 -34.985  1.00 48.36           O
ATOM    728  CB  SER A  41     -30.267 -17.227 -36.454  1.00 51.24           C
ATOM    729  OG  SER A  41     -30.506 -18.181 -35.432  1.00 52.98           O
ATOM    730  N   ASP A  42     -29.703 -15.905 -33.524  1.00 39.46           N
ATOM    731  CA  ASP A  42     -28.845 -15.771 -32.352  1.00 43.04           C
ATOM    732  C   ASP A  42     -28.915 -17.000 -31.450  1.00 40.13           C
ATOM    733  O   ASP A  42     -28.665 -16.904 -30.245  1.00 40.21           O
ATOM    734  CB  ASP A  42     -29.191 -14.506 -31.564  1.00 38.40           C
ATOM    735  CG  ASP A  42     -30.566 -14.565 -30.929  1.00 35.63           C
ATOM    736  OD1 ASP A  42     -31.419 -15.336 -31.409  1.00 38.23           O
ATOM    737  OD2 ASP A  42     -30.795 -13.832 -29.946  1.00 43.02           O
ATOM    738  N   TYR A  43     -29.243 -18.166 -32.015  1.00 40.94           N
ATOM    739  CA  TYR A  43     -29.201 -19.395 -31.229  1.00 40.09           C
ATOM    740  C   TYR A  43     -27.793 -19.724 -30.758  1.00 41.41           C
ATOM    741  O   TYR A  43     -27.636 -20.425 -29.753  1.00 43.18           O
ATOM    742  CB  TYR A  43     -29.764 -20.571 -32.031  1.00 33.09           C
ATOM    743  CG  TYR A  43     -31.245 -20.468 -32.296  1.00 35.29           C
ATOM    744  CD1 TYR A  43     -32.052 -19.663 -31.507  1.00 39.21           C
ATOM    745  CD2 TYR A  43     -31.837 -21.171 -33.337  1.00 38.37           C
ATOM    746  CE1 TYR A  43     -33.405 -19.560 -31.744  1.00 42.56           C
ATOM    747  CE2 TYR A  43     -33.193 -21.074 -33.583  1.00 39.89           C
ATOM    748  CZ  TYR A  43     -33.972 -20.265 -32.783  1.00 42.82           C
ATOM    749  OH  TYR A  43     -35.323 -20.152 -33.018  1.00 38.13           O
ATOM    750  N   TYR A  44     -26.766 -19.228 -31.456  1.00 38.85           N
ATOM    751  CA  TYR A  44     -25.392 -19.432 -31.014  1.00 38.60           C
ATOM    752  C   TYR A  44     -25.125 -18.790 -29.661  1.00 39.26           C
ATOM    753  O   TYR A  44     -24.127 -19.124 -29.013  1.00 36.71           O
ATOM    754  CB  TYR A  44     -24.417 -18.871 -32.051  1.00 35.86           C
ATOM    755  CG  TYR A  44     -24.384 -17.360 -32.111  1.00 37.36           C
ATOM    756  CD1 TYR A  44     -25.331 -16.654 -32.838  1.00 37.54           C
ATOM    757  CD2 TYR A  44     -23.401 -16.640 -31.443  1.00 37.20           C
ATOM    758  CE1 TYR A  44     -25.305 -15.274 -32.895  1.00 40.45           C
ATOM    759  CE2 TYR A  44     -23.367 -15.260 -31.493  1.00 42.34           C
ATOM    760  CZ  TYR A  44     -24.321 -14.582 -32.222  1.00 45.88           C
ATOM    761  OH  TYR A  44     -24.292 -13.206 -32.278  1.00 49.75           O
ATOM    762  N   ASN A  45     -25.988 -17.872 -29.224  1.00 40.88           N
ATOM    763  CA  ASN A  45     -25.810 -17.172 -27.963  1.00 44.61           C
ATOM    764  C   ASN A  45     -26.842 -17.544 -26.910  1.00 44.40           C
ATOM    765  O   ASN A  45     -26.630 -17.246 -25.731  1.00 43.31           O
ATOM    766  CB  ASN A  45     -25.856 -15.655 -28.195  1.00 41.40           C
ATOM    767  CG  ASN A  45     -25.004 -14.890 -27.208  1.00 51.96           C
ATOM    768  OD1 ASN A  45     -23.803 -14.715 -27.416  1.00 53.38           O
ATOM    769  ND2 ASN A  45     -25.620 -14.425 -26.127  1.00 54.21           N
ATOM    770  N   ARG A  46     -27.941 -18.189 -27.300  1.00 42.05           N
ATOM    771  CA  ARG A  46     -29.017 -18.538 -26.384  1.00 33.75           C
ATOM    772  C   ARG A  46     -29.148 -20.037 -26.157  1.00 36.10           C
ATOM    773  O   ARG A  46     -30.060 -20.461 -25.440  1.00 42.16           O
ATOM    774  CB  ARG A  46     -30.347 -17.976 -26.902  1.00 35.16           C
ATOM    775  CG  ARG A  46     -30.483 -16.474 -26.730  1.00 37.69           C
ATOM    776  CD  ARG A  46     -31.593 -15.884 -27.591  1.00 32.88           C
ATOM    777  NE  ARG A  46     -32.871 -16.574 -27.440  1.00 29.89           N
ATOM    778  CZ  ARG A  46     -33.518 -17.167 -28.438  1.00 37.25           C
ATOM    779  NH1 ARG A  46     -33.008 -17.149 -29.661  1.00 39.88           N
ATOM    780  NH2 ARG A  46     -34.678 -17.771 -28.220  1.00 37.07           N
ATOM    781  N   SER A  47     -28.266 -20.845 -26.733  1.00 35.80           N
```

[2124]

```
ATOM    782  CA  SER A  47     -28.357 -22.292 -26.624  1.00 38.49           C
ATOM    783  C   SER A  47     -27.626 -22.797 -25.384  1.00 38.95           C
ATOM    784  O   SER A  47     -26.664 -22.185 -24.912  1.00 38.74           O
ATOM    785  CB  SER A  47     -27.778 -22.961 -27.873  1.00 35.49           C
ATOM    786  OG  SER A  47     -27.733 -24.370 -27.730  1.00 39.70           O
ATOM    787  N   THR A  48     -28.099 -23.931 -24.857  1.00 37.82           N
ATOM    788  CA  THR A  48     -27.372 -24.604 -23.785  1.00 35.09           C
ATOM    789  C   THR A  48     -26.015 -25.104 -24.258  1.00 36.24           C
ATOM    790  O   THR A  48     -25.138 -25.372 -23.430  1.00 37.95           O
ATOM    791  CB  THR A  48     -28.189 -25.773 -23.229  1.00 28.33           C
ATOM    792  OG1 THR A  48     -27.526 -26.315 -22.082  1.00 46.98           O
ATOM    793  CG2 THR A  48     -28.329 -26.870 -24.267  1.00 39.77           C
ATOM    794  N   SER A  49     -25.828 -25.237 -25.572  1.00 31.05           N
ATOM    795  CA  SER A  49     -24.553 -25.599 -26.182  1.00 34.30           C
ATOM    796  C   SER A  49     -24.208 -24.497 -27.177  1.00 31.06           C
ATOM    797  O   SER A  49     -24.373 -24.670 -28.394  1.00 30.53           O
ATOM    798  CB  SER A  49     -24.627 -26.966 -26.860  1.00 34.65           C
ATOM    799  OG  SER A  49     -25.698 -27.012 -27.784  1.00 29.57           O
ATOM    800  N   PRO A  50     -23.736 -23.350 -26.697  1.00 34.53           N
ATOM    801  CA  PRO A  50     -23.486 -22.216 -27.593  1.00 32.97           C
ATOM    802  C   PRO A  50     -22.331 -22.497 -28.543  1.00 32.40           C
ATOM    803  O   PRO A  50     -21.603 -23.484 -28.424  1.00 30.01           O
ATOM    804  CB  PRO A  50     -23.156 -21.071 -26.632  1.00 37.14           C
ATOM    805  CG  PRO A  50     -22.618 -21.753 -25.414  1.00 32.77           C
ATOM    806  CD  PRO A  50     -23.384 -23.042 -25.299  1.00 36.04           C
ATOM    807  N   TRP A  51     -22.173 -21.597 -29.509  1.00 34.54           N
ATOM    808  CA  TRP A  51     -21.102 -21.717 -30.486  1.00 33.88           C
ATOM    809  C   TRP A  51     -20.807 -20.341 -31.064  1.00 33.26           C
ATOM    810  O   TRP A  51     -21.508 -19.364 -30.794  1.00 31.69           O
ATOM    811  CB  TRP A  51     -21.461 -22.715 -31.592  1.00 35.11           C
ATOM    812  CG  TRP A  51     -22.598 -22.286 -32.475  1.00 37.69           C
ATOM    813  CD1 TRP A  51     -22.511 -21.549 -33.619  1.00 33.91           C
ATOM    814  CD2 TRP A  51     -23.988 -22.584 -32.294  1.00 35.47           C
ATOM    815  NE1 TRP A  51     -23.761 -21.365 -34.160  1.00 36.35           N
ATOM    816  CE2 TRP A  51     -24.685 -21.991 -33.367  1.00 35.76           C
ATOM    817  CE3 TRP A  51     -24.712 -23.291 -31.329  1.00 32.25           C
ATOM    818  CZ2 TRP A  51     -26.070 -22.080 -33.499  1.00 33.30           C
ATOM    819  CZ3 TRP A  51     -26.086 -23.380 -31.462  1.00 33.23           C
ATOM    820  CH2 TRP A  51     -26.751 -22.777 -32.540  1.00 39.70           C
ATOM    821  N   ASN A  52     -19.744 -20.280 -31.859  1.00 36.90           N
ATOM    822  CA  ASN A  52     -19.371 -19.083 -32.592  1.00 35.03           C
ATOM    823  C   ASN A  52     -19.336 -19.395 -34.081  1.00 39.01           C
ATOM    824  O   ASN A  52     -19.174 -20.548 -34.493  1.00 35.91           O
ATOM    825  CB  ASN A  52     -18.010 -18.546 -32.138  1.00 37.24           C
ATOM    826  CG  ASN A  52     -17.949 -18.310 -30.645  1.00 44.08           C
ATOM    827  OD1 ASN A  52     -17.358 -19.096 -29.905  1.00 42.43           O
ATOM    828  ND2 ASN A  52     -18.564 -17.224 -30.192  1.00 46.88           N
ATOM    829  N   LEU A  53     -19.492 -18.352 -34.889  1.00 42.99           N
ATOM    830  CA  LEU A  53     -19.522 -18.491 -36.338  1.00 42.50           C
ATOM    831  C   LEU A  53     -18.141 -18.221 -36.921  1.00 44.23           C
ATOM    832  O   LEU A  53     -17.523 -17.192 -36.624  1.00 37.46           O
ATOM    833  CB  LEU A  53     -20.554 -17.548 -36.956  1.00 44.12           C
ATOM    834  CG  LEU A  53     -22.015 -17.948 -36.746  1.00 45.99           C
ATOM    835  CD1 LEU A  53     -22.940 -17.024 -37.516  1.00 51.92           C
ATOM    836  CD2 LEU A  53     -22.239 -19.393 -37.157  1.00 43.87           C
ATOM    837  N   HIS A  54     -17.660 -19.154 -37.738  1.00 43.41           N
ATOM    838  CA  HIS A  54     -16.446 -18.977 -38.520  1.00 42.98           C
ATOM    839  C   HIS A  54     -16.824 -18.649 -39.957  1.00 40.44           C
ATOM    840  O   HIS A  54     -17.812 -19.171 -40.481  1.00 40.66           O
ATOM    841  CB  HIS A  54     -15.573 -20.233 -38.483  1.00 45.69           C
ATOM    842  CG  HIS A  54     -15.053 -20.570 -37.120  1.00 48.18           C
ATOM    843  ND1 HIS A  54     -15.278 -19.774 -36.018  1.00 46.87           N
ATOM    844  CD2 HIS A  54     -14.319 -21.620 -36.682  1.00 49.00           C
ATOM    845  CE1 HIS A  54     -14.706 -20.319 -34.960  1.00 46.62           C
ATOM    846  NE2 HIS A  54     -14.116 -21.439 -35.336  1.00 47.58           N
ATOM    847  N   ARG A  55     -16.037 -17.784 -40.591  1.00 46.97           N
ATOM    848  CA  ARG A  55     -16.337 -17.302 -41.940  1.00 53.59           C
ATOM    849  C   ARG A  55     -15.427 -18.022 -42.930  1.00 49.82           C
```

[2125]

```
ATOM    850  O   ARG A  55     -14.315 -17.579 -43.217  1.00 59.77           O
ATOM    851  CB  ARG A  55     -16.169 -15.790 -42.029  1.00 54.05           C
ATOM    852  CG  ARG A  55     -16.793 -15.178 -43.273  1.00 57.27           C
ATOM    853  CD  ARG A  55     -16.219 -13.802 -43.565  1.00 58.57           C
ATOM    854  NE  ARG A  55     -14.817 -13.878 -43.965  1.00 65.91           N
ATOM    855  CZ  ARG A  55     -14.071 -12.825 -44.281  1.00 70.72           C
ATOM    856  NH1 ARG A  55     -14.594 -11.606 -44.245  1.00 64.66           N
ATOM    857  NH2 ARG A  55     -12.803 -12.989 -44.635  1.00 66.50           N
ATOM    858  N   ASN A  56     -15.910 -19.143 -43.456  1.00 43.27           N
ATOM    859  CA  ASN A  56     -15.217 -19.842 -44.530  1.00 49.90           C
ATOM    860  C   ASN A  56     -15.458 -19.090 -45.833  1.00 54.18           C
ATOM    861  O   ASN A  56     -16.608 -18.920 -46.253  1.00 50.39           O
ATOM    862  CB  ASN A  56     -15.708 -21.285 -44.632  1.00 52.71           C
ATOM    863  CG  ASN A  56     -14.872 -22.130 -45.583  1.00 57.72           C
ATOM    864  OD1 ASN A  56     -14.198 -21.611 -46.473  1.00 58.67           O
ATOM    865  ND2 ASN A  56     -14.921 -23.445 -45.398  1.00 60.72           N
ATOM    866  N   GLU A  57     -14.382 -18.632 -46.468  1.00 53.98           N
ATOM    867  CA  GLU A  57     -14.469 -17.889 -47.718  1.00 53.23           C
ATOM    868  C   GLU A  57     -13.663 -18.592 -48.798  1.00 56.62           C
ATOM    869  O   GLU A  57     -12.518 -18.996 -48.566  1.00 50.32           O
ATOM    870  CB  GLU A  57     -13.979 -16.450 -47.552  1.00 49.20           C
ATOM    871  CG  GLU A  57     -15.035 -15.501 -47.016  1.00 62.90           C
ATOM    872  CD  GLU A  57     -14.699 -14.047 -47.285  1.00 70.73           C
ATOM    873  OE1 GLU A  57     -13.609 -13.782 -47.835  1.00 74.18           O
ATOM    874  OE2 GLU A  57     -15.526 -13.171 -46.952  1.00 63.85           O
ATOM    875  N   ASP A  58     -14.270 -18.734 -49.974  1.00 55.57           N
ATOM    876  CA  ASP A  58     -13.613 -19.268 -51.158  1.00 57.45           C
ATOM    877  C   ASP A  58     -14.134 -18.518 -52.378  1.00 65.84           C
ATOM    878  O   ASP A  58     -15.287 -18.717 -52.782  1.00 67.79           O
ATOM    879  CB  ASP A  58     -13.863 -20.771 -51.292  1.00 53.90           C
ATOM    880  CG  ASP A  58     -12.946 -21.434 -52.308  1.00 67.30           C
ATOM    881  OD1 ASP A  58     -12.606 -20.795 -53.328  1.00 71.44           O
ATOM    882  OD2 ASP A  58     -12.562 -22.601 -52.084  1.00 66.97           O
ATOM    883  N   PRO A  59     -13.326 -17.646 -52.984  1.00 68.85           N
ATOM    884  CA  PRO A  59     -13.805 -16.905 -54.163  1.00 67.70           C
ATOM    885  C   PRO A  59     -14.111 -17.798 -55.349  1.00 68.08           C
ATOM    886  O   PRO A  59     -14.898 -17.400 -56.218  1.00 65.78           O
ATOM    887  CB  PRO A  59     -12.650 -15.941 -54.465  1.00 65.79           C
ATOM    888  CG  PRO A  59     -11.446 -16.606 -53.884  1.00 72.31           C
ATOM    889  CD  PRO A  59     -11.928 -17.322 -52.653  1.00 72.67           C
ATOM    890  N   GLU A  60     -13.522 -18.990 -55.415  1.00 66.96           N
ATOM    891  CA  GLU A  60     -13.818 -19.956 -56.472  1.00 69.30           C
ATOM    892  C   GLU A  60     -14.935 -20.908 -56.074  1.00 65.36           C
ATOM    893  O   GLU A  60     -14.907 -22.092 -56.422  1.00 64.17           O
ATOM    894  CB  GLU A  60     -12.554 -20.728 -56.838  1.00 71.08           C
ATOM    895  CG  GLU A  60     -11.323 -19.859 -57.054  1.00 74.01           C
ATOM    896  CD  GLU A  60     -11.616 -18.617 -57.872  1.00 77.01           C
ATOM    897  OE1 GLU A  60     -11.723 -17.524 -57.275  1.00 77.25           O
ATOM    898  OE2 GLU A  60     -11.747 -18.732 -59.109  1.00 77.20           O
ATOM    899  N   ARG A  61     -15.931 -20.415 -55.341  1.00 62.06           N
ATOM    900  CA  ARG A  61     -17.007 -21.253 -54.838  1.00 55.36           C
ATOM    901  C   ARG A  61     -18.275 -20.420 -54.725  1.00 52.76           C
ATOM    902  O   ARG A  61     -18.221 -19.211 -54.483  1.00 54.75           O
ATOM    903  CB  ARG A  61     -16.645 -21.864 -53.477  1.00 56.78           C
ATOM    904  CG  ARG A  61     -17.655 -22.865 -52.935  1.00 53.30           C
ATOM    905  CD  ARG A  61     -17.339 -23.230 -51.496  1.00 49.15           C
ATOM    906  NE  ARG A  61     -17.454 -22.077 -50.608  1.00 59.10           N
ATOM    907  CZ  ARG A  61     -17.059 -22.066 -49.338  1.00 52.61           C
ATOM    908  NH1 ARG A  61     -16.514 -23.149 -48.801  1.00 49.28           N
ATOM    909  NH2 ARG A  61     -17.206 -20.971 -48.606  1.00 51.29           N
ATOM    910  N   TYR A  62     -19.418 -21.077 -54.915  1.00 44.26           N
ATOM    911  CA  TYR A  62     -20.722 -20.456 -54.708  1.00 48.03           C
ATOM    912  C   TYR A  62     -21.519 -21.352 -53.771  1.00 52.45           C
ATOM    913  O   TYR A  62     -21.769 -22.528 -54.107  1.00 53.92           O
ATOM    914  CB  TYR A  62     -21.470 -20.243 -56.026  1.00 55.81           C
ATOM    915  CG  TYR A  62     -22.812 -19.570 -55.845  1.00 58.88           C
ATOM    916  CD1 TYR A  62     -22.918 -18.186 -55.828  1.00 62.70           C
ATOM    917  CD2 TYR A  62     -23.972 -20.318 -55.680  1.00 60.94           C
```

[2126]

```
ATOM    918  CE1 TYR A  62     -24.141 -17.565 -55.657  1.00 69.04           C
ATOM    919  CE2 TYR A  62     -25.199 -19.706 -55.506  1.00 65.71           C
ATOM    920  CZ  TYR A  62     -25.278 -18.329 -55.496  1.00 76.16           C
ATOM    921  OH  TYR A  62     -26.497 -17.714 -55.326  1.00 87.59           O
ATOM    922  N   PRO A  63     -21.941 -20.860 -52.595  1.00 55.94           N
ATOM    923  CA  PRO A  63     -21.677 -19.497 -52.122  1.00 50.05           C
ATOM    924  C   PRO A  63     -20.247 -19.320 -51.623  1.00 49.15           C
ATOM    925  O   PRO A  63     -19.675 -20.246 -51.048  1.00 53.32           O
ATOM    926  CB  PRO A  63     -22.677 -19.328 -50.979  1.00 49.81           C
ATOM    927  CG  PRO A  63     -22.852 -20.704 -50.446  1.00 52.58           C
ATOM    928  CD  PRO A  63     -22.757 -21.625 -51.635  1.00 53.60           C
ATOM    929  N   SER A  64     -19.676 -18.137 -51.853  1.00 45.05           N
ATOM    930  CA  SER A  64     -18.293 -17.900 -51.457  1.00 52.20           C
ATOM    931  C   SER A  64     -18.147 -17.784 -49.945  1.00 51.59           C
ATOM    932  O   SER A  64     -17.094 -18.128 -49.400  1.00 39.73           O
ATOM    933  CB  SER A  64     -17.761 -16.641 -52.139  1.00 50.48           C
ATOM    934  OG  SER A  64     -18.500 -15.499 -51.742  1.00 51.82           O
ATOM    935  N   VAL A  65     -19.182 -17.313 -49.255  1.00 48.06           N
ATOM    936  CA  VAL A  65     -19.139 -17.085 -47.816  1.00 46.80           C
ATOM    937  C   VAL A  65     -20.094 -18.063 -47.147  1.00 49.24           C
ATOM    938  O   VAL A  65     -21.304 -18.039 -47.406  1.00 51.75           O
ATOM    939  CB  VAL A  65     -19.500 -15.635 -47.463  1.00 50.57           C
ATOM    940  CG1 VAL A  65     -19.444 -15.427 -45.958  1.00 52.34           C
ATOM    941  CG2 VAL A  65     -18.567 -14.670 -48.179  1.00 47.02           C
ATOM    942  N   ILE A  66     -19.551 -18.921 -46.287  1.00 51.85           N
ATOM    943  CA  ILE A  66     -20.328 -19.892 -45.528  1.00 47.49           C
ATOM    944  C   ILE A  66     -19.971 -19.737 -44.058  1.00 43.88           C
ATOM    945  O   ILE A  66     -18.787 -19.716 -43.703  1.00 44.38           O
ATOM    946  CB  ILE A  66     -20.065 -21.336 -45.999  1.00 43.43           C
ATOM    947  CG1 ILE A  66     -20.501 -21.514 -47.454  1.00 47.75           C
ATOM    948  CG2 ILE A  66     -20.784 -22.331 -45.103  1.00 49.38           C
ATOM    949  CD1 ILE A  66     -20.263 -22.907 -47.992  1.00 50.11           C
ATOM    950  N   TRP A  67     -20.989 -19.626 -43.207  1.00 40.82           N
ATOM    951  CA  TRP A  67     -20.792 -19.460 -41.771  1.00 41.50           C
ATOM    952  C   TRP A  67     -20.836 -20.831 -41.104  1.00 39.16           C
ATOM    953  O   TRP A  67     -21.878 -21.493 -41.096  1.00 46.11           O
ATOM    954  CB  TRP A  67     -21.849 -18.526 -41.187  1.00 39.32           C
ATOM    955  CG  TRP A  67     -21.783 -17.140 -41.751  1.00 46.06           C
ATOM    956  CD1 TRP A  67     -22.579 -16.612 -42.725  1.00 47.78           C
ATOM    957  CD2 TRP A  67     -20.859 -16.108 -41.385  1.00 51.66           C
ATOM    958  NE1 TRP A  67     -22.214 -15.313 -42.983  1.00 41.81           N
ATOM    959  CE2 TRP A  67     -21.160 -14.980 -42.175  1.00 44.17           C
ATOM    960  CE3 TRP A  67     -19.810 -16.028 -40.464  1.00 48.38           C
ATOM    961  CZ2 TRP A  67     -20.449 -13.787 -42.072  1.00 47.05           C
ATOM    962  CZ3 TRP A  67     -19.107 -14.842 -40.362  1.00 47.51           C
ATOM    963  CH2 TRP A  67     -19.429 -13.738 -41.162  1.00 57.81           C
ATOM    964  N   GLU A  68     -19.705 -21.255 -40.550  1.00 35.07           N
ATOM    965  CA  GLU A  68     -19.593 -22.531 -39.860  1.00 36.47           C
ATOM    966  C   GLU A  68     -19.618 -22.330 -38.349  1.00 44.66           C
ATOM    967  O   GLU A  68     -19.295 -21.258 -37.832  1.00 38.86           O
ATOM    968  CB  GLU A  68     -18.313 -23.260 -40.272  1.00 40.59           C
ATOM    969  CG  GLU A  68     -18.381 -23.893 -41.650  1.00 50.73           C
ATOM    970  CD  GLU A  68     -17.093 -24.591 -42.031  1.00 58.54           C
ATOM    971  OE1 GLU A  68     -16.085 -23.893 -42.273  1.00 55.04           O
ATOM    972  OE2 GLU A  68     -17.087 -25.839 -42.079  1.00 68.95           O
ATOM    973  N   ALA A  69     -20.000 -23.389 -37.642  1.00 45.56           N
ATOM    974  CA  ALA A  69     -20.204 -23.349 -36.201  1.00 34.62           C
ATOM    975  C   ALA A  69     -19.098 -24.112 -35.487  1.00 37.25           C
ATOM    976  O   ALA A  69     -18.794 -25.256 -35.843  1.00 39.90           O
ATOM    977  CB  ALA A  69     -21.566 -23.939 -35.832  1.00 33.19           C
ATOM    978  N   LYS A  70     -18.501 -23.478 -34.481  1.00 39.33           N
ATOM    979  CA  LYS A  70     -17.572 -24.137 -33.569  1.00 46.56           C
ATOM    980  C   LYS A  70     -18.051 -23.878 -32.150  1.00 37.46           C
ATOM    981  O   LYS A  70     -18.208 -22.719 -31.751  1.00 35.96           O
ATOM    982  CB  LYS A  70     -16.138 -23.634 -33.760  1.00 47.64           C
ATOM    983  CG  LYS A  70     -15.139 -24.253 -32.792  1.00 42.20           C
ATOM    984  CD  LYS A  70     -13.703 -23.958 -33.199  1.00 47.61           C
ATOM    985  CE  LYS A  70     -13.338 -24.674 -34.493  1.00 57.61           C
```

[2127]

```
ATOM    986  NZ  LYS A  70     -13.428 -26.156 -34.358  1.00 53.42           N
ATOM    987  N   CYS A  71     -18.283 -24.951 -31.397  1.00 36.78           N
ATOM    988  CA  CYS A  71     -18.862 -24.826 -30.066  1.00 37.33           C
ATOM    989  C   CYS A  71     -17.912 -24.089 -29.128  1.00 36.34           C
ATOM    990  O   CYS A  71     -16.689 -24.229 -29.215  1.00 38.84           O
ATOM    991  CB  CYS A  71     -19.201 -26.207 -29.499  1.00 36.47           C
ATOM    992  SG  CYS A  71     -19.885 -27.391 -30.699  1.00 51.35           S
ATOM    993  N   ARG A  72     -18.487 -23.291 -28.226  1.00 32.90           N
ATOM    994  CA  ARG A  72     -17.674 -22.514 -27.294  1.00 36.47           C
ATOM    995  C   ARG A  72     -17.012 -23.410 -26.255  1.00 34.61           C
ATOM    996  O   ARG A  72     -15.805 -23.306 -26.010  1.00 36.29           O
ATOM    997  CB  ARG A  72     -18.530 -21.451 -26.605  1.00 37.10           C
ATOM    998  CG  ARG A  72     -19.084 -20.385 -27.529  1.00 35.74           C
ATOM    999  CD  ARG A  72     -19.913 -19.375 -26.753  1.00 33.37           C
ATOM   1000  NE  ARG A  72     -20.484 -18.355 -27.626  1.00 39.40           N
ATOM   1001  CZ  ARG A  72     -21.384 -17.458 -27.237  1.00 44.59           C
ATOM   1002  NH1 ARG A  72     -21.824 -17.454 -25.986  1.00 38.22           N
ATOM   1003  NH2 ARG A  72     -21.848 -16.565 -28.103  1.00 45.31           N
ATOM   1004  N   HIS A  73     -17.787 -24.292 -25.630  1.00 35.07           N
ATOM   1005  CA  HIS A  73     -17.316 -25.098 -24.516  1.00 28.78           C
ATOM   1006  C   HIS A  73     -17.381 -26.581 -24.856  1.00 30.74           C
ATOM   1007  O   HIS A  73     -18.041 -26.998 -25.811  1.00 35.86           O
ATOM   1008  CB  HIS A  73     -18.142 -24.832 -23.252  1.00 30.39           C
ATOM   1009  CG  HIS A  73     -18.539 -23.401 -23.079  1.00 32.37           C
ATOM   1010  ND1 HIS A  73     -17.643 -22.419 -22.715  1.00 31.05           N
ATOM   1011  CD2 HIS A  73     -19.737 -22.786 -23.214  1.00 32.19           C
ATOM   1012  CE1 HIS A  73     -18.273 -21.260 -22.636  1.00 37.52           C
ATOM   1013  NE2 HIS A  73     -19.544 -21.455 -22.935  1.00 38.15           N
ATOM   1014  N   LEU A  74     -16.679 -27.376 -24.047  1.00 31.59           N
ATOM   1015  CA  LEU A  74     -16.781 -28.826 -24.157  1.00 34.10           C
ATOM   1016  C   LEU A  74     -18.119 -29.319 -23.617  1.00 36.51           C
ATOM   1017  O   LEU A  74     -18.787 -30.150 -24.243  1.00 35.18           O
ATOM   1018  CB  LEU A  74     -15.618 -29.487 -23.416  1.00 35.56           C
ATOM   1019  CG  LEU A  74     -15.623 -31.014 -23.325  1.00 34.60           C
ATOM   1020  CD1 LEU A  74     -15.530 -31.639 -24.705  1.00 28.60           C
ATOM   1021  CD2 LEU A  74     -14.488 -31.499 -22.434  1.00 35.10           C
ATOM   1022  N   GLY A  75     -18.528 -28.814 -22.455  1.00 34.93           N
ATOM   1023  CA  GLY A  75     -19.801 -29.168 -21.866  1.00 39.26           C
ATOM   1024  C   GLY A  75     -20.902 -28.197 -22.249  1.00 37.81           C
ATOM   1025  O   GLY A  75     -20.724 -27.287 -23.061  1.00 39.21           O
ATOM   1026  N   CYS A  76     -22.065 -28.404 -21.642  1.00 40.31           N
ATOM   1027  CA  CYS A  76     -23.231 -27.562 -21.860  1.00 42.93           C
ATOM   1028  C   CYS A  76     -23.474 -26.678 -20.642  1.00 38.41           C
ATOM   1029  O   CYS A  76     -22.909 -26.889 -19.566  1.00 39.28           O
ATOM   1030  CB  CYS A  76     -24.470 -28.416 -22.155  1.00 37.02           C
ATOM   1031  SG  CYS A  76     -24.177 -29.758 -23.324  1.00 46.75           S
ATOM   1032  N   ILE A  77     -24.328 -25.677 -20.828  1.00 32.13           N
ATOM   1033  CA  ILE A  77     -24.705 -24.761 -19.758  1.00 37.88           C
ATOM   1034  C   ILE A  77     -25.917 -25.339 -19.039  1.00 42.46           C
ATOM   1035  O   ILE A  77     -26.967 -25.556 -19.655  1.00 35.14           O
ATOM   1036  CB  ILE A  77     -25.010 -23.359 -20.309  1.00 39.05           C
ATOM   1037  CG1 ILE A  77     -23.846 -22.851 -21.162  1.00 32.24           C
ATOM   1038  CG2 ILE A  77     -25.306 -22.392 -19.170  1.00 40.61           C
ATOM   1039  CD1 ILE A  77     -22.543 -22.740 -20.408  1.00 38.16           C
ATOM   1040  N   ASN A  78     -25.779 -25.590 -17.736  1.00 30.50           N
ATOM   1041  CA  ASN A  78     -26.878 -26.149 -16.963  1.00 34.64           C
ATOM   1042  C   ASN A  78     -27.762 -25.019 -16.436  1.00 38.73           C
ATOM   1043  O   ASN A  78     -27.575 -23.846 -16.770  1.00 39.72           O
ATOM   1044  CB  ASN A  78     -26.353 -27.053 -15.845  1.00 40.51           C
ATOM   1045  CG  ASN A  78     -25.364 -26.356 -14.923  1.00 40.97           C
ATOM   1046  OD1 ASN A  78     -25.335 -25.129 -14.816  1.00 41.82           O
ATOM   1047  ND2 ASN A  78     -24.547 -27.151 -14.243  1.00 28.65           N
ATOM   1048  N   ALA A  79     -28.745 -25.370 -15.601  1.00 48.25           N
ATOM   1049  CA  ALA A  79     -29.672 -24.370 -15.080  1.00 49.33           C
ATOM   1050  C   ALA A  79     -28.961 -23.332 -14.223  1.00 47.47           C
ATOM   1051  O   ALA A  79     -29.342 -22.155 -14.231  1.00 53.54           O
ATOM   1052  CB  ALA A  79     -30.783 -25.049 -14.278  1.00 43.73           C
ATOM   1053  N   ASP A  80     -27.928 -23.741 -13.485  1.00 47.04           N
```

[2128]

```
ATOM   1054  CA  ASP A  80     -27.190 -22.813 -12.637  1.00 48.18           C
ATOM   1055  C   ASP A  80     -26.325 -21.847 -13.433  1.00 43.46           C
ATOM   1056  O   ASP A  80     -25.767 -20.916 -12.846  1.00 56.88           O
ATOM   1057  CB  ASP A  80     -26.315 -23.586 -11.649  1.00 47.33           C
ATOM   1058  CG  ASP A  80     -27.094 -24.628 -10.878  1.00 48.87           C
ATOM   1059  OD1 ASP A  80     -28.262 -24.359 -10.528  1.00 54.28           O
ATOM   1060  OD2 ASP A  80     -26.538 -25.718 -10.629  1.00 53.51           O
ATOM   1061  N   GLY A  81     -26.193 -22.046 -14.740  1.00 40.35           N
ATOM   1062  CA  GLY A  81     -25.388 -21.172 -15.562  1.00 42.13           C
ATOM   1063  C   GLY A  81     -23.921 -21.522 -15.634  1.00 39.47           C
ATOM   1064  O   GLY A  81     -23.124 -20.685 -16.073  1.00 44.91           O
ATOM   1065  N   ASN A  82     -23.538 -22.722 -15.216  1.00 34.64           N
ATOM   1066  CA  ASN A  82     -22.154 -23.164 -15.263  1.00 38.46           C
ATOM   1067  C   ASN A  82     -21.961 -24.156 -16.401  1.00 38.76           C
ATOM   1068  O   ASN A  82     -22.918 -24.692 -16.965  1.00 38.01           O
ATOM   1069  CB  ASN A  82     -21.738 -23.799 -13.931  1.00 37.97           C
ATOM   1070  CG  ASN A  82     -21.998 -22.892 -12.752  1.00 39.68           C
ATOM   1071  OD1 ASN A  82     -22.761 -23.234 -11.849  1.00 46.43           O
ATOM   1072  ND2 ASN A  82     -21.366 -21.724 -12.753  1.00 42.45           N
ATOM   1073  N   VAL A  83     -20.695 -24.397 -16.735  1.00 35.02           N
ATOM   1074  CA  VAL A  83     -20.346 -25.387 -17.749  1.00 38.04           C
ATOM   1075  C   VAL A  83     -20.451 -26.760 -17.091  1.00 37.95           C
ATOM   1076  O   VAL A  83     -19.587 -27.156 -16.307  1.00 38.60           O
ATOM   1077  CB  VAL A  83     -18.954 -25.142 -18.336  1.00 35.51           C
ATOM   1078  CG1 VAL A  83     -18.673 -26.138 -19.447  1.00 41.09           C
ATOM   1079  CG2 VAL A  83     -18.847 -23.718 -18.854  1.00 37.01           C
ATOM   1080  N   ASP A  84     -21.523 -27.484 -17.397  1.00 35.35           N
ATOM   1081  CA  ASP A  84     -21.732 -28.828 -16.880  1.00 34.66           C
ATOM   1082  C   ASP A  84     -21.042 -29.829 -17.797  1.00 39.76           C
ATOM   1083  O   ASP A  84     -21.225 -29.788 -19.018  1.00 43.65           O
ATOM   1084  CB  ASP A  84     -23.226 -29.136 -16.781  1.00 36.77           C
ATOM   1085  CG  ASP A  84     -23.522 -30.306 -15.870  1.00 37.27           C
ATOM   1086  OD1 ASP A  84     -24.052 -30.073 -14.765  1.00 54.04           O
ATOM   1087  OD2 ASP A  84     -23.218 -31.455 -16.253  1.00 36.88           O
ATOM   1088  N   TYR A  85     -20.250 -30.726 -17.213  1.00 35.59           N
ATOM   1089  CA  TYR A  85     -19.462 -31.675 -17.988  1.00 30.98           C
ATOM   1090  C   TYR A  85     -20.024 -33.090 -17.951  1.00 34.21           C
ATOM   1091  O   TYR A  85     -19.355 -34.024 -18.404  1.00 31.43           O
ATOM   1092  CB  TYR A  85     -18.009 -31.666 -17.515  1.00 31.35           C
ATOM   1093  CG  TYR A  85     -17.280 -30.390 -17.866  1.00 35.20           C
ATOM   1094  CD1 TYR A  85     -16.735 -30.205 -19.130  1.00 34.80           C
ATOM   1095  CD2 TYR A  85     -17.142 -29.368 -16.937  1.00 32.81           C
ATOM   1096  CE1 TYR A  85     -16.070 -29.038 -19.458  1.00 28.24           C
ATOM   1097  CE2 TYR A  85     -16.480 -28.200 -17.257  1.00 37.31           C
ATOM   1098  CZ  TYR A  85     -15.947 -28.040 -18.519  1.00 27.75           C
ATOM   1099  OH  TYR A  85     -15.286 -26.877 -18.834  1.00 26.27           O
ATOM   1100  N   HIS A  86     -21.231 -33.275 -17.417  1.00 36.69           N
ATOM   1101  CA  HIS A  86     -21.959 -34.516 -17.640  1.00 36.42           C
ATOM   1102  C   HIS A  86     -22.559 -34.581 -19.037  1.00 39.49           C
ATOM   1103  O   HIS A  86     -23.057 -35.638 -19.440  1.00 41.81           O
ATOM   1104  CB  HIS A  86     -23.068 -34.679 -16.598  1.00 38.38           C
ATOM   1105  CG  HIS A  86     -22.579 -34.639 -15.184  1.00 44.67           C
ATOM   1106  ND1 HIS A  86     -22.284 -33.461 -14.532  1.00 41.58           N
ATOM   1107  CD2 HIS A  86     -22.335 -35.632 -14.296  1.00 38.06           C
ATOM   1108  CE1 HIS A  86     -21.880 -33.730 -13.304  1.00 37.88           C
ATOM   1109  NE2 HIS A  86     -21.900 -35.040 -13.136  1.00 36.76           N
ATOM   1110  N   MET A  87     -22.528 -33.475 -19.773  1.00 41.83           N
ATOM   1111  CA  MET A  87     -23.025 -33.392 -21.134  1.00 39.58           C
ATOM   1112  C   MET A  87     -21.945 -32.757 -21.999  1.00 42.09           C
ATOM   1113  O   MET A  87     -20.965 -32.201 -21.493  1.00 38.97           O
ATOM   1114  CB  MET A  87     -24.324 -32.580 -21.192  1.00 45.06           C
ATOM   1115  CG  MET A  87     -25.307 -32.927 -20.086  1.00 50.37           C
ATOM   1116  SD  MET A  87     -26.576 -31.674 -19.826  1.00 67.21           S
ATOM   1117  CE  MET A  87     -27.387 -32.326 -18.368  1.00 65.63           C
ATOM   1118  N   ASN A  88     -22.121 -32.840 -23.317  1.00 36.85           N
ATOM   1119  CA  ASN A  88     -21.132 -32.328 -24.252  1.00 36.99           C
ATOM   1120  C   ASN A  88     -21.787 -31.479 -25.332  1.00 38.24           C
ATOM   1121  O   ASN A  88     -22.907 -31.753 -25.772  1.00 33.30           O
```

[2129]

```
ATOM   1122  CB  ASN A  88     -20.337 -33.461 -24.914  1.00 34.38           C
ATOM   1123  CG  ASN A  88     -19.035 -33.747 -24.203  1.00 33.93           C
ATOM   1124  OD1 ASN A  88     -18.551 -34.878 -24.193  1.00 34.95           O
ATOM   1125  ND2 ASN A  88     -18.459 -32.718 -23.596  1.00 41.33           N
ATOM   1126  N   SER A  89     -21.067 -30.443 -25.754  1.00 38.57           N
ATOM   1127  CA  SER A  89     -21.435 -29.657 -26.924  1.00 35.46           C
ATOM   1128  C   SER A  89     -20.755 -30.265 -28.144  1.00 35.85           C
ATOM   1129  O   SER A  89     -19.526 -30.384 -28.178  1.00 38.74           O
ATOM   1130  CB  SER A  89     -21.024 -28.194 -26.757  1.00 32.96           C
ATOM   1131  OG  SER A  89     -21.717 -27.578 -25.686  1.00 36.30           O
ATOM   1132  N   VAL A  90     -21.550 -30.657 -29.135  1.00 31.90           N
ATOM   1133  CA  VAL A  90     -21.015 -31.259 -30.354  1.00 35.39           C
ATOM   1134  C   VAL A  90     -21.626 -30.567 -31.568  1.00 34.13           C
ATOM   1135  O   VAL A  90     -22.814 -30.212 -31.548  1.00 35.66           O
ATOM   1136  CB  VAL A  90     -21.273 -32.774 -30.390  1.00 32.87           C
ATOM   1137  CG1 VAL A  90     -20.420 -33.481 -29.349  1.00 27.73           C
ATOM   1138  CG2 VAL A  90     -22.745 -33.068 -30.160  1.00 32.47           C
ATOM   1139  N   PRO A  91     -20.861 -30.350 -32.635  1.00 33.15           N
ATOM   1140  CA  PRO A  91     -21.414 -29.676 -33.815  1.00 34.55           C
ATOM   1141  C   PRO A  91     -22.284 -30.604 -34.648  1.00 31.47           C
ATOM   1142  O   PRO A  91     -21.948 -31.769 -34.877  1.00 31.94           O
ATOM   1143  CB  PRO A  91     -20.164 -29.249 -34.593  1.00 32.96           C
ATOM   1144  CG  PRO A  91     -19.138 -30.262 -34.213  1.00 34.60           C
ATOM   1145  CD  PRO A  91     -19.418 -30.617 -32.774  1.00 38.87           C
ATOM   1146  N   ILE A  92     -23.418 -30.072 -35.093  1.00 33.86           N
ATOM   1147  CA  ILE A  92     -24.274 -30.749 -36.060  1.00 35.39           C
ATOM   1148  C   ILE A  92     -23.749 -30.420 -37.450  1.00 35.58           C
ATOM   1149  O   ILE A  92     -23.701 -29.250 -37.844  1.00 37.23           O
ATOM   1150  CB  ILE A  92     -25.740 -30.319 -35.908  1.00 36.83           C
ATOM   1151  CG1 ILE A  92     -26.282 -30.729 -34.539  1.00 34.83           C
ATOM   1152  CG2 ILE A  92     -26.587 -30.911 -37.024  1.00 34.71           C
ATOM   1153  CD1 ILE A  92     -27.689 -30.235 -34.276  1.00 41.91           C
ATOM   1154  N   GLN A  93     -23.349 -31.446 -38.192  1.00 33.93           N
ATOM   1155  CA  GLN A  93     -22.704 -31.267 -39.484  1.00 44.24           C
ATOM   1156  C   GLN A  93     -23.585 -31.835 -40.586  1.00 36.84           C
ATOM   1157  O   GLN A  93     -24.112 -32.944 -40.458  1.00 41.09           O
ATOM   1158  CB  GLN A  93     -21.324 -31.928 -39.497  1.00 42.66           C
ATOM   1159  CG  GLN A  93     -20.358 -31.311 -38.498  1.00 36.76           C
ATOM   1160  CD  GLN A  93     -18.978 -31.927 -38.558  1.00 42.78           C
ATOM   1161  OE1 GLN A  93     -18.827 -33.147 -38.492  1.00 48.71           O
ATOM   1162  NE2 GLN A  93     -17.959 -31.085 -38.688  1.00 42.40           N
ATOM   1163  N   GLN A  94     -23.746 -31.068 -41.660  1.00 41.68           N
ATOM   1164  CA  GLN A  94     -24.528 -31.486 -42.813  1.00 41.82           C
ATOM   1165  C   GLN A  94     -23.686 -31.355 -44.072  1.00 37.16           C
ATOM   1166  O   GLN A  94     -22.712 -30.599 -44.122  1.00 34.39           O
ATOM   1167  CB  GLN A  94     -25.815 -30.661 -42.959  1.00 34.55           C
ATOM   1168  N   GLU A  95     -24.074 -32.112 -45.092  1.00 52.94           N
ATOM   1169  CA  GLU A  95     -23.451 -32.044 -46.406  1.00 48.53           C
ATOM   1170  C   GLU A  95     -24.315 -31.169 -47.304  1.00 36.75           C
ATOM   1171  O   GLU A  95     -25.513 -31.427 -47.461  1.00 39.31           O
ATOM   1172  CB  GLU A  95     -23.285 -33.442 -47.002  1.00 50.43           C
ATOM   1173  CG  GLU A  95     -22.436 -34.378 -46.154  1.00 58.86           C
ATOM   1174  CD  GLU A  95     -22.413 -35.798 -46.688  1.00 76.07           C
ATOM   1175  OE1 GLU A  95     -23.217 -36.110 -47.592  1.00 77.86           O
ATOM   1176  OE2 GLU A  95     -21.591 -36.604 -46.202  1.00 76.68           O
ATOM   1177  N   ILE A  96     -23.714 -30.130 -47.878  1.00 33.55           N
ATOM   1178  CA  ILE A  96     -24.434 -29.198 -48.736  1.00 46.55           C
ATOM   1179  C   ILE A  96     -23.815 -29.217 -50.126  1.00 44.96           C
ATOM   1180  O   ILE A  96     -22.630 -29.519 -50.298  1.00 44.14           O
ATOM   1181  CB  ILE A  96     -24.431 -27.763 -48.166  1.00 36.71           C
ATOM   1182  CG1 ILE A  96     -22.996 -27.272 -47.968  1.00 42.28           C
ATOM   1183  CG2 ILE A  96     -25.215 -27.703 -46.865  1.00 40.01           C
ATOM   1184  CD1 ILE A  96     -22.900 -25.852 -47.456  1.00 44.62           C
ATOM   1185  N   LEU A  97     -24.635 -28.892 -51.122  1.00 44.47           N
ATOM   1186  CA  LEU A  97     -24.149 -28.744 -52.486  1.00 46.27           C
ATOM   1187  C   LEU A  97     -23.583 -27.345 -52.680  1.00 42.56           C
ATOM   1188  O   LEU A  97     -24.195 -26.355 -52.266  1.00 38.73           O
ATOM   1189  CB  LEU A  97     -25.269 -29.002 -53.495  1.00 48.34           C
```

[2130]

```
ATOM   1190  CG  LEU A  97     -25.604 -30.456 -53.840  1.00 49.21           C
ATOM   1191  CD1 LEU A  97     -24.332 -31.230 -54.151  1.00 51.58           C
ATOM   1192  CD2 LEU A  97     -26.400 -31.133 -52.731  1.00 61.51           C
ATOM   1193  N   VAL A  98     -22.406 -27.267 -53.301  1.00 48.97           N
ATOM   1194  CA  VAL A  98     -21.781 -26.000 -53.651  1.00 50.24           C
ATOM   1195  C   VAL A  98     -21.267 -26.090 -55.082  1.00 49.45           C
ATOM   1196  O   VAL A  98     -21.019 -27.173 -55.614  1.00 47.69           O
ATOM   1197  CB  VAL A  98     -20.634 -25.619 -52.691  1.00 45.14           C
ATOM   1198  CG1 VAL A  98     -21.182 -25.286 -51.313  1.00 51.22           C
ATOM   1199  CG2 VAL A  98     -19.616 -26.743 -52.611  1.00 44.17           C
ATOM   1200  N   LEU A  99     -21.117 -24.926 -55.704  1.00 49.08           N
ATOM   1201  CA  LEU A  99     -20.606 -24.823 -57.064  1.00 49.08           C
ATOM   1202  C   LEU A  99     -19.172 -24.314 -57.008  1.00 51.25           C
ATOM   1203  O   LEU A  99     -18.905 -23.263 -56.416  1.00 52.40           O
ATOM   1204  CB  LEU A  99     -21.477 -23.891 -57.906  1.00 47.43           C
ATOM   1205  CG  LEU A  99     -22.948 -24.281 -58.051  1.00 53.68           C
ATOM   1206  CD1 LEU A  99     -23.705 -23.242 -58.864  1.00 57.22           C
ATOM   1207  CD2 LEU A  99     -23.076 -25.656 -58.685  1.00 51.39           C
ATOM   1208  N   ARG A 100     -18.253 -25.060 -57.613  1.00 50.01           N
ATOM   1209  CA  ARG A 100     -16.853 -24.670 -57.690  1.00 62.72           C
ATOM   1210  C   ARG A 100     -16.497 -24.369 -59.139  1.00 64.55           C
ATOM   1211  O   ARG A 100     -16.816 -25.156 -60.036  1.00 64.12           O
ATOM   1212  CB  ARG A 100     -15.943 -25.765 -57.131  1.00 63.81           C
ATOM   1213  CG  ARG A 100     -14.463 -25.432 -57.205  1.00 61.50           C
ATOM   1214  CD  ARG A 100     -13.667 -26.272 -56.227  1.00 59.48           C
ATOM   1215  NE  ARG A 100     -14.097 -26.039 -54.852  1.00 65.47           N
ATOM   1216  CZ  ARG A 100     -13.628 -25.066 -54.079  1.00 67.07           C
ATOM   1217  NH1 ARG A 100     -12.708 -24.232 -54.545  1.00 61.90           N
ATOM   1218  NH2 ARG A 100     -14.078 -24.926 -52.839  1.00 68.75           N
ATOM   1219  N   ARG A 101     -15.840 -23.229 -59.360  1.00 56.80           N
ATOM   1220  CA  ARG A 101     -15.484 -22.801 -60.707  1.00 66.30           C
ATOM   1221  C   ARG A 101     -14.542 -23.798 -61.370  1.00 73.74           C
ATOM   1222  O   ARG A 101     -13.375 -23.911 -60.982  1.00 77.46           O
ATOM   1223  CB  ARG A 101     -14.840 -21.413 -60.681  1.00 62.51           C
ATOM   1224  CG  ARG A 101     -15.658 -20.348 -59.975  1.00 56.60           C
ATOM   1225  CD  ARG A 101     -15.140 -18.958 -60.305  1.00 61.19           C
ATOM   1226  NE  ARG A 101     -15.628 -17.949 -59.370  1.00 62.26           N
ATOM   1227  CZ  ARG A 101     -16.812 -17.353 -59.458  1.00 56.35           C
ATOM   1228  NH1 ARG A 101     -17.644 -17.665 -60.441  1.00 61.47           N
ATOM   1229  NH2 ARG A 101     -17.166 -16.445 -58.558  1.00 52.10           N
ATOM   1230  N   GLU A 102     -15.041 -24.526 -62.366  1.00 69.81           N
ATOM   1231  CA  GLU A 102     -14.224 -25.450 -63.146  1.00 71.04           C
ATOM   1232  C   GLU A 102     -14.405 -25.098 -64.616  1.00 79.50           C
ATOM   1233  O   GLU A 102     -15.550 -25.110 -65.116  1.00 82.96           O
ATOM   1234  CB  GLU A 102     -14.607 -26.907 -62.878  1.00 71.73           C
ATOM   1235  CG  GLU A 102     -13.416 -27.810 -62.600  1.00 78.34           C
ATOM   1236  CD  GLU A 102     -12.795 -27.553 -61.239  1.00 81.77           C
ATOM   1237  OE1 GLU A 102     -13.548 -27.476 -60.245  1.00 74.86           O
ATOM   1238  OE2 GLU A 102     -11.554 -27.421 -61.161  1.00 82.22           O
ATOM   1239  N   PRO A 103     -13.329 -24.777 -65.355  1.00 82.01           N
ATOM   1240  CA  PRO A 103     -11.922 -24.719 -64.927  1.00 81.19           C
ATOM   1241  C   PRO A 103     -11.641 -23.624 -63.894  1.00 78.06           C
ATOM   1242  O   PRO A 103     -12.456 -22.714 -63.747  1.00 75.24           O
ATOM   1243  CB  PRO A 103     -11.169 -24.442 -66.238  1.00 84.74           C
ATOM   1244  CG  PRO A 103     -12.179 -23.865 -67.157  1.00 80.62           C
ATOM   1245  CD  PRO A 103     -13.479 -24.501 -66.794  1.00 81.48           C
ATOM   1246  N   PRO A 104     -10.521 -23.730 -63.175  1.00 80.94           N
ATOM   1247  CA  PRO A 104     -10.213 -22.729 -62.147  1.00 81.04           C
ATOM   1248  C   PRO A 104     -10.139 -21.329 -62.737  1.00 83.29           C
ATOM   1249  O   PRO A 104      -9.578 -21.118 -63.816  1.00 91.08           O
ATOM   1250  CB  PRO A 104      -8.854 -23.183 -61.602  1.00 82.44           C
ATOM   1251  CG  PRO A 104      -8.792 -24.644 -61.910  1.00 84.85           C
ATOM   1252  CD  PRO A 104      -9.522 -24.813 -63.210  1.00 83.28           C
ATOM   1253  N   HIS A 105     -10.715 -20.372 -62.006  1.00 76.14           N
ATOM   1254  CA  HIS A 105     -10.792 -18.977 -62.437  1.00 77.93           C
ATOM   1255  C   HIS A 105     -11.443 -18.879 -63.820  1.00 84.26           C
ATOM   1256  O   HIS A 105     -10.876 -18.349 -64.778  1.00 86.21           O
ATOM   1257  CB  HIS A 105      -9.406 -18.319 -62.416  1.00 79.98           C
```

[2131]

```
ATOM   1258  CG  HIS A 105      -8.761 -18.300 -61.063  1.00 87.71           C
ATOM   1259  ND1 HIS A 105      -8.512 -19.450 -60.345  1.00 87.50           N
ATOM   1260  CD2 HIS A 105      -8.307 -17.274 -60.304  1.00 87.45           C
ATOM   1261  CE1 HIS A 105      -7.936 -19.132 -59.199  1.00 86.27           C
ATOM   1262  NE2 HIS A 105      -7.800 -17.819 -59.149  1.00 91.01           N
ATOM   1263  N   SER A 106     -12.652 -19.422 -63.905  1.00 82.74           N
ATOM   1264  CA  SER A 106     -13.451 -19.374 -65.122  1.00 82.60           C
ATOM   1265  C   SER A 106     -14.918 -19.185 -64.752  1.00 75.35           C
ATOM   1266  O   SER A 106     -15.507 -20.052 -64.094  1.00 73.94           O
ATOM   1267  CB  SER A 106     -13.267 -20.646 -65.950  1.00 86.65           C
ATOM   1268  OG  SER A 106     -11.899 -20.912 -66.200  1.00 83.01           O
ATOM   1269  N   PRO A 107     -15.539 -18.085 -65.157  1.00 75.98           N
ATOM   1270  CA  PRO A 107     -16.946 -17.846 -64.827  1.00 69.78           C
ATOM   1271  C   PRO A 107     -17.856 -18.687 -65.717  1.00 70.15           C
ATOM   1272  O   PRO A 107     -17.400 -19.421 -66.593  1.00 77.81           O
ATOM   1273  CB  PRO A 107     -17.112 -16.352 -65.099  1.00 63.15           C
ATOM   1274  CG  PRO A 107     -16.150 -16.081 -66.204  1.00 60.51           C
ATOM   1275  CD  PRO A 107     -14.968 -16.995 -65.966  1.00 73.91           C
ATOM   1276  N   ASN A 108     -19.165 -18.565 -65.468  1.00 63.13           N
ATOM   1277  CA  ASN A 108     -20.218 -19.299 -66.174  1.00 66.94           C
ATOM   1278  C   ASN A 108     -19.849 -20.757 -66.438  1.00 60.84           C
ATOM   1279  O   ASN A 108     -20.260 -21.337 -67.447  1.00 67.03           O
ATOM   1280  CB  ASN A 108     -20.582 -18.590 -67.489  1.00 62.25           C
ATOM   1281  CG  ASN A 108     -19.459 -18.616 -68.514  1.00 58.27           C
ATOM   1282  OD1 ASN A 108     -18.628 -17.710 -68.565  1.00 55.24           O
ATOM   1283  ND2 ASN A 108     -19.436 -19.655 -69.341  1.00 62.22           N
ATOM   1284  N   SER A 109     -19.084 -21.357 -65.529  1.00 64.08           N
ATOM   1285  CA  SER A 109     -18.635 -22.738 -65.679  1.00 69.91           C
ATOM   1286  C   SER A 109     -18.286 -23.266 -64.298  1.00 67.13           C
ATOM   1287  O   SER A 109     -17.348 -22.767 -63.666  1.00 65.57           O
ATOM   1288  CB  SER A 109     -17.430 -22.826 -66.618  1.00 70.48           C
ATOM   1289  OG  SER A 109     -16.370 -21.997 -66.170  1.00 65.02           O
ATOM   1290  N   PHE A 110     -19.032 -24.261 -63.826  1.00 61.34           N
ATOM   1291  CA  PHE A 110     -18.877 -24.746 -62.464  1.00 69.09           C
ATOM   1292  C   PHE A 110     -18.954 -26.264 -62.439  1.00 66.53           C
ATOM   1293  O   PHE A 110     -19.548 -26.894 -63.318  1.00 68.51           O
ATOM   1294  CB  PHE A 110     -19.943 -24.153 -61.531  1.00 66.35           C
ATOM   1295  CG  PHE A 110     -19.934 -22.652 -61.477  1.00 66.99           C
ATOM   1296  CD1 PHE A 110     -20.695 -21.908 -62.365  1.00 58.84           C
ATOM   1297  CD2 PHE A 110     -19.165 -21.984 -60.537  1.00 56.45           C
ATOM   1298  CE1 PHE A 110     -20.689 -20.528 -62.318  1.00 57.07           C
ATOM   1299  CE2 PHE A 110     -19.155 -20.604 -60.485  1.00 59.25           C
ATOM   1300  CZ  PHE A 110     -19.918 -19.875 -61.377  1.00 62.19           C
ATOM   1301  N   ARG A 111     -18.337 -26.844 -61.413  1.00 64.89           N
ATOM   1302  CA  ARG A 111     -18.424 -28.270 -61.132  1.00 64.56           C
ATOM   1303  C   ARG A 111     -19.153 -28.460 -59.811  1.00 63.33           C
ATOM   1304  O   ARG A 111     -18.754 -27.887 -58.791  1.00 61.23           O
ATOM   1305  CB  ARG A 111     -17.036 -28.911 -61.068  1.00 66.39           C
ATOM   1306  CG  ARG A 111     -17.062 -30.424 -60.898  1.00 70.17           C
ATOM   1307  CD  ARG A 111     -15.734 -30.953 -60.377  1.00 68.49           C
ATOM   1308  NE  ARG A 111     -14.620 -30.640 -61.267  1.00 80.91           N
ATOM   1309  CZ  ARG A 111     -14.160 -31.459 -62.207  1.00 79.85           C
ATOM   1310  NH1 ARG A 111     -14.718 -32.649 -62.387  1.00 78.13           N
ATOM   1311  NH2 ARG A 111     -13.139 -31.090 -62.969  1.00 78.15           N
ATOM   1312  N   LEU A 112     -20.220 -29.254 -59.832  1.00 60.96           N
ATOM   1313  CA  LEU A 112     -21.015 -29.464 -58.630  1.00 52.76           C
ATOM   1314  C   LEU A 112     -20.213 -30.254 -57.602  1.00 56.79           C
ATOM   1315  O   LEU A 112     -19.661 -31.315 -57.909  1.00 57.05           O
ATOM   1316  CB  LEU A 112     -22.314 -30.189 -58.975  1.00 55.48           C
ATOM   1317  CG  LEU A 112     -23.345 -30.305 -57.852  1.00 59.17           C
ATOM   1318  CD1 LEU A 112     -23.544 -28.961 -57.173  1.00 61.77           C
ATOM   1319  CD2 LEU A 112     -24.663 -30.828 -58.394  1.00 60.08           C
ATOM   1320  N   GLU A 113     -20.149 -29.730 -56.381  1.00 52.94           N
ATOM   1321  CA  GLU A 113     -19.333 -30.298 -55.319  1.00 52.33           C
ATOM   1322  C   GLU A 113     -20.196 -30.533 -54.085  1.00 55.14           C
ATOM   1323  O   GLU A 113     -21.284 -29.967 -53.943  1.00 51.49           O
ATOM   1324  CB  GLU A 113     -18.150 -29.377 -54.982  1.00 52.74           C
ATOM   1325  CG  GLU A 113     -17.003 -30.050 -54.245  1.00 61.64           C
```

[2132]

```
ATOM   1326  CD  GLU A 113     -15.883 -29.083 -53.909  1.00 65.87           C
ATOM   1327  OE1 GLU A 113     -14.972 -29.467 -53.145  1.00 68.48           O
ATOM   1328  OE2 GLU A 113     -15.916 -27.938 -54.408  1.00 63.84           O
ATOM   1329  N   LYS A 114     -19.696 -31.382 -53.189  1.00 51.51           N
ATOM   1330  CA  LYS A 114     -20.408 -31.764 -51.973  1.00 54.08           C
ATOM   1331  C   LYS A 114     -19.447 -31.628 -50.799  1.00 51.82           C
ATOM   1332  O   LYS A 114     -18.536 -32.447 -50.641  1.00 52.31           O
ATOM   1333  CB  LYS A 114     -20.947 -33.191 -52.084  1.00 50.32           C
ATOM   1334  CG  LYS A 114     -22.234 -33.452 -51.319  1.00 52.13           C
ATOM   1335  CD  LYS A 114     -22.838 -34.790 -51.726  1.00 62.10           C
ATOM   1336  CE  LYS A 114     -24.200 -35.018 -51.087  1.00 69.95           C
ATOM   1337  NZ  LYS A 114     -24.108 -35.222 -49.616  1.00 59.46           N
ATOM   1338  N   ILE A 115     -19.644 -30.598 -49.981  1.00 41.90           N
ATOM   1339  CA  ILE A 115     -18.764 -30.319 -48.856  1.00 46.33           C
ATOM   1340  C   ILE A 115     -19.524 -30.542 -47.550  1.00 42.58           C
ATOM   1341  O   ILE A 115     -20.749 -30.666 -47.526  1.00 42.69           O
ATOM   1342  CB  ILE A 115     -18.177 -28.895 -48.916  1.00 43.94           C
ATOM   1343  CG1 ILE A 115     -19.279 -27.854 -48.719  1.00 41.86           C
ATOM   1344  CG2 ILE A 115     -17.454 -28.672 -50.235  1.00 49.34           C
ATOM   1345  CD1 ILE A 115     -18.775 -26.429 -48.720  1.00 45.31           C
ATOM   1346  N   LEU A 116     -18.773 -30.587 -46.452  1.00 43.93           N
ATOM   1347  CA  LEU A 116     -19.315 -30.820 -45.118  1.00 48.04           C
ATOM   1348  C   LEU A 116     -19.089 -29.573 -44.274  1.00 40.03           C
ATOM   1349  O   LEU A 116     -17.952 -29.109 -44.141  1.00 37.67           O
ATOM   1350  CB  LEU A 116     -18.659 -32.040 -44.468  1.00 36.42           C
ATOM   1351  CG  LEU A 116     -19.222 -32.512 -43.129  1.00 39.40           C
ATOM   1352  CD1 LEU A 116     -20.651 -32.997 -43.295  1.00 45.33           C
ATOM   1353  CD2 LEU A 116     -18.349 -33.606 -42.538  1.00 38.03           C
ATOM   1354  N   VAL A 117     -20.170 -29.031 -43.711  1.00 36.48           N
ATOM   1355  CA  VAL A 117     -20.107 -27.815 -42.912  1.00 48.46           C
ATOM   1356  C   VAL A 117     -20.805 -28.055 -41.580  1.00 46.43           C
ATOM   1357  O   VAL A 117     -21.645 -28.947 -41.441  1.00 39.11           O
ATOM   1358  CB  VAL A 117     -20.738 -26.604 -43.635  1.00 47.45           C
ATOM   1359  CG1 VAL A 117     -20.019 -26.327 -44.949  1.00 44.66           C
ATOM   1360  CG2 VAL A 117     -22.221 -26.840 -43.871  1.00 45.35           C
ATOM   1361  N   SER A 118     -20.444 -27.236 -40.594  1.00 42.83           N
ATOM   1362  CA  SER A 118     -21.058 -27.270 -39.273  1.00 37.86           C
ATOM   1363  C   SER A 118     -22.107 -26.169 -39.188  1.00 35.96           C
ATOM   1364  O   SER A 118     -21.776 -24.982 -39.289  1.00 36.09           O
ATOM   1365  CB  SER A 118     -20.009 -27.101 -38.175  1.00 38.70           C
ATOM   1366  OG  SER A 118     -19.112 -28.198 -38.156  1.00 52.74           O
ATOM   1367  N   VAL A 119     -23.364 -26.563 -38.999  1.00 32.65           N
ATOM   1368  CA  VAL A 119     -24.458 -25.600 -39.000  1.00 36.41           C
ATOM   1369  C   VAL A 119     -24.782 -25.102 -37.594  1.00 41.66           C
ATOM   1370  O   VAL A 119     -25.294 -23.989 -37.436  1.00 37.01           O
ATOM   1371  CB  VAL A 119     -25.699 -26.218 -39.666  1.00 42.90           C
ATOM   1372  CG1 VAL A 119     -26.683 -25.133 -40.080  1.00 49.65           C
ATOM   1373  CG2 VAL A 119     -25.288 -27.064 -40.862  1.00 44.51           C
ATOM   1374  N   GLY A 120     -24.492 -25.899 -36.573  1.00 37.79           N
ATOM   1375  CA  GLY A 120     -24.763 -25.500 -35.203  1.00 34.37           C
ATOM   1376  C   GLY A 120     -24.332 -26.597 -34.256  1.00 38.34           C
ATOM   1377  O   GLY A 120     -24.062 -27.733 -34.662  1.00 37.30           O
ATOM   1378  N   CYS A 121     -24.268 -26.237 -32.978  1.00 36.57           N
ATOM   1379  CA  CYS A 121     -23.876 -27.157 -31.920  1.00 35.38           C
ATOM   1380  C   CYS A 121     -25.094 -27.554 -31.097  1.00 37.37           C
ATOM   1381  O   CYS A 121     -25.970 -26.728 -30.823  1.00 33.23           O
ATOM   1382  CB  CYS A 121     -22.809 -26.531 -31.015  1.00 33.44           C
ATOM   1383  SG  CYS A 121     -21.198 -26.305 -31.817  1.00 50.32           S
ATOM   1384  N   THR A 122     -25.150 -28.827 -30.718  1.00 38.56           N
ATOM   1385  CA  THR A 122     -26.200 -29.353 -29.862  1.00 33.72           C
ATOM   1386  C   THR A 122     -25.574 -30.000 -28.632  1.00 35.77           C
ATOM   1387  O   THR A 122     -24.369 -30.266 -28.582  1.00 32.77           O
ATOM   1388  CB  THR A 122     -27.077 -30.362 -30.613  1.00 31.53           C
ATOM   1389  OG1 THR A 122     -28.229 -30.678 -29.821  1.00 38.30           O
ATOM   1390  CG2 THR A 122     -26.299 -31.633 -30.894  1.00 33.18           C
ATOM   1391  N   CYS A 123     -26.409 -30.248 -27.628  1.00 35.78           N
ATOM   1392  CA  CYS A 123     -25.968 -30.815 -26.361  1.00 33.66           C
ATOM   1393  C   CYS A 123     -26.368 -32.283 -26.287  1.00 35.55           C
```

[2133]

```
ATOM   1394  O   CYS A 123     -27.547 -32.618 -26.439  1.00 35.92           O
ATOM   1395  CB  CYS A 123     -26.561 -30.041 -25.183  1.00 35.65           C
ATOM   1396  SG  CYS A 123     -26.001 -30.624 -23.572  1.00 47.30           S
ATOM   1397  N   VAL A 124     -25.388 -33.150 -26.043  1.00 37.33           N
ATOM   1398  CA  VAL A 124     -25.585 -34.594 -26.032  1.00 36.48           C
ATOM   1399  C   VAL A 124     -25.271 -35.133 -24.643  1.00 39.82           C
ATOM   1400  O   VAL A 124     -24.267 -34.755 -24.030  1.00 36.65           O
ATOM   1401  CB  VAL A 124     -24.716 -35.286 -27.105  1.00 34.46           C
ATOM   1402  CG1 VAL A 124     -24.594 -36.776 -26.828  1.00 38.40           C
ATOM   1403  CG2 VAL A 124     -25.310 -35.052 -28.485  1.00 37.94           C
ATOM   1404  N   THR A 125     -26.143 -36.020 -24.148  1.00 38.13           N
ATOM   1405  CA  THR A 125     -26.032 -36.706 -22.873  1.00 39.31           C
ATOM   1406  C   THR A 125     -25.728 -38.189 -23.087  1.00 42.53           C
ATOM   1407  O   THR A 125     -26.175 -38.783 -24.073  1.00 45.35           O
ATOM   1408  CB  THR A 125     -27.326 -36.563 -22.060  1.00 37.98           C
ATOM   1409  OG1 THR A 125     -27.272 -37.409 -20.906  1.00 45.59           O
ATOM   1410  CG2 THR A 125     -28.537 -36.940 -22.906  1.00 38.98           C
ATOM   1411  N   PRO A 126     -24.960 -38.817 -22.190  1.00 45.55           N
ATOM   1412  CA  PRO A 126     -24.646 -40.243 -22.359  1.00 46.46           C
ATOM   1413  C   PRO A 126     -25.767 -41.185 -21.951  1.00 50.80           C
ATOM   1414  O   PRO A 126     -25.646 -42.395 -22.190  1.00 51.09           O
ATOM   1415  CB  PRO A 126     -23.422 -40.434 -21.455  1.00 38.55           C
ATOM   1416  CG  PRO A 126     -23.613 -39.426 -20.381  1.00 41.48           C
ATOM   1417  CD  PRO A 126     -24.246 -38.229 -21.042  1.00 41.75           C
ATOM   1418  N   ILE A 127     -26.842 -40.684 -21.349  1.00 50.90           N
ATOM   1419  CA  ILE A 127     -27.955 -41.509 -20.893  1.00 49.68           C
ATOM   1420  C   ILE A 127     -29.174 -41.187 -21.742  1.00 49.55           C
ATOM   1421  O   ILE A 127     -29.555 -40.017 -21.875  1.00 57.83           O
ATOM   1422  CB  ILE A 127     -28.259 -41.279 -19.403  1.00 55.19           C
ATOM   1423  CG1 ILE A 127     -27.005 -41.498 -18.557  1.00 49.00           C
ATOM   1424  CG2 ILE A 127     -29.382 -42.196 -18.944  1.00 52.26           C
ATOM   1425  CD1 ILE A 127     -27.174 -41.071 -17.118  1.00 54.66           C
ATOM   1426  N   VAL A 128     -29.787 -42.221 -22.311  1.00 55.87           N
ATOM   1427  CA  VAL A 128     -31.022 -42.090 -23.075  1.00 56.19           C
ATOM   1428  C   VAL A 128     -32.137 -42.773 -22.294  1.00 57.80           C
ATOM   1429  O   VAL A 128     -31.983 -43.914 -21.842  1.00 54.84           O
ATOM   1430  CB  VAL A 128     -30.879 -42.678 -24.490  1.00 61.32           C
ATOM   1431  CG1 VAL A 128     -29.979 -41.791 -25.337  1.00 52.85           C
ATOM   1432  CG2 VAL A 128     -30.321 -44.095 -24.436  1.00 59.32           C
ATOM   1433  N   ALA A 129     -33.251 -42.069 -22.120  1.00 59.10           N
ATOM   1434  CA  ALA A 129     -34.373 -42.598 -21.354  1.00 59.13           C
ATOM   1435  C   ALA A 129     -35.702 -42.235 -22.007  1.00 56.54           C
ATOM   1436  O   ALA A 129     -35.739 -41.771 -23.146  1.00 56.72           O
ATOM   1437  CB  ALA A 129     -34.325 -42.085 -19.923  1.00 51.53           C
TER
ATOM   1438  N   ASN C   1       -3.135 -33.154 -13.239  1.00 56.75           N
ATOM   1439  CA  ASN C   1       -4.573 -33.394 -13.248  1.00 57.86           C
ATOM   1440  C   ASN C   1       -5.051 -33.896 -11.888  1.00 55.42           C
ATOM   1441  O   ASN C   1       -5.195 -33.115 -10.946  1.00 58.45           O
ATOM   1442  CB  ASN C   1       -4.944 -34.397 -14.344  1.00 47.18           C
ATOM   1443  N   PHE C   2       -5.293 -35.201 -11.791  1.00 47.58           N
ATOM   1444  CA  PHE C   2       -5.795 -35.797 -10.561  1.00 45.29           C
ATOM   1445  C   PHE C   2       -5.536 -37.297 -10.595  1.00 45.09           C
ATOM   1446  O   PHE C   2       -5.276 -37.878 -11.652  1.00 41.38           O
ATOM   1447  CB  PHE C   2       -7.288 -35.506 -10.360  1.00 43.86           C
ATOM   1448  CG  PHE C   2       -8.179 -36.122 -11.406  1.00 44.28           C
ATOM   1449  CD1 PHE C   2       -8.432 -35.461 -12.597  1.00 41.96           C
ATOM   1450  CD2 PHE C   2       -8.776 -37.354 -11.190  1.00 44.03           C
ATOM   1451  CE1 PHE C   2       -9.256 -36.023 -13.557  1.00 43.00           C
ATOM   1452  CE2 PHE C   2       -9.599 -37.921 -12.146  1.00 41.32           C
ATOM   1453  CZ  PHE C   2       -9.841 -37.253 -13.330  1.00 40.90           C
ATOM   1454  N   MET C   3       -5.609 -37.915  -9.420  1.00 42.15           N
ATOM   1455  CA  MET C   3       -5.414 -39.348  -9.275  1.00 40.04           C
ATOM   1456  C   MET C   3       -6.679 -39.995  -8.731  1.00 43.44           C
ATOM   1457  O   MET C   3       -7.486 -39.350  -8.054  1.00 45.57           O
ATOM   1458  CB  MET C   3       -4.247 -39.666  -8.336  1.00 44.35           C
ATOM   1459  CG  MET C   3       -2.941 -38.987  -8.693  1.00 57.10           C
ATOM   1460  SD  MET C   3       -1.730 -39.185  -7.373  1.00 78.84           S
```

[2134]

```
ATOM   1461  CE  MET C   3      -2.629 -38.480  -5.994  1.00 42.25           C
ATOM   1462  N   LEU C   4      -6.843 -41.279  -9.037  1.00 43.48           N
ATOM   1463  CA  LEU C   4      -7.948 -42.086  -8.532  1.00 39.82           C
ATOM   1464  C   LEU C   4      -7.356 -43.223  -7.711  1.00 37.50           C
ATOM   1465  O   LEU C   4      -6.685 -44.105  -8.257  1.00 42.03           O
ATOM   1466  CB  LEU C   4      -8.814 -42.617  -9.673  1.00 49.16           C
ATOM   1467  CG  LEU C   4      -9.493 -41.552 -10.532  1.00 40.49           C
ATOM   1468  CD1 LEU C   4     -10.326 -42.202 -11.621  1.00 44.41           C
ATOM   1469  CD2 LEU C   4     -10.349 -40.644  -9.662  1.00 40.36           C
ATOM   1470  N   THR C   5      -7.606 -43.205  -6.408  1.00 43.17           N
ATOM   1471  CA  THR C   5      -7.018 -44.167  -5.487  1.00 39.62           C
ATOM   1472  C   THR C   5      -8.032 -45.262  -5.181  1.00 38.91           C
ATOM   1473  O   THR C   5      -9.113 -44.984  -4.650  1.00 41.29           O
ATOM   1474  CB  THR C   5      -6.568 -43.478  -4.200  1.00 42.05           C
ATOM   1475  OG1 THR C   5      -5.645 -42.429  -4.520  1.00 42.93           O
ATOM   1476  CG2 THR C   5      -5.891 -44.479  -3.271  1.00 42.58           C
ATOM   1477  N   GLN C   6      -7.684 -46.493  -5.527  1.00 39.37           N
ATOM   1478  CA  GLN C   6      -8.465 -47.676  -5.214  1.00 39.10           C
ATOM   1479  C   GLN C   6      -7.699 -48.569  -4.249  1.00 39.19           C
ATOM   1480  O   GLN C   6      -6.471 -48.475  -4.144  1.00 41.19           O
ATOM   1481  CB  GLN C   6      -8.787 -48.476  -6.484  1.00 40.49           C
ATOM   1482  CG  GLN C   6      -9.455 -47.688  -7.591  1.00 34.96           C
ATOM   1483  CD  GLN C   6      -9.718 -48.542  -8.817  1.00 50.60           C
ATOM   1484  OE1 GLN C   6      -9.248 -48.238  -9.914  1.00 49.80           O
ATOM   1485  NE2 GLN C   6     -10.470 -49.623  -8.634  1.00 46.93           N
ATOM   1486  N   PRO C   7      -8.388 -49.443  -3.516  1.00 44.25           N
ATOM   1487  CA  PRO C   7      -7.674 -50.496  -2.790  1.00 38.21           C
ATOM   1488  C   PRO C   7      -6.954 -51.411  -3.768  1.00 41.97           C
ATOM   1489  O   PRO C   7      -7.426 -51.661  -4.879  1.00 40.19           O
ATOM   1490  CB  PRO C   7      -8.788 -51.234  -2.035  1.00 35.24           C
ATOM   1491  CG  PRO C   7     -10.051 -50.862  -2.742  1.00 39.34           C
ATOM   1492  CD  PRO C   7      -9.836 -49.470  -3.247  1.00 40.76           C
ATOM   1493  N   HIS C   8      -5.787 -51.901  -3.347  1.00 46.27           N
ATOM   1494  CA  HIS C   8      -4.955 -52.699  -4.243  1.00 43.81           C
ATOM   1495  C   HIS C   8      -5.629 -54.019  -4.604  1.00 44.22           C
ATOM   1496  O   HIS C   8      -5.602 -54.439  -5.767  1.00 38.64           O
ATOM   1497  CB  HIS C   8      -3.589 -52.949  -3.608  1.00 46.60           C
ATOM   1498  CG  HIS C   8      -2.685 -53.802  -4.442  1.00 47.39           C
ATOM   1499  ND1 HIS C   8      -2.190 -53.390  -5.660  1.00 52.21           N
ATOM   1500  CD2 HIS C   8      -2.195 -55.047  -4.238  1.00 50.18           C
ATOM   1501  CE1 HIS C   8      -1.429 -54.343  -6.169  1.00 46.45           C
ATOM   1502  NE2 HIS C   8      -1.416 -55.359  -5.326  1.00 48.18           N
ATOM   1503  N   SER C   9      -6.233 -54.686  -3.624  1.00 42.59           N
ATOM   1504  CA  SER C   9      -6.878 -55.969  -3.857  1.00 45.97           C
ATOM   1505  C   SER C   9      -7.943 -56.182  -2.792  1.00 46.92           C
ATOM   1506  O   SER C   9      -7.890 -55.593  -1.710  1.00 52.56           O
ATOM   1507  CB  SER C   9      -5.867 -57.120  -3.843  1.00 45.42           C
ATOM   1508  OG  SER C   9      -5.296 -57.279  -2.556  1.00 45.19           O
ATOM   1509  N   VAL C  10      -8.923 -57.018  -3.125  1.00 49.97           N
ATOM   1510  CA  VAL C  10      -9.981 -57.407  -2.198  1.00 50.36           C
ATOM   1511  C   VAL C  10     -10.228 -58.901  -2.354  1.00 61.08           C
ATOM   1512  O   VAL C  10     -10.218 -59.428  -3.471  1.00 62.19           O
ATOM   1513  CB  VAL C  10     -11.281 -56.608  -2.435  1.00 45.53           C
ATOM   1514  CG1 VAL C  10     -12.378 -57.105  -1.519  1.00 52.60           C
ATOM   1515  CG2 VAL C  10     -11.051 -55.122  -2.212  1.00 47.79           C
ATOM   1516  N   SER C  11     -10.448 -59.584  -1.232  1.00 62.43           N
ATOM   1517  CA  SER C  11     -10.667 -61.027  -1.229  1.00 61.82           C
ATOM   1518  C   SER C  11     -11.827 -61.345  -0.301  1.00 57.77           C
ATOM   1519  O   SER C  11     -11.784 -61.009   0.886  1.00 66.24           O
ATOM   1520  CB  SER C  11      -9.405 -61.776  -0.791  1.00 67.84           C
ATOM   1521  OG  SER C  11      -8.281 -61.375  -1.556  1.00 73.27           O
ATOM   1522  N   GLU C  12     -12.859 -61.991  -0.842  1.00 56.00           N
ATOM   1523  CA  GLU C  12     -14.041 -62.360  -0.077  1.00 58.63           C
ATOM   1524  C   GLU C  12     -14.557 -63.702  -0.577  1.00 65.59           C
ATOM   1525  O   GLU C  12     -14.157 -64.193  -1.636  1.00 66.28           O
ATOM   1526  CB  GLU C  12     -15.137 -61.289  -0.176  1.00 46.86           C
ATOM   1527  N   SER C  13     -15.453 -64.299   0.203  1.00 67.56           N
ATOM   1528  CA  SER C  13     -16.025 -65.583  -0.159  1.00 66.02           C
```

[2135]

```
ATOM   1529  C   SER C  13     -17.215 -65.397  -1.096  1.00 63.81           C
ATOM   1530  O   SER C  13     -17.839 -64.332  -1.122  1.00 59.77           O
ATOM   1531  CB  SER C  13     -16.457 -66.337   1.096  1.00 60.56           C
ATOM   1532  OG  SER C  13     -15.359 -66.563   1.962  1.00 64.27           O
ATOM   1533  N   PRO C  14     -17.544 -66.419  -1.887  1.00 64.93           N
ATOM   1534  CA  PRO C  14     -18.732 -66.332  -2.746  1.00 69.60           C
ATOM   1535  C   PRO C  14     -20.002 -66.142  -1.929  1.00 64.60           C
ATOM   1536  O   PRO C  14     -20.166 -66.719  -0.852  1.00 68.56           O
ATOM   1537  CB  PRO C  14     -18.733 -67.674  -3.486  1.00 64.30           C
ATOM   1538  CG  PRO C  14     -17.310 -68.117  -3.464  1.00 62.44           C
ATOM   1539  CD  PRO C  14     -16.753 -67.633  -2.158  1.00 66.90           C
ATOM   1540  N   GLY C  15     -20.907 -65.319  -2.458  1.00 64.42           N
ATOM   1541  CA  GLY C  15     -22.170 -65.034  -1.817  1.00 61.89           C
ATOM   1542  C   GLY C  15     -22.187 -63.794  -0.949  1.00 62.51           C
ATOM   1543  O   GLY C  15     -23.271 -63.278  -0.654  1.00 65.62           O
ATOM   1544  N   LYS C  16     -21.023 -63.294  -0.539  1.00 60.13           N
ATOM   1545  CA  LYS C  16     -20.952 -62.094   0.279  1.00 66.94           C
ATOM   1546  C   LYS C  16     -21.151 -60.846  -0.580  1.00 65.35           C
ATOM   1547  O   LYS C  16     -21.333 -60.913  -1.799  1.00 62.64           O
ATOM   1548  CB  LYS C  16     -19.627 -62.030   1.037  1.00 66.57           C
ATOM   1549  CG  LYS C  16     -19.455 -63.101   2.103  1.00 67.44           C
ATOM   1550  CD  LYS C  16     -18.651 -62.559   3.278  1.00 66.69           C
ATOM   1551  CE  LYS C  16     -18.501 -63.586   4.391  1.00 55.81           C
ATOM   1552  NZ  LYS C  16     -17.544 -64.670   4.037  1.00 67.19           N
ATOM   1553  N   THR C  17     -21.116 -59.688   0.073  1.00 66.56           N
ATOM   1554  CA  THR C  17     -21.245 -58.396  -0.585  1.00 63.94           C
ATOM   1555  C   THR C  17     -19.954 -57.617  -0.385  1.00 58.90           C
ATOM   1556  O   THR C  17     -19.451 -57.518   0.739  1.00 62.33           O
ATOM   1557  CB  THR C  17     -22.435 -57.607  -0.029  1.00 66.17           C
ATOM   1558  OG1 THR C  17     -22.251 -57.390   1.376  1.00 73.98           O
ATOM   1559  CG2 THR C  17     -23.731 -58.373  -0.248  1.00 65.56           C
ATOM   1560  N   VAL C  18     -19.416 -57.078  -1.476  1.00 58.26           N
ATOM   1561  CA  VAL C  18     -18.142 -56.373  -1.461  1.00 50.57           C
ATOM   1562  C   VAL C  18     -18.350 -54.957  -1.982  1.00 50.92           C
ATOM   1563  O   VAL C  18     -19.247 -54.697  -2.790  1.00 55.56           O
ATOM   1564  CB  VAL C  18     -17.087 -57.127  -2.302  1.00 48.37           C
ATOM   1565  CG1 VAL C  18     -15.738 -56.436  -2.244  1.00 50.54           C
ATOM   1566  CG2 VAL C  18     -16.964 -58.557  -1.822  1.00 57.10           C
ATOM   1567  N   THR C  19     -17.511 -54.038  -1.508  1.00 43.97           N
ATOM   1568  CA  THR C  19     -17.525 -52.650  -1.946  1.00 44.81           C
ATOM   1569  C   THR C  19     -16.107 -52.228  -2.295  1.00 50.58           C
ATOM   1570  O   THR C  19     -15.175 -52.484  -1.526  1.00 58.59           O
ATOM   1571  CB  THR C  19     -18.099 -51.731  -0.862  1.00 47.86           C
ATOM   1572  OG1 THR C  19     -19.414 -52.174  -0.507  1.00 55.48           O
ATOM   1573  CG2 THR C  19     -18.173 -50.296  -1.362  1.00 51.86           C
ATOM   1574  N   ILE C  20     -15.943 -51.593  -3.453  1.00 46.74           N
ATOM   1575  CA  ILE C  20     -14.651 -51.094  -3.909  1.00 46.90           C
ATOM   1576  C   ILE C  20     -14.740 -49.579  -4.007  1.00 44.79           C
ATOM   1577  O   ILE C  20     -15.634 -49.049  -4.675  1.00 44.07           O
ATOM   1578  CB  ILE C  20     -14.246 -51.706  -5.263  1.00 42.07           C
ATOM   1579  CG1 ILE C  20     -14.176 -53.230  -5.163  1.00 45.55           C
ATOM   1580  CG2 ILE C  20     -12.910 -51.142  -5.720  1.00 35.96           C
ATOM   1581  CD1 ILE C  20     -13.854 -53.911  -6.476  1.00 38.65           C
ATOM   1582  N   SER C  21     -13.818 -48.886  -3.346  1.00 48.16           N
ATOM   1583  CA  SER C  21     -13.820 -47.431  -3.316  1.00 44.05           C
ATOM   1584  C   SER C  21     -12.902 -46.862  -4.393  1.00 39.89           C
ATOM   1585  O   SER C  21     -12.020 -47.541  -4.924  1.00 43.93           O
ATOM   1586  CB  SER C  21     -13.390 -46.917  -1.940  1.00 46.27           C
ATOM   1587  OG  SER C  21     -12.058 -47.299  -1.651  1.00 53.53           O
ATOM   1588  N   CYS C  22     -13.118 -45.583  -4.699  1.00 38.05           N
ATOM   1589  CA  CYS C  22     -12.379 -44.894  -5.755  1.00 37.46           C
ATOM   1590  C   CYS C  22     -12.370 -43.410  -5.400  1.00 35.14           C
ATOM   1591  O   CYS C  22     -13.343 -42.704  -5.674  1.00 37.15           O
ATOM   1592  CB  CYS C  22     -13.018 -45.145  -7.115  1.00 39.84           C
ATOM   1593  SG  CYS C  22     -12.322 -44.214  -8.497  1.00 49.47           S
ATOM   1594  N   THR C  23     -11.280 -42.948  -4.795  1.00 31.55           N
ATOM   1595  CA  THR C  23     -11.185 -41.587  -4.282  1.00 35.12           C
ATOM   1596  C   THR C  23     -10.499 -40.685  -5.300  1.00 36.76           C
```

[2136]

```
ATOM   1597  O   THR C  23      -9.419 -41.016  -5.802  1.00 39.81           O
ATOM   1598  CB  THR C  23     -10.422 -41.558  -2.956  1.00 38.90           C
ATOM   1599  OG1 THR C  23     -11.094 -42.388  -2.001  1.00 38.99           O
ATOM   1600  CG2 THR C  23     -10.338 -40.140  -2.417  1.00 33.15           C
ATOM   1601  N   ARG C  24     -11.121 -39.543  -5.590  1.00 39.99           N
ATOM   1602  CA  ARG C  24     -10.556 -38.550  -6.494  1.00 33.20           C
ATOM   1603  C   ARG C  24      -9.705 -37.563  -5.706  1.00 37.52           C
ATOM   1604  O   ARG C  24     -10.103 -37.097  -4.634  1.00 35.17           O
ATOM   1605  CB  ARG C  24     -11.666 -37.808  -7.242  1.00 37.98           C
ATOM   1606  CG  ARG C  24     -11.185 -36.953  -8.407  1.00 40.80           C
ATOM   1607  CD  ARG C  24     -12.323 -36.115  -8.975  1.00 40.42           C
ATOM   1608  NE  ARG C  24     -11.862 -35.163  -9.983  1.00 43.59           N
ATOM   1609  CZ  ARG C  24     -12.162 -35.234 -11.277  1.00 39.43           C
ATOM   1610  NH1 ARG C  24     -12.936 -36.210 -11.731  1.00 34.46           N
ATOM   1611  NH2 ARG C  24     -11.694 -34.321 -12.118  1.00 32.91           N
ATOM   1612  N   SER C  25      -8.529 -37.239  -6.248  1.00 40.06           N
ATOM   1613  CA  SER C  25      -7.574 -36.421  -5.507  1.00 40.08           C
ATOM   1614  C   SER C  25      -7.858 -34.930  -5.632  1.00 37.27           C
ATOM   1615  O   SER C  25      -7.590 -34.174  -4.693  1.00 35.88           O
ATOM   1616  CB  SER C  25      -6.149 -36.708  -5.979  1.00 40.31           C
ATOM   1617  OG  SER C  25      -5.968 -36.316  -7.328  1.00 43.14           O
ATOM   1618  N   SER C  26      -8.390 -34.485  -6.768  1.00 38.17           N
ATOM   1619  CA  SER C  26      -8.643 -33.068  -6.978  1.00 37.14           C
ATOM   1620  C   SER C  26      -9.889 -32.898  -7.832  1.00 40.54           C
ATOM   1621  O   SER C  26     -10.157 -33.697  -8.732  1.00 42.16           O
ATOM   1622  CB  SER C  26      -7.443 -32.381  -7.642  1.00 34.90           C
ATOM   1623  OG  SER C  26      -7.672 -30.992  -7.786  1.00 50.47           O
ATOM   1624  N   GLY C  27     -10.636 -31.845  -7.549  1.00 39.50           N
ATOM   1625  CA  GLY C  27     -11.899 -31.621  -8.232  1.00 36.28           C
ATOM   1626  C   GLY C  27     -13.043 -32.373  -7.586  1.00 40.12           C
ATOM   1627  O   GLY C  27     -12.873 -33.426  -6.969  1.00 48.48           O
ATOM   1628  N   SER C  28     -14.241 -31.812  -7.731  1.00 35.87           N
ATOM   1629  CA  SER C  28     -15.431 -32.413  -7.147  1.00 32.83           C
ATOM   1630  C   SER C  28     -15.838 -33.628  -7.972  1.00 41.86           C
ATOM   1631  O   SER C  28     -16.091 -33.513  -9.176  1.00 35.85           O
ATOM   1632  CB  SER C  28     -16.569 -31.399  -7.079  1.00 37.33           C
ATOM   1633  OG  SER C  28     -16.245 -30.326  -6.213  1.00 45.26           O
ATOM   1634  N   LEU C  29     -15.905 -34.791  -7.318  1.00 38.68           N
ATOM   1635  CA  LEU C  29     -16.282 -36.017  -8.010  1.00 39.19           C
ATOM   1636  C   LEU C  29     -17.696 -35.938  -8.566  1.00 39.50           C
ATOM   1637  O   LEU C  29     -17.998 -36.572  -9.582  1.00 41.04           O
ATOM   1638  CB  LEU C  29     -16.150 -37.208  -7.061  1.00 34.16           C
ATOM   1639  CG  LEU C  29     -16.375 -38.598  -7.655  1.00 34.24           C
ATOM   1640  CD1 LEU C  29     -15.052 -39.322  -7.849  1.00 34.11           C
ATOM   1641  CD2 LEU C  29     -17.315 -39.407  -6.781  1.00 34.52           C
ATOM   1642  N   ALA C  30     -18.573 -35.166  -7.923  1.00 33.27           N
ATOM   1643  CA  ALA C  30     -19.949 -35.050  -8.387  1.00 36.06           C
ATOM   1644  C   ALA C  30     -20.082 -34.213  -9.652  1.00 43.96           C
ATOM   1645  O   ALA C  30     -21.185 -34.135 -10.205  1.00 45.54           O
ATOM   1646  CB  ALA C  30     -20.829 -34.458  -7.284  1.00 36.77           C
ATOM   1647  N   ASN C  31     -19.001 -33.590 -10.122  1.00 43.97           N
ATOM   1648  CA  ASN C  31     -19.043 -32.790 -11.339  1.00 38.00           C
ATOM   1649  C   ASN C  31     -18.706 -33.583 -12.595  1.00 42.32           C
ATOM   1650  O   ASN C  31     -18.852 -33.048 -13.700  1.00 46.94           O
ATOM   1651  CB  ASN C  31     -18.087 -31.597 -11.229  1.00 37.88           C
ATOM   1652  CG  ASN C  31     -18.615 -30.510 -10.317  1.00 43.31           C
ATOM   1653  OD1 ASN C  31     -19.820 -30.412 -10.085  1.00 48.78           O
ATOM   1654  ND2 ASN C  31     -17.716 -29.680  -9.801  1.00 36.00           N
ATOM   1655  N   TYR C  32     -18.258 -34.830 -12.460  1.00 35.84           N
ATOM   1656  CA  TYR C  32     -17.895 -35.646 -13.610  1.00 37.00           C
ATOM   1657  C   TYR C  32     -18.379 -37.071 -13.391  1.00 35.34           C
ATOM   1658  O   TYR C  32     -18.310 -37.592 -12.275  1.00 41.05           O
ATOM   1659  CB  TYR C  32     -16.379 -35.631 -13.852  1.00 34.66           C
ATOM   1660  CG  TYR C  32     -15.777 -34.247 -13.793  1.00 38.48           C
ATOM   1661  CD1 TYR C  32     -15.885 -33.375 -14.869  1.00 32.47           C
ATOM   1662  CD2 TYR C  32     -15.108 -33.807 -12.657  1.00 39.66           C
ATOM   1663  CE1 TYR C  32     -15.340 -32.107 -14.817  1.00 31.87           C
[2137]
ATOM   1664  CE2 TYR C  32     -14.559 -32.540 -12.596  1.00 32.52           C
```

```
ATOM   1665  CZ  TYR C  32     -14.679 -31.695 -13.678  1.00 32.76           C
ATOM   1666  OH  TYR C  32     -14.136 -30.433 -13.624  1.00 30.76           O
ATOM   1667  N   TYR C  33     -18.866 -37.694 -14.462  1.00 36.28           N
ATOM   1668  CA  TYR C  33     -19.375 -39.054 -14.364  1.00 36.46           C
ATOM   1669  C   TYR C  33     -18.259 -40.027 -14.005  1.00 37.03           C
ATOM   1670  O   TYR C  33     -17.089 -39.821 -14.337  1.00 37.41           O
ATOM   1671  CB  TYR C  33     -20.027 -39.477 -15.679  1.00 32.10           C
ATOM   1672  CG  TYR C  33     -21.466 -39.045 -15.820  1.00 38.93           C
ATOM   1673  CD1 TYR C  33     -22.349 -39.143 -14.752  1.00 39.24           C
ATOM   1674  CD2 TYR C  33     -21.946 -38.545 -17.023  1.00 39.04           C
ATOM   1675  CE1 TYR C  33     -23.668 -38.752 -14.878  1.00 41.74           C
ATOM   1676  CE2 TYR C  33     -23.261 -38.150 -17.157  1.00 38.07           C
ATOM   1677  CZ  TYR C  33     -24.118 -38.256 -16.084  1.00 45.32           C
ATOM   1678  OH  TYR C  33     -25.430 -37.863 -16.218  1.00 56.72           O
ATOM   1679  N   VAL C  34     -18.637 -41.104 -13.323  1.00 32.42           N
ATOM   1680  CA  VAL C  34     -17.712 -42.157 -12.929  1.00 39.02           C
ATOM   1681  C   VAL C  34     -18.152 -43.450 -13.600  1.00 38.03           C
ATOM   1682  O   VAL C  34     -19.344 -43.777 -13.623  1.00 35.69           O
ATOM   1683  CB  VAL C  34     -17.646 -42.325 -11.396  1.00 32.73           C
ATOM   1684  CG1 VAL C  34     -16.611 -43.375 -11.022  1.00 25.26           C
ATOM   1685  CG2 VAL C  34     -17.326 -40.995 -10.731  1.00 34.19           C
ATOM   1686  N   GLN C  35     -17.187 -44.178 -14.152  1.00 27.93           N
ATOM   1687  CA  GLN C  35     -17.437 -45.435 -14.834  1.00 33.63           C
ATOM   1688  C   GLN C  35     -16.644 -46.548 -14.164  1.00 37.07           C
ATOM   1689  O   GLN C  35     -15.578 -46.312 -13.590  1.00 43.54           O
ATOM   1690  CB  GLN C  35     -17.062 -45.344 -16.320  1.00 43.88           C
ATOM   1691  CG  GLN C  35     -18.055 -44.571 -17.174  1.00 39.50           C
ATOM   1692  CD  GLN C  35     -18.131 -43.104 -16.804  1.00 32.91           C
ATOM   1693  OE1 GLN C  35     -19.217 -42.553 -16.625  1.00 29.46           O
ATOM   1694  NE2 GLN C  35     -16.975 -42.464 -16.684  1.00 33.42           N
ATOM   1695  N   TRP C  36     -17.176 -47.765 -14.237  1.00 37.42           N
ATOM   1696  CA  TRP C  36     -16.527 -48.940 -13.674  1.00 42.14           C
ATOM   1697  C   TRP C  36     -16.353 -49.990 -14.761  1.00 42.33           C
ATOM   1698  O   TRP C  36     -17.285 -50.259 -15.526  1.00 38.46           O
ATOM   1699  CB  TRP C  36     -17.340 -49.502 -12.506  1.00 44.37           C
ATOM   1700  CG  TRP C  36     -17.351 -48.601 -11.311  1.00 42.21           C
ATOM   1701  CD1 TRP C  36     -18.297 -47.670 -10.993  1.00 42.86           C
ATOM   1702  CD2 TRP C  36     -16.372 -48.551 -10.268  1.00 38.41           C
ATOM   1703  NE1 TRP C  36     -17.963 -47.039  -9.819  1.00 37.22           N
ATOM   1704  CE2 TRP C  36     -16.787 -47.564  -9.353  1.00 34.68           C
ATOM   1705  CE3 TRP C  36     -15.185 -49.246 -10.019  1.00 42.16           C
ATOM   1706  CZ2 TRP C  36     -16.056 -47.254  -8.209  1.00 36.72           C
ATOM   1707  CZ3 TRP C  36     -14.462 -48.937  -8.883  1.00 41.55           C
ATOM   1708  CH2 TRP C  36     -14.899 -47.949  -7.992  1.00 40.45           C
ATOM   1709  N   TYR C  37     -15.164 -50.588 -14.818  1.00 47.44           N
ATOM   1710  CA  TYR C  37     -14.834 -51.572 -15.835  1.00 47.28           C
ATOM   1711  C   TYR C  37     -14.265 -52.827 -15.190  1.00 49.34           C
ATOM   1712  O   TYR C  37     -13.581 -52.766 -14.164  1.00 47.40           O
ATOM   1713  CB  TYR C  37     -13.846 -51.004 -16.859  1.00 48.59           C
ATOM   1714  CG  TYR C  37     -14.326 -49.710 -17.467  1.00 46.43           C
ATOM   1715  CD1 TYR C  37     -15.154 -49.709 -18.581  1.00 46.44           C
ATOM   1716  CD2 TYR C  37     -13.964 -48.489 -16.918  1.00 50.48           C
ATOM   1717  CE1 TYR C  37     -15.603 -48.526 -19.135  1.00 52.35           C
ATOM   1718  CE2 TYR C  37     -14.405 -47.303 -17.464  1.00 52.21           C
ATOM   1719  CZ  TYR C  37     -15.224 -47.326 -18.572  1.00 46.44           C
ATOM   1720  OH  TYR C  37     -15.663 -46.141 -19.113  1.00 45.11           O
ATOM   1721  N   GLN C  38     -14.554 -53.966 -15.810  1.00 50.15           N
ATOM   1722  CA  GLN C  38     -14.074 -55.266 -15.363  1.00 50.78           C
ATOM   1723  C   GLN C  38     -13.113 -55.836 -16.397  1.00 48.34           C
ATOM   1724  O   GLN C  38     -13.419 -55.851 -17.593  1.00 55.58           O
ATOM   1725  CB  GLN C  38     -15.242 -56.229 -15.144  1.00 49.08           C
ATOM   1726  CG  GLN C  38     -14.832 -57.661 -14.864  1.00 52.85           C
ATOM   1727  CD  GLN C  38     -16.020 -58.600 -14.813  1.00 54.43           C
ATOM   1728  OE1 GLN C  38     -16.591 -58.952 -15.845  1.00 61.43           O
ATOM   1729  NE2 GLN C  38     -16.402 -59.009 -13.608  1.00 56.63           N
ATOM   1730  N   GLN C  39     -11.953 -56.297 -15.936  1.00 47.05           N
ATOM   1731  CA  GLN C  39     -10.942 -56.881 -16.808  1.00 53.42           C
[2138] ATOM   1732  C   GLN C  39     -10.544 -58.232 -16.238  1.00 59.19           C
```

```
ATOM   1733  O   GLN C  39     -10.036 -58.309 -15.114  1.00 56.36           O
ATOM   1734  CB  GLN C  39      -9.718 -55.973 -16.942  1.00 55.88           C
ATOM   1735  CG  GLN C  39      -8.727 -56.441 -17.995  1.00 56.78           C
ATOM   1736  CD  GLN C  39      -7.421 -55.675 -17.951  1.00 60.65           C
ATOM   1737  OE1 GLN C  39      -6.873 -55.421 -16.877  1.00 63.39           O
ATOM   1738  NE2 GLN C  39      -6.916 -55.299 -19.120  1.00 57.56           N
ATOM   1739  N   ARG C  40     -10.762 -59.283 -17.012  1.00 54.29           N
ATOM   1740  CA  ARG C  40     -10.436 -60.641 -16.608  1.00 54.18           C
ATOM   1741  C   ARG C  40      -9.044 -61.008 -17.100  1.00 60.17           C
ATOM   1742  O   ARG C  40      -8.458 -60.305 -17.928  1.00 60.60           O
ATOM   1743  CB  ARG C  40     -11.497 -61.593 -17.155  1.00 53.96           C
ATOM   1744  CG  ARG C  40     -12.877 -61.336 -16.579  1.00 53.76           C
ATOM   1745  CD  ARG C  40     -13.853 -62.450 -16.901  1.00 57.04           C
ATOM   1746  NE  ARG C  40     -15.088 -62.304 -16.137  1.00 62.23           N
ATOM   1747  CZ  ARG C  40     -16.164 -63.067 -16.296  1.00 72.02           C
ATOM   1748  NH1 ARG C  40     -16.164 -64.041 -17.196  1.00 67.66           N
ATOM   1749  NH2 ARG C  40     -17.242 -62.853 -15.554  1.00 78.48           N
ATOM   1750  N   PRO C  41      -8.460 -62.091 -16.580  1.00 61.42           N
ATOM   1751  CA  PRO C  41      -7.123 -62.503 -17.041  1.00 60.90           C
ATOM   1752  C   PRO C  41      -7.084 -62.710 -18.549  1.00 65.48           C
ATOM   1753  O   PRO C  41      -7.768 -63.580 -19.096  1.00 62.70           O
ATOM   1754  CB  PRO C  41      -6.869 -63.811 -16.277  1.00 64.71           C
ATOM   1755  CG  PRO C  41      -8.196 -64.204 -15.684  1.00 66.89           C
ATOM   1756  CD  PRO C  41      -8.917 -62.920 -15.452  1.00 63.87           C
ATOM   1757  N   GLY C  42      -6.279 -61.890 -19.221  1.00 65.49           N
ATOM   1758  CA  GLY C  42      -6.106 -61.993 -20.655  1.00 60.62           C
ATOM   1759  C   GLY C  42      -7.290 -61.557 -21.485  1.00 56.80           C
ATOM   1760  O   GLY C  42      -7.309 -61.819 -22.691  1.00 60.82           O
ATOM   1761  N   SER C  43      -8.278 -60.901 -20.885  1.00 60.16           N
ATOM   1762  CA  SER C  43      -9.482 -60.485 -21.585  1.00 60.56           C
ATOM   1763  C   SER C  43      -9.491 -58.973 -21.762  1.00 58.02           C
ATOM   1764  O   SER C  43      -8.781 -58.236 -21.072  1.00 56.68           O
ATOM   1765  CB  SER C  43     -10.743 -60.927 -20.833  1.00 55.83           C
ATOM   1766  OG  SER C  43     -11.114 -59.970 -19.856  1.00 59.38           O
ATOM   1767  N   SER C  44     -10.304 -58.518 -22.709  1.00 63.93           N
ATOM   1768  CA  SER C  44     -10.486 -57.091 -22.904  1.00 61.02           C
ATOM   1769  C   SER C  44     -11.323 -56.507 -21.767  1.00 57.44           C
ATOM   1770  O   SER C  44     -12.217 -57.173 -21.238  1.00 58.04           O
ATOM   1771  CB  SER C  44     -11.168 -56.813 -24.240  1.00 55.87           C
ATOM   1772  OG  SER C  44     -10.387 -57.292 -25.322  1.00 56.78           O
ATOM   1773  N   PRO C  45     -11.042 -55.270 -21.363  1.00 56.63           N
ATOM   1774  CA  PRO C  45     -11.862 -54.633 -20.326  1.00 52.61           C
ATOM   1775  C   PRO C  45     -13.290 -54.430 -20.808  1.00 53.68           C
ATOM   1776  O   PRO C  45     -13.527 -53.956 -21.922  1.00 61.66           O
ATOM   1777  CB  PRO C  45     -11.153 -53.296 -20.084  1.00 50.48           C
ATOM   1778  CG  PRO C  45      -9.760 -53.501 -20.585  1.00 58.23           C
ATOM   1779  CD  PRO C  45      -9.891 -54.438 -21.747  1.00 65.77           C
ATOM   1780  N   THR C  46     -14.245 -54.798 -19.961  1.00 52.17           N
ATOM   1781  CA  THR C  46     -15.657 -54.614 -20.250  1.00 54.96           C
ATOM   1782  C   THR C  46     -16.254 -53.656 -19.229  1.00 52.52           C
ATOM   1783  O   THR C  46     -15.739 -53.498 -18.119  1.00 60.09           O
ATOM   1784  CB  THR C  46     -16.418 -55.947 -20.240  1.00 59.89           C
ATOM   1785  OG1 THR C  46     -17.731 -55.752 -20.778  1.00 60.10           O
ATOM   1786  CG2 THR C  46     -16.525 -56.502 -18.823  1.00 54.03           C
ATOM   1787  N   ILE C  47     -17.353 -53.020 -19.612  1.00 50.28           N
ATOM   1788  CA  ILE C  47     -17.985 -52.000 -18.785  1.00 42.53           C
ATOM   1789  C   ILE C  47     -19.005 -52.662 -17.869  1.00 50.72           C
ATOM   1790  O   ILE C  47     -19.781 -53.523 -18.301  1.00 57.10           O
ATOM   1791  CB  ILE C  47     -18.632 -50.909 -19.656  1.00 45.27           C
ATOM   1792  CG1 ILE C  47     -19.297 -49.846 -18.783  1.00 42.77           C
ATOM   1793  CG2 ILE C  47     -19.623 -51.509 -20.645  1.00 51.59           C
ATOM   1794  CD1 ILE C  47     -19.803 -48.671 -19.569  1.00 50.72           C
ATOM   1795  N   VAL C  48     -18.988 -52.277 -16.595  1.00 47.68           N
ATOM   1796  CA  VAL C  48     -19.943 -52.769 -15.616  1.00 49.64           C
ATOM   1797  C   VAL C  48     -20.895 -51.672 -15.155  1.00 49.39           C
ATOM   1798  O   VAL C  48     -22.101 -51.903 -15.042  1.00 51.02           O
ATOM   1799  CB  VAL C  48     -19.207 -53.400 -14.413  1.00 53.44           C
ATOM   1800  CG1 VAL C  48     -20.175 -53.666 -13.275  1.00 49.51           C
```

[2139]

```
ATOM   1801  CG2 VAL C  48     -18.511 -54.685 -14.837  1.00 50.82           C
ATOM   1802  N   ILE C  49     -20.378 -50.476 -14.893  1.00 49.74           N
ATOM   1803  CA  ILE C  49     -21.190 -49.341 -14.465  1.00 46.75           C
ATOM   1804  C   ILE C  49     -20.684 -48.098 -15.181  1.00 44.58           C
ATOM   1805  O   ILE C  49     -19.472 -47.874 -15.263  1.00 49.65           O
ATOM   1806  CB  ILE C  49     -21.140 -49.140 -12.936  1.00 50.13           C
ATOM   1807  CG1 ILE C  49     -21.803 -50.314 -12.209  1.00 49.38           C
ATOM   1808  CG2 ILE C  49     -21.806 -47.826 -12.539  1.00 47.36           C
ATOM   1809  CD1 ILE C  49     -23.302 -50.387 -12.400  1.00 52.73           C
ATOM   1810  N   PHE C  50     -21.606 -47.303 -15.716  1.00 42.90           N
ATOM   1811  CA  PHE C  50     -21.283 -46.011 -16.300  1.00 41.22           C
ATOM   1812  C   PHE C  50     -22.256 -44.972 -15.768  1.00 45.25           C
ATOM   1813  O   PHE C  50     -23.328 -45.304 -15.256  1.00 48.77           O
ATOM   1814  CB  PHE C  50     -21.333 -46.043 -17.835  1.00 42.25           C
ATOM   1815  CG  PHE C  50     -22.713 -46.242 -18.397  1.00 47.36           C
ATOM   1816  CD1 PHE C  50     -23.255 -47.512 -18.506  1.00 48.57           C
ATOM   1817  CD2 PHE C  50     -23.464 -45.160 -18.827  1.00 49.49           C
ATOM   1818  CE1 PHE C  50     -24.522 -47.699 -19.025  1.00 54.14           C
ATOM   1819  CE2 PHE C  50     -24.732 -45.340 -19.347  1.00 51.45           C
ATOM   1820  CZ  PHE C  50     -25.261 -46.611 -19.446  1.00 56.68           C
ATOM   1821  N   ALA C  51     -21.864 -43.706 -15.895  1.00 39.41           N
ATOM   1822  CA  ALA C  51     -22.657 -42.573 -15.422  1.00 41.18           C
ATOM   1823  C   ALA C  51     -23.080 -42.767 -13.965  1.00 46.31           C
ATOM   1824  O   ALA C  51     -24.265 -42.761 -13.623  1.00 47.39           O
ATOM   1825  CB  ALA C  51     -23.871 -42.343 -16.325  1.00 40.29           C
ATOM   1826  N   ASN C  52     -22.070 -42.966 -13.112  1.00 43.09           N
ATOM   1827  CA  ASN C  52     -22.226 -43.123 -11.667  1.00 45.01           C
ATOM   1828  C   ASN C  52     -22.930 -44.423 -11.287  1.00 47.75           C
ATOM   1829  O   ASN C  52     -22.357 -45.250 -10.570  1.00 54.63           O
ATOM   1830  CB  ASN C  52     -22.977 -41.928 -11.071  1.00 39.03           C
ATOM   1831  CG  ASN C  52     -22.227 -40.624 -11.243  1.00 36.48           C
ATOM   1832  OD1 ASN C  52     -21.044 -40.618 -11.582  1.00 39.66           O
ATOM   1833  ND2 ASN C  52     -22.912 -39.511 -11.012  1.00 29.93           N
ATOM   1834  N   ASN C  53     -24.168 -44.618 -11.748  1.00 51.37           N
ATOM   1835  CA  ASN C  53     -24.947 -45.773 -11.323  1.00 51.02           C
ATOM   1836  C   ASN C  53     -25.692 -46.478 -12.448  1.00 57.27           C
ATOM   1837  O   ASN C  53     -26.402 -47.450 -12.170  1.00 51.80           O
ATOM   1838  CB  ASN C  53     -25.954 -45.364 -10.235  1.00 48.33           C
ATOM   1839  CG  ASN C  53     -27.014 -44.406 -10.749  1.00 50.82           C
ATOM   1840  OD1 ASN C  53     -26.809 -43.709 -11.742  1.00 54.86           O
ATOM   1841  ND2 ASN C  53     -28.155 -44.367 -10.069  1.00 44.30           N
ATOM   1842  N   GLN C  54     -25.560 -46.034 -13.696  1.00 51.72           N
ATOM   1843  CA  GLN C  54     -26.286 -46.663 -14.792  1.00 50.08           C
ATOM   1844  C   GLN C  54     -25.653 -48.002 -15.145  1.00 53.26           C
ATOM   1845  O   GLN C  54     -24.448 -48.087 -15.401  1.00 55.21           O
ATOM   1846  CB  GLN C  54     -26.309 -45.749 -16.016  1.00 50.99           C
ATOM   1847  CG  GLN C  54     -27.032 -44.435 -15.792  1.00 52.10           C
ATOM   1848  CD  GLN C  54     -28.488 -44.633 -15.426  1.00 57.11           C
ATOM   1849  OE1 GLN C  54     -29.294 -45.063 -16.252  1.00 59.21           O
ATOM   1850  NE2 GLN C  54     -28.835 -44.321 -14.182  1.00 49.24           N
ATOM   1851  N   ARG C  55     -26.470 -49.049 -15.154  1.00 56.34           N
ATOM   1852  CA  ARG C  55     -26.019 -50.398 -15.463  1.00 59.02           C
ATOM   1853  C   ARG C  55     -26.431 -50.778 -16.876  1.00 57.15           C
ATOM   1854  O   ARG C  55     -27.617 -50.667 -17.218  1.00 57.32           O
ATOM   1855  CB  ARG C  55     -26.603 -51.394 -14.467  1.00 54.85           C
ATOM   1856  CG  ARG C  55     -26.087 -52.811 -14.626  1.00 55.88           C
ATOM   1857  CD  ARG C  55     -26.605 -53.704 -13.512  1.00 62.88           C
ATOM   1858  NE  ARG C  55     -27.852 -53.198 -12.946  1.00 66.42           N
ATOM   1859  CZ  ARG C  55     -29.062 -53.578 -13.344  1.00 73.71           C
ATOM   1860  NH1 ARG C  55     -29.194 -54.470 -14.317  1.00 66.86           N
ATOM   1861  NH2 ARG C  55     -30.141 -53.063 -12.771  1.00 75.04           N
ATOM   1862  N   PRO C  56     -25.500 -51.213 -17.722  1.00 51.22           N
ATOM   1863  CA  PRO C  56     -25.859 -51.574 -19.097  1.00 54.62           C
ATOM   1864  C   PRO C  56     -26.674 -52.858 -19.140  1.00 61.98           C
ATOM   1865  O   PRO C  56     -26.861 -53.556 -18.141  1.00 57.10           O
ATOM   1866  CB  PRO C  56     -24.504 -51.758 -19.791  1.00 54.01           C
ATOM   1867  CG  PRO C  56     -23.495 -51.130 -18.873  1.00 60.57           C
ATOM   1868  CD  PRO C  56     -24.049 -51.288 -17.495  1.00 56.93           C
```

[2140]

```
ATOM   1869  N   SER C  57     -27.159 -53.169 -20.339  1.00 67.23           N
ATOM   1870  CA  SER C  57     -27.870 -54.417 -20.572  1.00 64.39           C
ATOM   1871  C   SER C  57     -26.872 -55.563 -20.669  1.00 62.41           C
ATOM   1872  O   SER C  57     -25.903 -55.493 -21.433  1.00 58.17           O
ATOM   1873  CB  SER C  57     -28.708 -54.327 -21.846  1.00 68.85           C
ATOM   1874  N   GLY C  58     -27.106 -56.614 -19.889  1.00 61.89           N
ATOM   1875  CA  GLY C  58     -26.206 -57.748 -19.814  1.00 64.96           C
ATOM   1876  C   GLY C  58     -25.453 -57.863 -18.508  1.00 63.38           C
ATOM   1877  O   GLY C  58     -24.827 -58.901 -18.263  1.00 68.90           O
ATOM   1878  N   VAL C  59     -25.490 -56.838 -17.667  1.00 57.25           N
ATOM   1879  CA  VAL C  59     -24.841 -56.858 -16.359  1.00 60.16           C
ATOM   1880  C   VAL C  59     -25.913 -57.139 -15.311  1.00 58.94           C
ATOM   1881  O   VAL C  59     -26.919 -56.413 -15.265  1.00 60.74           O
ATOM   1882  CB  VAL C  59     -24.118 -55.535 -16.068  1.00 62.73           C
ATOM   1883  CG1 VAL C  59     -23.404 -55.604 -14.727  1.00 61.95           C
ATOM   1884  CG2 VAL C  59     -23.136 -55.211 -17.184  1.00 61.51           C
ATOM   1885  N   PRO C  60     -25.755 -58.164 -14.476  1.00 46.74           N
ATOM   1886  CA  PRO C  60     -26.801 -58.479 -13.495  1.00 54.39           C
ATOM   1887  C   PRO C  60     -26.967 -57.359 -12.477  1.00 62.58           C
ATOM   1888  O   PRO C  60     -26.037 -56.600 -12.195  1.00 63.02           O
ATOM   1889  CB  PRO C  60     -26.296 -59.768 -12.836  1.00 60.17           C
ATOM   1890  CG  PRO C  60     -24.821 -59.772 -13.084  1.00 63.17           C
ATOM   1891  CD  PRO C  60     -24.629 -59.110 -14.413  1.00 51.14           C
ATOM   1892  N   ASP C  61     -28.176 -57.273 -11.917  1.00 58.89           N
ATOM   1893  CA  ASP C  61     -28.521 -56.193 -10.999  1.00 64.67           C
ATOM   1894  C   ASP C  61     -27.709 -56.215  -9.710  1.00 65.70           C
ATOM   1895  O   ASP C  61     -27.740 -55.229  -8.965  1.00 59.11           O
ATOM   1896  CB  ASP C  61     -30.016 -56.248 -10.673  1.00 72.89           C
ATOM   1897  CG  ASP C  61     -30.443 -57.587 -10.100  1.00 84.63           C
ATOM   1898  OD1 ASP C  61     -29.610 -58.518 -10.061  1.00 85.41           O
ATOM   1899  OD2 ASP C  61     -31.616 -57.709  -9.687  1.00 91.90           O
ATOM   1900  N   ARG C  62     -26.996 -57.307  -9.425  1.00 62.69           N
ATOM   1901  CA  ARG C  62     -26.176 -57.366  -8.219  1.00 66.92           C
ATOM   1902  C   ARG C  62     -25.005 -56.390  -8.278  1.00 64.03           C
ATOM   1903  O   ARG C  62     -24.497 -55.974  -7.231  1.00 58.35           O
ATOM   1904  CB  ARG C  62     -25.705 -58.802  -7.994  1.00 63.30           C
ATOM   1905  CG  ARG C  62     -25.034 -59.433  -9.194  1.00 63.09           C
ATOM   1906  CD  ARG C  62     -24.694 -60.889  -8.926  1.00 64.32           C
ATOM   1907  NE  ARG C  62     -23.874 -61.454  -9.990  1.00 64.33           N
ATOM   1908  CZ  ARG C  62     -22.552 -61.552  -9.933  1.00 64.77           C
ATOM   1909  NH1 ARG C  62     -21.905 -61.125  -8.858  1.00 61.38           N
ATOM   1910  NH2 ARG C  62     -21.879 -62.074 -10.949  1.00 63.39           N
ATOM   1911  N   PHE C  63     -24.563 -56.019  -9.478  1.00 63.29           N
ATOM   1912  CA  PHE C  63     -23.606 -54.931  -9.631  1.00 52.92           C
ATOM   1913  C   PHE C  63     -24.321 -53.591  -9.505  1.00 44.96           C
ATOM   1914  O   PHE C  63     -25.416 -53.404 -10.042  1.00 52.66           O
ATOM   1915  CB  PHE C  63     -22.897 -55.012 -10.983  1.00 52.87           C
ATOM   1916  CG  PHE C  63     -21.933 -56.156 -11.102  1.00 51.97           C
ATOM   1917  CD1 PHE C  63     -22.347 -57.383 -11.593  1.00 59.74           C
ATOM   1918  CD2 PHE C  63     -20.605 -56.001 -10.736  1.00 51.38           C
ATOM   1919  CE1 PHE C  63     -21.456 -58.438 -11.708  1.00 60.64           C
ATOM   1920  CE2 PHE C  63     -19.709 -57.049 -10.851  1.00 54.15           C
ATOM   1921  CZ  PHE C  63     -20.135 -58.269 -11.336  1.00 55.26           C
ATOM   1922  N   SER C  64     -23.702 -52.660  -8.783  1.00 48.04           N
ATOM   1923  CA  SER C  64     -24.296 -51.343  -8.597  1.00 53.56           C
ATOM   1924  C   SER C  64     -23.209 -50.349  -8.215  1.00 48.15           C
ATOM   1925  O   SER C  64     -22.230 -50.702  -7.551  1.00 48.89           O
ATOM   1926  CB  SER C  64     -25.396 -51.365  -7.530  1.00 50.52           C
ATOM   1927  OG  SER C  64     -24.887 -51.790  -6.279  1.00 53.20           O
ATOM   1928  N   GLY C  65     -23.398 -49.104  -8.637  1.00 44.87           N
ATOM   1929  CA  GLY C  65     -22.457 -48.040  -8.350  1.00 44.48           C
ATOM   1930  C   GLY C  65     -23.101 -46.940  -7.529  1.00 48.49           C
ATOM   1931  O   GLY C  65     -24.315 -46.736  -7.578  1.00 46.28           O
ATOM   1932  N   SER C  66     -22.271 -46.229  -6.769  1.00 45.21           N
ATOM   1933  CA  SER C  66     -22.738 -45.136  -5.931  1.00 39.06           C
ATOM   1934  C   SER C  66     -21.605 -44.138  -5.752  1.00 42.27           C
ATOM   1935  O   SER C  66     -20.430 -44.463  -5.938  1.00 41.98           O
ATOM   1936  CB  SER C  66     -23.237 -45.640  -4.572  1.00 39.35           C
```

[2141]

```
ATOM   1937  OG  SER C  66     -22.190 -46.256  -3.844  1.00 48.54           O
ATOM   1938  N   ILE C  67     -21.973 -42.911  -5.389  1.00 36.97           N
ATOM   1939  CA  ILE C  67     -21.020 -41.822  -5.216  1.00 37.05           C
ATOM   1940  C   ILE C  67     -21.214 -41.211  -3.836  1.00 39.43           C
ATOM   1941  O   ILE C  67     -22.343 -41.106  -3.343  1.00 32.04           O
ATOM   1942  CB  ILE C  67     -21.164 -40.748  -6.316  1.00 40.35           C
ATOM   1943  CG1 ILE C  67     -22.588 -40.191  -6.350  1.00 40.09           C
ATOM   1944  CG2 ILE C  67     -20.777 -41.317  -7.675  1.00 35.38           C
ATOM   1945  CD1 ILE C  67     -22.781 -39.083  -7.359  1.00 43.08           C
ATOM   1946  N   ASP C  68     -20.107 -40.818  -3.211  1.00 38.72           N
ATOM   1947  CA  ASP C  68     -20.107 -40.138  -1.917  1.00 40.75           C
ATOM   1948  C   ASP C  68     -19.363 -38.816  -2.082  1.00 41.34           C
ATOM   1949  O   ASP C  68     -18.130 -38.793  -2.149  1.00 46.27           O
ATOM   1950  CB  ASP C  68     -19.468 -41.010  -0.840  1.00 46.42           C
ATOM   1951  CG  ASP C  68     -19.558 -40.391   0.544  1.00 44.80           C
ATOM   1952  OD1 ASP C  68     -20.280 -39.384   0.708  1.00 44.99           O
ATOM   1953  OD2 ASP C  68     -18.904 -40.915   1.470  1.00 50.76           O
ATOM   1954  N   SER C  69     -20.116 -37.717  -2.154  1.00 38.57           N
ATOM   1955  CA  SER C  69     -19.500 -36.412  -2.370  1.00 43.23           C
ATOM   1956  C   SER C  69     -18.715 -35.940  -1.151  1.00 46.50           C
ATOM   1957  O   SER C  69     -17.731 -35.206  -1.298  1.00 47.33           O
ATOM   1958  CB  SER C  69     -20.567 -35.383  -2.737  1.00 41.95           C
ATOM   1959  OG  SER C  69     -21.496 -35.227  -1.680  1.00 58.62           O
ATOM   1960  N   SER C  70     -19.128 -36.345   0.054  1.00 48.89           N
ATOM   1961  CA  SER C  70     -18.443 -35.888   1.260  1.00 44.15           C
ATOM   1962  C   SER C  70     -17.022 -36.432   1.328  1.00 44.83           C
ATOM   1963  O   SER C  70     -16.106 -35.735   1.779  1.00 43.65           O
ATOM   1964  CB  SER C  70     -19.235 -36.297   2.500  1.00 45.18           C
ATOM   1965  OG  SER C  70     -19.331 -37.707   2.596  1.00 51.72           O
ATOM   1966  N   SER C  71     -16.823 -37.678   0.907  1.00 43.60           N
ATOM   1967  CA  SER C  71     -15.496 -38.273   0.833  1.00 44.82           C
ATOM   1968  C   SER C  71     -14.854 -38.109  -0.540  1.00 43.35           C
ATOM   1969  O   SER C  71     -13.702 -38.518  -0.719  1.00 40.85           O
ATOM   1970  CB  SER C  71     -15.561 -39.761   1.194  1.00 40.69           C
ATOM   1971  OG  SER C  71     -16.352 -40.474   0.259  1.00 46.05           O
ATOM   1972  N   ASN C  72     -15.572 -37.524  -1.504  1.00 39.88           N
ATOM   1973  CA  ASN C  72     -15.069 -37.321  -2.865  1.00 43.48           C
ATOM   1974  C   ASN C  72     -14.631 -38.641  -3.496  1.00 39.65           C
ATOM   1975  O   ASN C  72     -13.571 -38.731  -4.121  1.00 34.91           O
ATOM   1976  CB  ASN C  72     -13.928 -36.301  -2.895  1.00 40.21           C
ATOM   1977  CG  ASN C  72     -13.860 -35.543  -4.207  1.00 34.45           C
ATOM   1978  OD1 ASN C  72     -14.887 -35.221  -4.802  1.00 32.58           O
ATOM   1979  ND2 ASN C  72     -12.647 -35.259  -4.668  1.00 34.89           N
ATOM   1980  N   SER C  73     -15.455 -39.674  -3.335  1.00 36.43           N
ATOM   1981  CA  SER C  73     -15.113 -41.004  -3.812  1.00 38.52           C
ATOM   1982  C   SER C  73     -16.349 -41.683  -4.383  1.00 34.03           C
ATOM   1983  O   SER C  73     -17.485 -41.309  -4.084  1.00 38.74           O
ATOM   1984  CB  SER C  73     -14.502 -41.864  -2.695  1.00 40.44           C
ATOM   1985  OG  SER C  73     -15.384 -41.976  -1.593  1.00 43.45           O
ATOM   1986  N   ALA C  74     -16.107 -42.686  -5.223  1.00 31.73           N
ATOM   1987  CA  ALA C  74     -17.155 -43.506  -5.808  1.00 35.70           C
ATOM   1988  C   ALA C  74     -16.987 -44.945  -5.342  1.00 36.93           C
ATOM   1989  O   ALA C  74     -15.887 -45.381  -4.991  1.00 41.61           O
ATOM   1990  CB  ALA C  74     -17.128 -43.445  -7.342  1.00 32.68           C
ATOM   1991  N   SER C  75     -18.089 -45.692  -5.354  1.00 34.09           N
ATOM   1992  CA  SER C  75     -18.073 -47.064  -4.867  1.00 40.82           C
ATOM   1993  C   SER C  75     -18.840 -47.974  -5.813  1.00 41.73           C
ATOM   1994  O   SER C  75     -19.942 -47.635  -6.254  1.00 40.17           O
ATOM   1995  CB  SER C  75     -18.665 -47.158  -3.456  1.00 43.85           C
ATOM   1996  OG  SER C  75     -17.776 -46.617  -2.493  1.00 43.76           O
ATOM   1997  N   LEU C  76     -18.249 -49.127  -6.114  1.00 39.56           N
ATOM   1998  CA  LEU C  76     -18.910 -50.205  -6.835  1.00 44.15           C
ATOM   1999  C   LEU C  76     -19.179 -51.335  -5.850  1.00 44.56           C
ATOM   2000  O   LEU C  76     -18.246 -51.854  -5.228  1.00 47.27           O
ATOM   2001  CB  LEU C  76     -18.052 -50.698  -8.000  1.00 42.00           C
ATOM   2002  CG  LEU C  76     -18.515 -51.987  -8.681  1.00 38.23           C
ATOM   2003  CD1 LEU C  76     -19.789 -51.750  -9.475  1.00 40.50           C
ATOM   2004  CD2 LEU C  76     -17.421 -52.553  -9.569  1.00 36.22           C
```

[2142]

```
ATOM   2005  N   THR C  77     -20.444 -51.716  -5.716  1.00 48.29           N
ATOM   2006  CA  THR C  77     -20.864 -52.735  -4.762  1.00 49.09           C
ATOM   2007  C   THR C  77     -21.290 -53.980  -5.528  1.00 53.14           C
ATOM   2008  O   THR C  77     -22.200 -53.919  -6.363  1.00 48.91           O
ATOM   2009  CB  THR C  77     -22.004 -52.229  -3.879  1.00 50.42           C
ATOM   2010  OG1 THR C  77     -23.171 -52.008  -4.681  1.00 65.89           O
ATOM   2011  CG2 THR C  77     -21.612 -50.925  -3.199  1.00 49.86           C
ATOM   2012  N   ILE C  78     -20.637 -55.101  -5.241  1.00 55.18           N
ATOM   2013  CA  ILE C  78     -20.946 -56.383  -5.862  1.00 57.63           C
ATOM   2014  C   ILE C  78     -21.577 -57.253  -4.783  1.00 64.48           C
ATOM   2015  O   ILE C  78     -20.880 -57.795  -3.917  1.00 60.97           O
ATOM   2016  CB  ILE C  78     -19.701 -57.051  -6.455  1.00 57.11           C
ATOM   2017  CG1 ILE C  78     -18.913 -56.064  -7.316  1.00 54.20           C
ATOM   2018  CG2 ILE C  78     -20.094 -58.269  -7.277  1.00 57.90           C
ATOM   2019  CD1 ILE C  78     -17.657 -56.661  -7.921  1.00 46.54           C
ATOM   2020  N   SER C  79     -22.899 -57.391  -4.831  1.00 70.04           N
ATOM   2021  CA  SER C  79     -23.621 -58.222  -3.879  1.00 70.68           C
ATOM   2022  C   SER C  79     -23.707 -59.649  -4.404  1.00 67.97           C
ATOM   2023  O   SER C  79     -23.857 -59.872  -5.608  1.00 69.85           O
ATOM   2024  CB  SER C  79     -25.024 -57.666  -3.627  1.00 64.46           C
ATOM   2025  OG  SER C  79     -25.760 -57.569  -4.834  1.00 67.99           O
ATOM   2026  N   GLY C  80     -23.618 -60.611  -3.490  1.00 64.83           N
ATOM   2027  CA  GLY C  80     -23.642 -62.010  -3.867  1.00 64.37           C
ATOM   2028  C   GLY C  80     -22.516 -62.389  -4.807  1.00 62.71           C
ATOM   2029  O   GLY C  80     -22.746 -62.634  -5.996  1.00 64.53           O
ATOM   2030  N   LEU C  81     -21.291 -62.430  -4.285  1.00 62.17           N
ATOM   2031  CA  LEU C  81     -20.128 -62.745  -5.100  1.00 63.81           C
ATOM   2032  C   LEU C  81     -20.244 -64.139  -5.710  1.00 67.58           C
ATOM   2033  O   LEU C  81     -20.970 -65.008  -5.220  1.00 71.13           O
ATOM   2034  CB  LEU C  81     -18.846 -62.668  -4.272  1.00 60.93           C
ATOM   2035  CG  LEU C  81     -18.026 -61.379  -4.302  1.00 62.36           C
ATOM   2036  CD1 LEU C  81     -16.690 -61.611  -3.616  1.00 57.85           C
ATOM   2037  CD2 LEU C  81     -17.823 -60.901  -5.730  1.00 64.45           C
ATOM   2038  N   LYS C  82     -19.508 -64.342  -6.798  1.00 60.14           N
ATOM   2039  CA  LYS C  82     -19.378 -65.658  -7.404  1.00 62.77           C
ATOM   2040  C   LYS C  82     -18.049 -65.715  -8.143  1.00 67.15           C
ATOM   2041  O   LYS C  82     -17.367 -64.702  -8.315  1.00 66.43           O
ATOM   2042  CB  LYS C  82     -20.558 -65.968  -8.330  1.00 65.73           C
ATOM   2043  CG  LYS C  82     -20.927 -64.841  -9.273  1.00 69.18           C
ATOM   2044  CD  LYS C  82     -22.225 -65.145 -10.006  1.00 70.55           C
ATOM   2045  CE  LYS C  82     -23.370 -65.372  -9.033  1.00 68.29           C
ATOM   2046  NZ  LYS C  82     -24.660 -65.611  -9.739  1.00 66.99           N
ATOM   2047  N   THR C  83     -17.684 -66.927  -8.572  1.00 71.88           N
ATOM   2048  CA  THR C  83     -16.366 -67.146  -9.163  1.00 73.11           C
ATOM   2049  C   THR C  83     -16.151 -66.303 -10.415  1.00 75.65           C
ATOM   2050  O   THR C  83     -15.023 -65.878 -10.688  1.00 75.99           O
ATOM   2051  CB  THR C  83     -16.178 -68.630  -9.485  1.00 76.60           C
ATOM   2052  OG1 THR C  83     -17.112 -69.025 -10.498  1.00 82.98           O
ATOM   2053  CG2 THR C  83     -16.404 -69.476  -8.241  1.00 72.80           C
ATOM   2054  N   GLU C  84     -17.214 -66.056 -11.185  1.00 72.59           N
ATOM   2055  CA  GLU C  84     -17.080 -65.286 -12.419  1.00 75.22           C
ATOM   2056  C   GLU C  84     -16.656 -63.846 -12.150  1.00 69.08           C
ATOM   2057  O   GLU C  84     -15.967 -63.239 -12.978  1.00 65.87           O
ATOM   2058  CB  GLU C  84     -18.392 -65.318 -13.208  1.00 72.36           C
ATOM   2059  CG  GLU C  84     -18.820 -66.705 -13.681  1.00 77.23           C
ATOM   2060  CD  GLU C  84     -19.416 -67.557 -12.575  1.00 87.66           C
ATOM   2061  OE1 GLU C  84     -19.401 -68.800 -12.707  1.00 92.68           O
ATOM   2062  OE2 GLU C  84     -19.891 -66.986 -11.571  1.00 83.21           O
ATOM   2063  N   ASP C  85     -17.053 -63.283 -11.007  1.00 62.53           N
ATOM   2064  CA  ASP C  85     -16.729 -61.895 -10.698  1.00 54.62           C
ATOM   2065  C   ASP C  85     -15.250 -61.680 -10.417  1.00 56.26           C
ATOM   2066  O   ASP C  85     -14.806 -60.526 -10.392  1.00 56.28           O
ATOM   2067  CB  ASP C  85     -17.546 -61.418  -9.499  1.00 55.15           C
ATOM   2068  CG  ASP C  85     -19.022 -61.687  -9.662  1.00 56.80           C
ATOM   2069  OD1 ASP C  85     -19.498 -61.696 -10.815  1.00 62.38           O
ATOM   2070  OD2 ASP C  85     -19.709 -61.886  -8.638  1.00 60.09           O
ATOM   2071  N   GLU C  86     -14.483 -62.747 -10.204  1.00 57.06           N
ATOM   2072  CA  GLU C  86     -13.057 -62.622  -9.935  1.00 59.60           C
```

[2143]

```
ATOM   2073  C   GLU C  86     -12.337 -62.008 -11.128  1.00 61.20           C
ATOM   2074  O   GLU C  86     -12.134 -62.673 -12.149  1.00 63.81           O
ATOM   2075  CB  GLU C  86     -12.459 -63.988  -9.595  1.00 61.60           C
ATOM   2076  CG  GLU C  86     -10.982 -63.952  -9.255  1.00 68.38           C
ATOM   2077  CD  GLU C  86     -10.492 -65.265  -8.684  1.00 73.33           C
ATOM   2078  OE1 GLU C  86     -11.271 -66.241  -8.688  1.00 73.50           O
ATOM   2079  OE2 GLU C  86      -9.328 -65.324  -8.235  1.00 74.86           O
ATOM   2080  N   ALA C  87     -11.948 -60.745 -11.003  1.00 55.15           N
ATOM   2081  CA  ALA C  87     -11.285 -60.013 -12.077  1.00 60.92           C
ATOM   2082  C   ALA C  87     -10.752 -58.710 -11.494  1.00 54.42           C
ATOM   2083  O   ALA C  87     -10.939 -58.413 -10.310  1.00 49.30           O
ATOM   2084  CB  ALA C  87     -12.233 -59.751 -13.249  1.00 57.89           C
ATOM   2085  N   ASP C  88     -10.087 -57.930 -12.340  1.00 51.72           N
ATOM   2086  CA  ASP C  88      -9.652 -56.593 -11.972  1.00 46.17           C
ATOM   2087  C   ASP C  88     -10.785 -55.608 -12.218  1.00 47.72           C
ATOM   2088  O   ASP C  88     -11.532 -55.731 -13.193  1.00 55.34           O
ATOM   2089  CB  ASP C  88      -8.420 -56.175 -12.776  1.00 49.38           C
ATOM   2090  CG  ASP C  88      -7.190 -56.978 -12.419  1.00 57.84           C
ATOM   2091  OD1 ASP C  88      -6.328 -57.169 -13.303  1.00 62.06           O
ATOM   2092  OD2 ASP C  88      -7.101 -57.449 -11.266  1.00 66.00           O
ATOM   2093  N   TYR C  89     -10.913 -54.630 -11.327  1.00 38.76           N
ATOM   2094  CA  TYR C  89     -11.959 -53.621 -11.424  1.00 40.80           C
ATOM   2095  C   TYR C  89     -11.309 -52.249 -11.389  1.00 46.40           C
ATOM   2096  O   TYR C  89     -10.627 -51.904 -10.418  1.00 45.85           O
ATOM   2097  CB  TYR C  89     -12.988 -53.774 -10.301  1.00 40.77           C
ATOM   2098  CG  TYR C  89     -13.881 -54.981 -10.476  1.00 49.75           C
ATOM   2099  CD1 TYR C  89     -13.468 -56.242 -10.066  1.00 56.53           C
ATOM   2100  CD2 TYR C  89     -15.137 -54.860 -11.058  1.00 51.37           C
ATOM   2101  CE1 TYR C  89     -14.281 -57.350 -10.229  1.00 53.45           C
ATOM   2102  CE2 TYR C  89     -15.957 -55.961 -11.225  1.00 51.30           C
ATOM   2103  CZ  TYR C  89     -15.524 -57.203 -10.809  1.00 53.60           C
ATOM   2104  OH  TYR C  89     -16.335 -58.301 -10.973  1.00 56.27           O
ATOM   2105  N   TYR C  90     -11.513 -51.477 -12.451  1.00 48.84           N
ATOM   2106  CA  TYR C  90     -10.976 -50.133 -12.574  1.00 43.98           C
ATOM   2107  C   TYR C  90     -12.117 -49.126 -12.561  1.00 43.00           C
ATOM   2108  O   TYR C  90     -13.173 -49.362 -13.155  1.00 41.15           O
ATOM   2109  CB  TYR C  90     -10.172 -49.974 -13.868  1.00 38.89           C
ATOM   2110  CG  TYR C  90      -8.955 -50.866 -13.981  1.00 35.54           C
ATOM   2111  CD1 TYR C  90      -9.075 -52.189 -14.381  1.00 39.04           C
ATOM   2112  CD2 TYR C  90      -7.682 -50.374 -13.721  1.00 36.92           C
ATOM   2113  CE1 TYR C  90      -7.966 -53.006 -14.497  1.00 39.72           C
ATOM   2114  CE2 TYR C  90      -6.566 -51.182 -13.836  1.00 39.45           C
ATOM   2115  CZ  TYR C  90      -6.714 -52.498 -14.225  1.00 41.83           C
ATOM   2116  OH  TYR C  90      -5.609 -53.311 -14.343  1.00 48.16           O
ATOM   2117  N   CYS C  91     -11.903 -48.013 -11.876  1.00 45.47           N
ATOM   2118  CA  CYS C  91     -12.788 -46.866 -11.984  1.00 45.55           C
ATOM   2119  C   CYS C  91     -12.174 -45.842 -12.926  1.00 37.67           C
ATOM   2120  O   CYS C  91     -10.960 -45.809 -13.142  1.00 34.75           O
ATOM   2121  CB  CYS C  91     -13.056 -46.238 -10.614  1.00 35.96           C
ATOM   2122  SG  CYS C  91     -11.593 -45.637  -9.753  1.00 54.23           S
ATOM   2123  N   GLN C  92     -13.033 -45.002 -13.495  1.00 32.85           N
ATOM   2124  CA  GLN C  92     -12.575 -44.019 -14.463  1.00 36.85           C
ATOM   2125  C   GLN C  92     -13.499 -42.814 -14.430  1.00 31.05           C
ATOM   2126  O   GLN C  92     -14.723 -42.962 -14.439  1.00 33.97           O
ATOM   2127  CB  GLN C  92     -12.520 -44.630 -15.869  1.00 39.76           C
ATOM   2128  CG  GLN C  92     -12.245 -43.646 -16.994  1.00 42.53           C
ATOM   2129  CD  GLN C  92     -13.473 -43.369 -17.842  1.00 41.95           C
ATOM   2130  OE1 GLN C  92     -14.605 -43.436 -17.361  1.00 37.89           O
ATOM   2131  NE2 GLN C  92     -13.255 -43.076 -19.118  1.00 41.80           N
ATOM   2132  N   THR C  93     -12.902 -41.630 -14.366  1.00 31.94           N
ATOM   2133  CA  THR C  93     -13.624 -40.375 -14.494  1.00 36.22           C
ATOM   2134  C   THR C  93     -12.738 -39.426 -15.292  1.00 32.12           C
ATOM   2135  O   THR C  93     -11.708 -39.827 -15.844  1.00 29.30           O
ATOM   2136  CB  THR C  93     -14.015 -39.818 -13.118  1.00 35.55           C
ATOM   2137  OG1 THR C  93     -14.792 -38.626 -13.285  1.00 34.41           O
ATOM   2138  CG2 THR C  93     -12.776 -39.507 -12.293  1.00 34.61           C
ATOM   2139  N   TYR C  94     -13.123 -38.156 -15.348  1.00 28.03           N
ATOM   2140  CA  TYR C  94     -12.458 -37.232 -16.251  1.00 35.16           C
```

[2144]

```
ATOM   2141  C   TYR C  94     -12.512 -35.820 -15.690  1.00 36.46           C
ATOM   2142  O   TYR C  94     -13.210 -35.534 -14.714  1.00 39.33           O
ATOM   2143  CB  TYR C  94     -13.093 -37.278 -17.645  1.00 33.07           C
ATOM   2144  CG  TYR C  94     -14.590 -37.061 -17.630  1.00 32.19           C
ATOM   2145  CD1 TYR C  94     -15.128 -35.788 -17.766  1.00 27.67           C
ATOM   2146  CD2 TYR C  94     -15.465 -38.129 -17.472  1.00 32.91           C
ATOM   2147  CE1 TYR C  94     -16.493 -35.585 -17.749  1.00 27.29           C
ATOM   2148  CE2 TYR C  94     -16.833 -37.935 -17.453  1.00 32.08           C
ATOM   2149  CZ  TYR C  94     -17.340 -36.660 -17.592  1.00 33.12           C
ATOM   2150  OH  TYR C  94     -18.700 -36.459 -17.576  1.00 38.08           O
ATOM   2151  N   ASP C  95     -11.752 -34.943 -16.327  1.00 37.60           N
ATOM   2152  CA  ASP C  95     -11.804 -33.502 -16.147  1.00 36.47           C
ATOM   2153  C   ASP C  95     -11.892 -32.892 -17.536  1.00 40.41           C
ATOM   2154  O   ASP C  95     -11.793 -33.606 -18.539  1.00 38.08           O
ATOM   2155  CB  ASP C  95     -10.566 -33.001 -15.380  1.00 31.79           C
ATOM   2156  CG  ASP C  95      -9.316 -32.987 -16.228  1.00 43.93           C
ATOM   2157  OD1 ASP C  95      -8.544 -32.010 -16.131  1.00 50.04           O
ATOM   2158  OD2 ASP C  95      -9.120 -33.929 -17.020  1.00 52.20           O
ATOM   2159  N   PRO C  96     -12.105 -31.564 -17.643  1.00 40.38           N
ATOM   2160  CA  PRO C  96     -12.251 -30.959 -18.979  1.00 40.21           C
ATOM   2161  C   PRO C  96     -11.057 -31.119 -19.915  1.00 38.43           C
ATOM   2162  O   PRO C  96     -11.100 -30.619 -21.042  1.00 38.31           O
ATOM   2163  CB  PRO C  96     -12.490 -29.477 -18.662  1.00 40.09           C
ATOM   2164  CG  PRO C  96     -13.100 -29.477 -17.319  1.00 41.06           C
ATOM   2165  CD  PRO C  96     -12.488 -30.620 -16.575  1.00 33.56           C
ATOM   2166  N   TYR C  97     -10.000 -31.811 -19.490  1.00 42.33           N
ATOM   2167  CA  TYR C  97      -8.785 -31.868 -20.296  1.00 40.98           C
ATOM   2168  C   TYR C  97      -8.246 -33.284 -20.451  1.00 45.00           C
ATOM   2169  O   TYR C  97      -7.659 -33.613 -21.486  1.00 53.25           O
ATOM   2170  CB  TYR C  97      -7.699 -30.974 -19.693  1.00 42.35           C
ATOM   2171  CG  TYR C  97      -8.193 -29.615 -19.252  1.00 52.03           C
ATOM   2172  CD1 TYR C  97      -8.401 -28.599 -20.176  1.00 48.79           C
ATOM   2173  CD2 TYR C  97      -8.449 -29.347 -17.914  1.00 45.09           C
ATOM   2174  CE1 TYR C  97      -8.851 -27.356 -19.780  1.00 48.17           C
ATOM   2175  CE2 TYR C  97      -8.900 -28.106 -17.509  1.00 43.69           C
ATOM   2176  CZ  TYR C  97      -9.099 -27.115 -18.446  1.00 45.76           C
ATOM   2177  OH  TYR C  97      -9.548 -25.877 -18.049  1.00 57.15           O
ATOM   2178  N   SER C  98      -8.427 -34.128 -19.439  1.00 37.93           N
ATOM   2179  CA  SER C  98      -7.841 -35.459 -19.453  1.00 33.56           C
ATOM   2180  C   SER C  98      -8.856 -36.482 -18.968  1.00 35.69           C
ATOM   2181  O   SER C  98      -9.936 -36.145 -18.476  1.00 32.89           O
ATOM   2182  CB  SER C  98      -6.575 -35.520 -18.589  1.00 41.59           C
ATOM   2183  OG  SER C  98      -6.866 -35.187 -17.242  1.00 41.54           O
ATOM   2184  N   VAL C  99      -8.491 -37.751 -19.128  1.00 39.10           N
ATOM   2185  CA  VAL C  99      -9.255 -38.885 -18.627  1.00 36.22           C
ATOM   2186  C   VAL C  99      -8.313 -39.721 -17.775  1.00 36.90           C
ATOM   2187  O   VAL C  99      -7.168 -39.964 -18.171  1.00 39.51           O
ATOM   2188  CB  VAL C  99      -9.852 -39.728 -19.771  1.00 36.10           C
ATOM   2189  CG1 VAL C  99     -10.634 -40.909 -19.218  1.00 40.24           C
ATOM   2190  CG2 VAL C  99     -10.732 -38.867 -20.657  1.00 35.11           C
ATOM   2191  N   VAL C 100      -8.778 -40.144 -16.603  1.00 36.88           N
ATOM   2192  CA  VAL C 100      -7.933 -40.848 -15.646  1.00 40.18           C
ATOM   2193  C   VAL C 100      -8.600 -42.158 -15.255  1.00 42.74           C
ATOM   2194  O   VAL C 100      -9.807 -42.193 -14.990  1.00 38.59           O
ATOM   2195  CB  VAL C 100      -7.650 -39.991 -14.397  1.00 44.75           C
ATOM   2196  CG1 VAL C 100      -6.798 -40.765 -13.399  1.00 38.48           C
ATOM   2197  CG2 VAL C 100      -6.961 -38.693 -14.793  1.00 41.64           C
ATOM   2198  N   PHE C 101      -7.815 -43.230 -15.235  1.00 46.65           N
ATOM   2199  CA  PHE C 101      -8.217 -44.509 -14.672  1.00 46.52           C
ATOM   2200  C   PHE C 101      -7.566 -44.687 -13.306  1.00 45.63           C
ATOM   2201  O   PHE C 101      -6.508 -44.118 -13.023  1.00 45.07           O
ATOM   2202  CB  PHE C 101      -7.820 -45.671 -15.587  1.00 40.45           C
ATOM   2203  CG  PHE C 101      -8.675 -45.800 -16.815  1.00 46.99           C
ATOM   2204  CD1 PHE C 101      -8.431 -45.020 -17.934  1.00 46.16           C
ATOM   2205  CD2 PHE C 101      -9.718 -46.712 -16.855  1.00 48.29           C
ATOM   2206  CE1 PHE C 101      -9.216 -45.141 -19.068  1.00 40.81           C
ATOM   2207  CE2 PHE C 101     -10.507 -46.838 -17.986  1.00 48.86           C
ATOM   2208  CZ  PHE C 101     -10.254 -46.051 -19.093  1.00 40.45           C
```

[2145]

```
ATOM   2209  N   GLY C 102      -8.208 -45.484 -12.458  1.00 43.98           N
ATOM   2210  CA  GLY C 102      -7.634 -45.798 -11.169  1.00 41.83           C
ATOM   2211  C   GLY C 102      -6.536 -46.838 -11.272  1.00 41.46           C
ATOM   2212  O   GLY C 102      -6.277 -47.412 -12.328  1.00 43.82           O
ATOM   2213  N   GLY C 103      -5.873 -47.075 -10.138  1.00 40.42           N
ATOM   2214  CA  GLY C 103      -4.830 -48.084 -10.093  1.00 33.44           C
ATOM   2215  C   GLY C 103      -5.336 -49.500 -10.265  1.00 33.70           C
ATOM   2216  O   GLY C 103      -4.548 -50.394 -10.591  1.00 36.07           O
ATOM   2217  N   GLY C 104      -6.631 -49.725 -10.055  1.00 31.64           N
ATOM   2218  CA  GLY C 104      -7.206 -51.046 -10.211  1.00 38.78           C
ATOM   2219  C   GLY C 104      -7.288 -51.824  -8.915  1.00 49.32           C
ATOM   2220  O   GLY C 104      -6.354 -51.801  -8.107  1.00 49.35           O
ATOM   2221  N   THR C 105      -8.403 -52.517  -8.703  1.00 42.42           N
ATOM   2222  CA  THR C 105      -8.605 -53.353  -7.529  1.00 43.02           C
ATOM   2223  C   THR C 105      -8.754 -54.799  -7.976  1.00 50.56           C
ATOM   2224  O   THR C 105      -9.607 -55.107  -8.816  1.00 40.27           O
ATOM   2225  CB  THR C 105      -9.840 -52.915  -6.735  1.00 48.08           C
ATOM   2226  OG1 THR C 105      -9.616 -51.615  -6.176  1.00 48.01           O
ATOM   2227  CG2 THR C 105     -10.127 -53.900  -5.609  1.00 42.78           C
ATOM   2228  N   LYS C 106      -7.934 -55.680  -7.410  1.00 53.74           N
ATOM   2229  CA  LYS C 106      -7.938 -57.093  -7.769  1.00 51.18           C
ATOM   2230  C   LYS C 106      -8.897 -57.825  -6.839  1.00 43.25           C
ATOM   2231  O   LYS C 106      -8.591 -58.038  -5.662  1.00 53.94           O
ATOM   2232  CB  LYS C 106      -6.530 -57.677  -7.687  1.00 52.27           C
ATOM   2233  CG  LYS C 106      -5.527 -56.989  -8.599  1.00 53.40           C
ATOM   2234  CD  LYS C 106      -4.121 -57.513  -8.376  1.00 49.06           C
ATOM   2235  CE  LYS C 106      -4.060 -59.020  -8.559  1.00 59.19           C
ATOM   2236  NZ  LYS C 106      -4.533 -59.444  -9.906  1.00 72.59           N
ATOM   2237  N   LEU C 107     -10.058 -58.204  -7.364  1.00 41.68           N
ATOM   2238  CA  LEU C 107     -11.064 -58.916  -6.588  1.00 51.49           C
ATOM   2239  C   LEU C 107     -10.830 -60.414  -6.747  1.00 54.40           C
ATOM   2240  O   LEU C 107     -10.840 -60.934  -7.868  1.00 54.83           O
ATOM   2241  CB  LEU C 107     -12.472 -58.516  -7.037  1.00 45.38           C
ATOM   2242  CG  LEU C 107     -13.715 -59.155  -6.403  1.00 49.33           C
ATOM   2243  CD1 LEU C 107     -14.109 -60.467  -7.074  1.00 50.22           C
ATOM   2244  CD2 LEU C 107     -13.521 -59.352  -4.902  1.00 54.16           C
ATOM   2245  N   THR C 108     -10.617 -61.101  -5.628  1.00 62.50           N
ATOM   2246  CA  THR C 108     -10.350 -62.535  -5.612  1.00 63.78           C
ATOM   2247  C   THR C 108     -11.474 -63.239  -4.868  1.00 61.66           C
ATOM   2248  O   THR C 108     -11.758 -62.912  -3.711  1.00 64.84           O
ATOM   2249  CB  THR C 108      -9.001 -62.839  -4.953  1.00 66.82           C
ATOM   2250  OG1 THR C 108      -7.940 -62.327  -5.768  1.00 67.34           O
ATOM   2251  CG2 THR C 108      -8.821 -64.340  -4.774  1.00 64.73           C
ATOM   2252  N   ALA C 109     -12.115 -64.195  -5.535  1.00 62.90           N
ATOM   2253  CA  ALA C 109     -13.150 -65.014  -4.920  1.00 69.78           C
ATOM   2254  C   ALA C 109     -12.493 -66.242  -4.302  1.00 76.95           C
ATOM   2255  O   ALA C 109     -11.836 -67.019  -5.004  1.00 79.74           O
ATOM   2256  CB  ALA C 109     -14.208 -65.420  -5.945  1.00 64.47           C
ATOM   2257  N   LEU C 110     -12.663 -66.408  -2.992  1.00 74.15           N
ATOM   2258  CA  LEU C 110     -11.991 -67.480  -2.267  1.00 73.94           C
ATOM   2259  C   LEU C 110     -12.503 -68.836  -2.741  1.00 80.17           C
ATOM   2260  O   LEU C 110     -13.706 -69.112  -2.677  1.00 82.91           O
ATOM   2261  CB  LEU C 110     -12.214 -67.317  -0.766  1.00 72.77           C
ATOM   2262  CG  LEU C 110     -11.440 -66.186  -0.082  1.00 68.57           C
ATOM   2263  CD1 LEU C 110     -11.755 -66.142   1.405  1.00 53.21           C
ATOM   2264  CD2 LEU C 110      -9.944 -66.329  -0.314  1.00 67.66           C
ATOM   2265  N   ALA C 111     -11.589 -69.676  -3.219  1.00 76.18           N
ATOM   2266  CA  ALA C 111     -11.942 -70.990  -3.746  1.00 77.68           C
ATOM   2267  C   ALA C 111     -12.533 -71.885  -2.663  1.00 84.33           C
ATOM   2268  O   ALA C 111     -13.063 -72.958  -2.954  1.00 92.35           O
ATOM   2269  CB  ALA C 111     -10.722 -71.652  -4.370  1.00 70.81           C
ATOM   2270  N   GLU C 131     -24.412 -53.925 -33.557  1.00 62.31           N
ATOM   2271  CA  GLU C 131     -23.405 -54.085 -32.516  1.00 58.51           C
ATOM   2272  C   GLU C 131     -22.126 -53.303 -32.798  1.00 55.11           C
ATOM   2273  O   GLU C 131     -21.639 -53.268 -33.928  1.00 55.37           O
ATOM   2274  CB  GLU C 131     -23.048 -55.558 -32.355  1.00 62.60           C
ATOM   2275  CG  GLU C 131     -22.158 -55.821 -31.159  1.00 58.56           C
ATOM   2276  CD  GLU C 131     -22.541 -57.071 -30.383  1.00 57.71           C
```

[2146]

```
ATOM   2277  OE1 GLU C 131     -23.605 -57.661 -30.666  1.00 66.72           O
ATOM   2278  OE2 GLU C 131     -21.769 -57.466 -29.488  1.00 58.04           O
ATOM   2279  N   VAL C 132     -21.574 -52.704 -31.746  1.00 52.86           N
ATOM   2280  CA  VAL C 132     -20.340 -51.933 -31.857  1.00 54.48           C
ATOM   2281  C   VAL C 132     -19.171 -52.904 -31.948  1.00 50.17           C
ATOM   2282  O   VAL C 132     -19.096 -53.876 -31.187  1.00 53.76           O
ATOM   2283  CB  VAL C 132     -20.185 -50.971 -30.668  1.00 53.43           C
ATOM   2284  CG1 VAL C 132     -18.847 -50.246 -30.733  1.00 44.64           C
ATOM   2285  CG2 VAL C 132     -21.329 -49.967 -30.646  1.00 45.75           C
ATOM   2286  N   GLN C 133     -18.256 -52.646 -32.878  1.00 54.79           N
ATOM   2287  CA  GLN C 133     -17.115 -53.525 -33.091  1.00 57.49           C
ATOM   2288  C   GLN C 133     -15.884 -52.678 -33.369  1.00 53.30           C
ATOM   2289  O   GLN C 133     -15.892 -51.849 -34.284  1.00 50.04           O
ATOM   2290  CB  GLN C 133     -17.378 -54.488 -34.255  1.00 63.08           C
ATOM   2291  CG  GLN C 133     -16.349 -55.595 -34.417  1.00 62.90           C
ATOM   2292  CD  GLN C 133     -16.622 -56.792 -33.526  1.00 70.48           C
ATOM   2293  OE1 GLN C 133     -16.923 -56.647 -32.340  1.00 73.38           O
ATOM   2294  NE2 GLN C 133     -16.523 -57.987 -34.098  1.00 71.57           N
ATOM   2295  N   LEU C 134     -14.828 -52.895 -32.588  1.00 56.46           N
ATOM   2296  CA  LEU C 134     -13.589 -52.138 -32.702  1.00 53.91           C
ATOM   2297  C   LEU C 134     -12.428 -53.098 -32.914  1.00 56.39           C
ATOM   2298  O   LEU C 134     -12.247 -54.041 -32.136  1.00 59.79           O
ATOM   2299  CB  LEU C 134     -13.351 -51.282 -31.455  1.00 49.69           C
ATOM   2300  CG  LEU C 134     -14.432 -50.245 -31.142  1.00 51.97           C
ATOM   2301  CD1 LEU C 134     -14.031 -49.390 -29.951  1.00 44.39           C
ATOM   2302  CD2 LEU C 134     -14.717 -49.379 -32.361  1.00 46.14           C
ATOM   2303  N   LEU C 135     -11.641 -52.848 -33.957  1.00 51.66           N
ATOM   2304  CA  LEU C 135     -10.494 -53.674 -34.308  1.00 48.22           C
ATOM   2305  C   LEU C 135      -9.247 -52.806 -34.348  1.00 52.20           C
ATOM   2306  O   LEU C 135      -9.232 -51.771 -35.021  1.00 59.44           O
ATOM   2307  CB  LEU C 135     -10.695 -54.351 -35.668  1.00 55.92           C
ATOM   2308  CG  LEU C 135     -11.506 -55.646 -35.750  1.00 59.56           C
ATOM   2309  CD1 LEU C 135     -10.978 -56.672 -34.766  1.00 67.49           C
ATOM   2310  CD2 LEU C 135     -12.985 -55.386 -35.522  1.00 57.80           C
ATOM   2311  N   GLU C 136      -8.205 -53.228 -33.640  1.00 47.18           N
ATOM   2312  CA  GLU C 136      -6.937 -52.516 -33.637  1.00 45.82           C
ATOM   2313  C   GLU C 136      -5.919 -53.256 -34.494  1.00 50.25           C
ATOM   2314  O   GLU C 136      -5.990 -54.476 -34.663  1.00 49.22           O
ATOM   2315  CB  GLU C 136      -6.386 -52.355 -32.218  1.00 51.27           C
ATOM   2316  CG  GLU C 136      -7.253 -51.534 -31.280  1.00 50.75           C
ATOM   2317  CD  GLU C 136      -8.279 -52.373 -30.544  1.00 53.57           C
ATOM   2318  OE1 GLU C 136      -8.720 -53.404 -31.095  1.00 52.04           O
ATOM   2319  OE2 GLU C 136      -8.634 -52.005 -29.405  1.00 47.90           O
ATOM   2320  N   SER C 137      -4.965 -52.502 -35.033  1.00 48.97           N
ATOM   2321  CA  SER C 137      -3.906 -53.074 -35.850  1.00 49.70           C
ATOM   2322  C   SER C 137      -2.736 -52.104 -35.876  1.00 50.07           C
ATOM   2323  O   SER C 137      -2.871 -50.930 -35.519  1.00 44.93           O
ATOM   2324  CB  SER C 137      -4.391 -53.378 -37.272  1.00 59.03           C
ATOM   2325  OG  SER C 137      -4.893 -52.211 -37.902  1.00 59.68           O
ATOM   2326  N   GLY C 138      -1.583 -52.611 -36.307  1.00 51.20           N
ATOM   2327  CA  GLY C 138      -0.381 -51.813 -36.434  1.00 53.21           C
ATOM   2328  C   GLY C 138       0.678 -52.085 -35.389  1.00 62.41           C
ATOM   2329  O   GLY C 138       1.818 -51.634 -35.559  1.00 68.25           O
ATOM   2330  N   GLY C 139       0.349 -52.803 -34.317  1.00 64.64           N
ATOM   2331  CA  GLY C 139       1.325 -53.063 -33.281  1.00 69.47           C
ATOM   2332  C   GLY C 139       2.365 -54.086 -33.695  1.00 73.78           C
ATOM   2333  O   GLY C 139       2.189 -54.862 -34.635  1.00 68.61           O
ATOM   2334  N   GLY C 140       3.476 -54.079 -32.964  1.00 73.67           N
ATOM   2335  CA  GLY C 140       4.558 -55.009 -33.247  1.00 72.98           C
ATOM   2336  C   GLY C 140       5.812 -54.642 -32.482  1.00 76.40           C
ATOM   2337  O   GLY C 140       5.747 -54.088 -31.379  1.00 75.86           O
ATOM   2338  N   LEU C 141       6.954 -54.963 -33.083  1.00 76.59           N
ATOM   2339  CA  LEU C 141       8.259 -54.666 -32.509  1.00 72.49           C
ATOM   2340  C   LEU C 141       8.866 -53.454 -33.205  1.00 73.56           C
ATOM   2341  O   LEU C 141       8.707 -53.277 -34.416  1.00 74.33           O
ATOM   2342  CB  LEU C 141       9.198 -55.868 -32.633  1.00 66.99           C
ATOM   2343  N   VAL C 142       9.564 -52.621 -32.431  1.00 74.39           N
ATOM   2344  CA  VAL C 142      10.187 -51.409 -32.950  1.00 74.88           C
```

[2147]

```
ATOM   2345  C   VAL C 142      11.375 -51.061 -32.062  1.00 75.25           C
ATOM   2346  O   VAL C 142      11.462 -51.489 -30.910  1.00 75.23           O
ATOM   2347  CB  VAL C 142       9.181 -50.233 -33.019  1.00 74.82           C
ATOM   2348  CG1 VAL C 142       8.918 -49.669 -31.629  1.00 74.72           C
ATOM   2349  CG2 VAL C 142       9.666 -49.149 -33.978  1.00 69.18           C
ATOM   2350  N   GLN C 143      12.321 -50.277 -32.624  1.00 73.35           N
ATOM   2351  CA  GLN C 143      13.520 -49.878 -31.904  1.00 72.04           C
ATOM   2352  C   GLN C 143      13.259 -48.629 -31.068  1.00 69.05           C
ATOM   2353  O   GLN C 143      12.384 -47.823 -31.403  1.00 70.03           O
ATOM   2354  CB  GLN C 143      14.662 -49.608 -32.882  1.00 76.36           C
ATOM   2355  N   PRO C 144      13.993 -48.458 -29.968  1.00 70.79           N
ATOM   2356  CA  PRO C 144      13.847 -47.237 -29.158  1.00 69.02           C
ATOM   2357  C   PRO C 144      14.145 -45.992 -29.979  1.00 72.42           C
ATOM   2358  O   PRO C 144      15.260 -45.800 -30.470  1.00 73.13           O
ATOM   2359  CB  PRO C 144      14.869 -47.438 -28.034  1.00 68.47           C
ATOM   2360  CG  PRO C 144      15.016 -48.918 -27.925  1.00 73.07           C
ATOM   2361  CD  PRO C 144      14.885 -49.441 -29.328  1.00 76.01           C
ATOM   2362  N   GLY C 145      13.135 -45.138 -30.117  1.00 67.77           N
ATOM   2363  CA  GLY C 145      13.225 -43.954 -30.941  1.00 57.98           C
ATOM   2364  C   GLY C 145      12.493 -44.051 -32.261  1.00 64.26           C
ATOM   2365  O   GLY C 145      12.287 -43.020 -32.914  1.00 64.89           O
ATOM   2366  N   GLY C 146      12.089 -45.250 -32.667  1.00 70.75           N
ATOM   2367  CA  GLY C 146      11.380 -45.432 -33.914  1.00 67.29           C
ATOM   2368  C   GLY C 146       9.953 -44.926 -33.833  1.00 66.37           C
ATOM   2369  O   GLY C 146       9.478 -44.440 -32.807  1.00 65.26           O
ATOM   2370  N   SER C 147       9.256 -45.040 -34.960  1.00 67.80           N
ATOM   2371  CA  SER C 147       7.880 -44.588 -35.080  1.00 65.52           C
ATOM   2372  C   SER C 147       6.970 -45.759 -35.429  1.00 69.79           C
ATOM   2373  O   SER C 147       7.420 -46.803 -35.911  1.00 73.47           O
ATOM   2374  CB  SER C 147       7.750 -43.487 -36.141  1.00 67.23           C
ATOM   2375  OG  SER C 147       6.404 -43.069 -36.286  1.00 70.18           O
ATOM   2376  N   LEU C 148       5.676 -45.566 -35.184  1.00 67.13           N
ATOM   2377  CA  LEU C 148       4.666 -46.590 -35.416  1.00 64.63           C
ATOM   2378  C   LEU C 148       3.293 -45.941 -35.320  1.00 65.77           C
ATOM   2379  O   LEU C 148       3.098 -44.993 -34.554  1.00 66.92           O
ATOM   2380  CB  LEU C 148       4.789 -47.742 -34.410  1.00 61.36           C
ATOM   2381  CG  LEU C 148       3.930 -48.977 -34.684  1.00 66.16           C
ATOM   2382  CD1 LEU C 148       4.219 -49.519 -36.074  1.00 70.35           C
ATOM   2383  CD2 LEU C 148       4.166 -50.046 -33.627  1.00 67.54           C
ATOM   2384  N   ARG C 149       2.348 -46.457 -36.104  1.00 64.30           N
ATOM   2385  CA  ARG C 149       0.993 -45.924 -36.141  1.00 63.63           C
ATOM   2386  C   ARG C 149      -0.009 -47.060 -36.009  1.00 59.72           C
ATOM   2387  O   ARG C 149       0.094 -48.069 -36.715  1.00 55.83           O
ATOM   2388  CB  ARG C 149       0.736 -45.149 -37.438  1.00 57.57           C
ATOM   2389  CG  ARG C 149      -0.633 -44.488 -37.500  1.00 57.00           C
ATOM   2390  CD  ARG C 149      -0.925 -43.904 -38.876  1.00 62.94           C
ATOM   2391  NE  ARG C 149       0.099 -42.959 -39.311  1.00 69.99           N
ATOM   2392  CZ  ARG C 149       1.038 -43.237 -40.210  1.00 78.91           C
ATOM   2393  NH1 ARG C 149       1.932 -42.317 -40.546  1.00 81.27           N
ATOM   2394  NH2 ARG C 149       1.082 -44.436 -40.777  1.00 77.66           N
ATOM   2395  N   LEU C 150      -0.974 -46.893 -35.110  1.00 52.44           N
ATOM   2396  CA  LEU C 150      -2.072 -47.835 -34.959  1.00 54.48           C
ATOM   2397  C   LEU C 150      -3.301 -47.347 -35.714  1.00 49.64           C
ATOM   2398  O   LEU C 150      -3.485 -46.152 -35.954  1.00 45.44           O
ATOM   2399  CB  LEU C 150      -2.441 -48.046 -33.487  1.00 51.06           C
ATOM   2400  CG  LEU C 150      -1.448 -48.644 -32.490  1.00 54.01           C
ATOM   2401  CD1 LEU C 150      -0.361 -49.468 -33.174  1.00 59.50           C
ATOM   2402  CD2 LEU C 150      -0.860 -47.544 -31.640  1.00 60.49           C
ATOM   2403  N   SER C 151      -4.148 -48.301 -36.084  1.00 41.05           N
ATOM   2404  CA  SER C 151      -5.419 -48.016 -36.725  1.00 46.29           C
ATOM   2405  C   SER C 151      -6.522 -48.700 -35.934  1.00 50.49           C
ATOM   2406  O   SER C 151      -6.289 -49.708 -35.262  1.00 55.68           O
ATOM   2407  CB  SER C 151      -5.440 -48.498 -38.182  1.00 59.50           C
ATOM   2408  OG  SER C 151      -4.386 -47.917 -38.929  1.00 65.39           O
ATOM   2409  N   CYS C 152      -7.728 -48.145 -36.016  1.00 45.81           N
ATOM   2410  CA  CYS C 152      -8.889 -48.712 -35.336  1.00 51.24           C
ATOM   2411  C   CYS C 152     -10.051 -48.744 -36.318  1.00 53.68           C
ATOM   2412  O   CYS C 152     -10.602 -47.696 -36.670  1.00 52.60           O
```

[2148]

```
ATOM   2413  CB  CYS C 152      -9.246 -47.916 -34.079  1.00 52.75           C
ATOM   2414  SG  CYS C 152     -10.756 -48.476 -33.248  1.00 58.20           S
ATOM   2415  N   ALA C 153     -10.418 -49.945 -36.757  1.00 56.32           N
ATOM   2416  CA  ALA C 153     -11.535 -50.128 -37.676  1.00 51.15           C
ATOM   2417  C   ALA C 153     -12.831 -50.139 -36.877  1.00 52.31           C
ATOM   2418  O   ALA C 153     -13.089 -51.071 -36.108  1.00 47.70           O
ATOM   2419  CB  ALA C 153     -11.365 -51.419 -38.472  1.00 51.29           C
ATOM   2420  N   ALA C 154     -13.647 -49.107 -37.054  1.00 49.33           N
ATOM   2421  CA  ALA C 154     -14.916 -48.988 -36.356  1.00 47.37           C
ATOM   2422  C   ALA C 154     -16.055 -49.424 -37.266  1.00 46.06           C
ATOM   2423  O   ALA C 154     -16.055 -49.131 -38.465  1.00 50.29           O
ATOM   2424  CB  ALA C 154     -15.149 -47.554 -35.881  1.00 48.19           C
ATOM   2425  N   SER C 155     -17.023 -50.129 -36.687  1.00 42.30           N
ATOM   2426  CA  SER C 155     -18.183 -50.594 -37.429  1.00 40.18           C
ATOM   2427  C   SER C 155     -19.321 -50.824 -36.449  1.00 46.14           C
ATOM   2428  O   SER C 155     -19.094 -51.157 -35.283  1.00 56.59           O
ATOM   2429  CB  SER C 155     -17.880 -51.878 -38.209  1.00 49.54           C
ATOM   2430  OG  SER C 155     -17.794 -52.995 -37.340  1.00 57.15           O
ATOM   2431  N   GLY C 156     -20.546 -50.638 -36.934  1.00 44.13           N
ATOM   2432  CA  GLY C 156     -21.729 -50.875 -36.138  1.00 39.14           C
ATOM   2433  C   GLY C 156     -22.350 -49.644 -35.518  1.00 39.67           C
ATOM   2434  O   GLY C 156     -23.332 -49.778 -34.778  1.00 41.24           O
ATOM   2435  N   PHE C 157     -21.822 -48.455 -35.798  1.00 38.06           N
ATOM   2436  CA  PHE C 157     -22.347 -47.233 -35.206  1.00 35.54           C
ATOM   2437  C   PHE C 157     -21.886 -46.041 -36.032  1.00 45.12           C
ATOM   2438  O   PHE C 157     -20.936 -46.133 -36.815  1.00 42.65           O
ATOM   2439  CB  PHE C 157     -21.897 -47.081 -33.748  1.00 41.64           C
ATOM   2440  CG  PHE C 157     -20.409 -46.925 -33.583  1.00 40.45           C
ATOM   2441  CD1 PHE C 157     -19.580 -48.034 -33.565  1.00 41.14           C
ATOM   2442  CD2 PHE C 157     -19.843 -45.670 -33.433  1.00 36.04           C
ATOM   2443  CE1 PHE C 157     -18.214 -47.894 -33.413  1.00 44.56           C
ATOM   2444  CE2 PHE C 157     -18.480 -45.523 -33.279  1.00 41.17           C
ATOM   2445  CZ  PHE C 157     -17.663 -46.637 -33.269  1.00 45.31           C
ATOM   2446  N   GLY C 158     -22.573 -44.916 -35.841  1.00 41.18           N
ATOM   2447  CA  GLY C 158     -22.183 -43.672 -36.476  1.00 37.00           C
ATOM   2448  C   GLY C 158     -20.862 -43.157 -35.948  1.00 36.06           C
ATOM   2449  O   GLY C 158     -20.825 -42.441 -34.943  1.00 45.27           O
ATOM   2450  N   PHE C 159     -19.771 -43.509 -36.633  1.00 36.96           N
ATOM   2451  CA  PHE C 159     -18.432 -43.242 -36.113  1.00 39.81           C
ATOM   2452  C   PHE C 159     -18.189 -41.753 -35.895  1.00 42.31           C
ATOM   2453  O   PHE C 159     -17.541 -41.362 -34.917  1.00 44.44           O
ATOM   2454  CB  PHE C 159     -17.385 -43.823 -37.063  1.00 36.47           C
ATOM   2455  CG  PHE C 159     -15.972 -43.458 -36.707  1.00 40.57           C
ATOM   2456  CD1 PHE C 159     -15.330 -44.071 -35.645  1.00 43.40           C
ATOM   2457  CD2 PHE C 159     -15.283 -42.507 -37.442  1.00 38.22           C
ATOM   2458  CE1 PHE C 159     -14.029 -43.741 -35.320  1.00 42.69           C
ATOM   2459  CE2 PHE C 159     -13.984 -42.173 -37.122  1.00 38.76           C
ATOM   2460  CZ  PHE C 159     -13.355 -42.791 -36.061  1.00 43.62           C
ATOM   2461  N   SER C 160     -18.700 -40.907 -36.790  1.00 45.96           N
ATOM   2462  CA  SER C 160     -18.457 -39.472 -36.686  1.00 49.44           C
ATOM   2463  C   SER C 160     -19.144 -38.833 -35.487  1.00 45.54           C
ATOM   2464  O   SER C 160     -18.809 -37.694 -35.141  1.00 45.59           O
ATOM   2465  CB  SER C 160     -18.911 -38.766 -37.966  1.00 44.53           C
ATOM   2466  OG  SER C 160     -20.322 -38.622 -37.995  1.00 37.80           O
ATOM   2467  N   SER C 161     -20.087 -39.525 -34.850  1.00 45.95           N
ATOM   2468  CA  SER C 161     -20.868 -38.966 -33.755  1.00 48.46           C
ATOM   2469  C   SER C 161     -20.347 -39.361 -32.379  1.00 44.58           C
ATOM   2470  O   SER C 161     -21.018 -39.094 -31.376  1.00 38.79           O
ATOM   2471  CB  SER C 161     -22.333 -39.381 -33.893  1.00 42.19           C
ATOM   2472  OG  SER C 161     -22.976 -38.613 -34.892  1.00 48.51           O
ATOM   2473  N   TYR C 162     -19.173 -39.981 -32.300  1.00 44.37           N
ATOM   2474  CA  TYR C 162     -18.654 -40.489 -31.038  1.00 46.04           C
ATOM   2475  C   TYR C 162     -17.202 -40.080 -30.857  1.00 40.28           C
ATOM   2476  O   TYR C 162     -16.384 -40.247 -31.767  1.00 40.66           O
ATOM   2477  CB  TYR C 162     -18.786 -42.012 -30.957  1.00 38.85           C
ATOM   2478  CG  TYR C 162     -20.196 -42.468 -30.685  1.00 41.36           C
ATOM   2479  CD1 TYR C 162     -20.666 -42.582 -29.385  1.00 39.76           C
ATOM   2480  CD2 TYR C 162     -21.062 -42.775 -31.725  1.00 43.36           C
```

[2149]

```
ATOM   2481  CE1 TYR C 162     -21.955 -42.992 -29.125  1.00 41.00           C
ATOM   2482  CE2 TYR C 162     -22.356 -43.189 -31.474  1.00 44.77           C
ATOM   2483  CZ  TYR C 162     -22.796 -43.296 -30.171  1.00 39.30           C
ATOM   2484  OH  TYR C 162     -24.083 -43.708 -29.909  1.00 41.67           O
ATOM   2485  N   ALA C 163     -16.892 -39.541 -29.683  1.00 38.61           N
ATOM   2486  CA  ALA C 163     -15.506 -39.286 -29.328  1.00 39.08           C
ATOM   2487  C   ALA C 163     -14.793 -40.604 -29.057  1.00 41.60           C
ATOM   2488  O   ALA C 163     -15.362 -41.528 -28.469  1.00 40.85           O
ATOM   2489  CB  ALA C 163     -15.428 -38.379 -28.101  1.00 31.55           C
ATOM   2490  N   MET C 164     -13.546 -40.694 -29.504  1.00 43.11           N
ATOM   2491  CA  MET C 164     -12.747 -41.898 -29.351  1.00 42.19           C
ATOM   2492  C   MET C 164     -11.542 -41.602 -28.470  1.00 40.69           C
ATOM   2493  O   MET C 164     -11.195 -40.444 -28.223  1.00 40.48           O
ATOM   2494  CB  MET C 164     -12.291 -42.443 -30.710  1.00 41.53           C
ATOM   2495  CG  MET C 164     -13.427 -42.679 -31.688  1.00 40.11           C
ATOM   2496  SD  MET C 164     -14.491 -44.048 -31.195  1.00 40.87           S
ATOM   2497  CE  MET C 164     -13.370 -45.430 -31.383  1.00 35.43           C
ATOM   2498  N   SER C 165     -10.905 -42.668 -27.995  1.00 35.50           N
ATOM   2499  CA  SER C 165      -9.769 -42.518 -27.101  1.00 42.51           C
ATOM   2500  C   SER C 165      -8.911 -43.773 -27.157  1.00 48.39           C
ATOM   2501  O   SER C 165      -9.377 -44.853 -27.533  1.00 45.06           O
ATOM   2502  CB  SER C 165     -10.228 -42.235 -25.665  1.00 43.00           C
ATOM   2503  OG  SER C 165     -11.120 -43.235 -25.204  1.00 46.96           O
ATOM   2504  N   TRP C 166      -7.645 -43.609 -26.786  1.00 46.43           N
ATOM   2505  CA  TRP C 166      -6.699 -44.709 -26.671  1.00 43.61           C
ATOM   2506  C   TRP C 166      -6.373 -44.935 -25.202  1.00 46.73           C
ATOM   2507  O   TRP C 166      -6.086 -43.981 -24.471  1.00 43.46           O
ATOM   2508  CB  TRP C 166      -5.415 -44.430 -27.455  1.00 44.60           C
ATOM   2509  CG  TRP C 166      -5.584 -44.518 -28.934  1.00 52.09           C
ATOM   2510  CD1 TRP C 166      -5.756 -43.481 -29.802  1.00 49.83           C
ATOM   2511  CD2 TRP C 166      -5.610 -45.713 -29.725  1.00 50.83           C
ATOM   2512  NE1 TRP C 166      -5.880 -43.955 -31.084  1.00 45.15           N
ATOM   2513  CE2 TRP C 166      -5.795 -45.322 -31.065  1.00 48.76           C
ATOM   2514  CE3 TRP C 166      -5.492 -47.075 -29.430  1.00 45.81           C
ATOM   2515  CZ2 TRP C 166      -5.864 -46.244 -32.110  1.00 47.93           C
ATOM   2516  CZ3 TRP C 166      -5.563 -47.988 -30.467  1.00 47.27           C
ATOM   2517  CH2 TRP C 166      -5.747 -47.568 -31.791  1.00 49.88           C
ATOM   2518  N   VAL C 167      -6.421 -46.195 -24.777  1.00 49.24           N
ATOM   2519  CA  VAL C 167      -6.102 -46.589 -23.411  1.00 43.18           C
ATOM   2520  C   VAL C 167      -5.089 -47.721 -23.477  1.00 46.24           C
ATOM   2521  O   VAL C 167      -5.309 -48.717 -24.176  1.00 51.84           O
ATOM   2522  CB  VAL C 167      -7.355 -47.024 -22.627  1.00 41.96           C
ATOM   2523  CG1 VAL C 167      -6.975 -47.454 -21.222  1.00 47.24           C
ATOM   2524  CG2 VAL C 167      -8.376 -45.896 -22.587  1.00 43.95           C
ATOM   2525  N   ARG C 168      -3.989 -47.573 -22.750  1.00 43.28           N
ATOM   2526  CA  ARG C 168      -2.905 -48.541 -22.746  1.00 46.06           C
ATOM   2527  C   ARG C 168      -2.889 -49.311 -21.432  1.00 45.98           C
ATOM   2528  O   ARG C 168      -3.491 -48.904 -20.435  1.00 46.04           O
ATOM   2529  CB  ARG C 168      -1.557 -47.840 -22.937  1.00 44.13           C
ATOM   2530  CG  ARG C 168      -1.036 -47.247 -21.641  1.00 48.57           C
ATOM   2531  CD  ARG C 168      -0.028 -46.137 -21.842  1.00 46.93           C
ATOM   2532  NE  ARG C 168       0.873 -46.359 -22.962  1.00 45.57           N
ATOM   2533  CZ  ARG C 168       1.968 -45.638 -23.173  1.00 53.38           C
ATOM   2534  NH1 ARG C 168       2.292 -44.664 -22.333  1.00 38.59           N
ATOM   2535  NH2 ARG C 168       2.738 -45.890 -24.219  1.00 62.96           N
ATOM   2536  N   GLN C 169      -2.186 -50.440 -21.445  1.00 47.79           N
ATOM   2537  CA  GLN C 169      -1.953 -51.224 -20.234  1.00 45.93           C
ATOM   2538  C   GLN C 169      -0.549 -51.806 -20.350  1.00 52.96           C
ATOM   2539  O   GLN C 169      -0.326 -52.762 -21.100  1.00 55.83           O
ATOM   2540  CB  GLN C 169      -2.999 -52.316 -20.054  1.00 52.07           C
ATOM   2541  CG  GLN C 169      -2.766 -53.180 -18.827  1.00 60.21           C
ATOM   2542  CD  GLN C 169      -3.789 -54.288 -18.685  1.00 61.25           C
ATOM   2543  OE1 GLN C 169      -4.347 -54.766 -19.673  1.00 61.79           O
ATOM   2544  NE2 GLN C 169      -4.045 -54.700 -17.449  1.00 62.61           N
ATOM   2545  N   ALA C 170       0.391 -51.220 -19.616  1.00 55.14           N
ATOM   2546  CA  ALA C 170       1.747 -51.734 -19.594  1.00 59.56           C
ATOM   2547  C   ALA C 170       1.786 -53.091 -18.892  1.00 65.55           C
ATOM   2548  O   ALA C 170       0.976 -53.362 -18.000  1.00 66.31           O
```

[2150]

```
ATOM   2549  CB  ALA C 170       2.679 -50.753 -18.888  1.00 65.58           C
ATOM   2550  N   PRO C 171       2.707 -53.969 -19.289  1.00 70.24           N
ATOM   2551  CA  PRO C 171       2.820 -55.268 -18.613  1.00 71.29           C
ATOM   2552  C   PRO C 171       3.188 -55.083 -17.149  1.00 63.92           C
ATOM   2553  O   PRO C 171       4.172 -54.420 -16.817  1.00 64.17           O
ATOM   2554  CB  PRO C 171       3.928 -55.990 -19.390  1.00 71.08           C
ATOM   2555  CG  PRO C 171       4.573 -54.969 -20.255  1.00 67.60           C
ATOM   2556  CD  PRO C 171       3.631 -53.831 -20.426  1.00 62.45           C
ATOM   2557  N   GLY C 172       2.383 -55.679 -16.271  1.00 71.20           N
ATOM   2558  CA  GLY C 172       2.570 -55.535 -14.843  1.00 65.10           C
ATOM   2559  C   GLY C 172       1.972 -54.284 -14.242  1.00 66.71           C
ATOM   2560  O   GLY C 172       2.156 -54.046 -13.042  1.00 69.13           O
ATOM   2561  N   LYS C 173       1.270 -53.476 -15.028  1.00 69.77           N
ATOM   2562  CA  LYS C 173       0.651 -52.243 -14.565  1.00 59.51           C
ATOM   2563  C   LYS C 173      -0.844 -52.272 -14.872  1.00 53.36           C
ATOM   2564  O   LYS C 173      -1.371 -53.239 -15.428  1.00 47.78           O
ATOM   2565  CB  LYS C 173       1.323 -51.024 -15.205  1.00 62.50           C
ATOM   2566  CG  LYS C 173       2.841 -51.026 -15.097  1.00 65.41           C
ATOM   2567  CD  LYS C 173       3.302 -50.848 -13.657  1.00 62.12           C
ATOM   2568  CE  LYS C 173       2.789 -49.550 -13.055  1.00 64.10           C
ATOM   2569  NZ  LYS C 173       3.233 -49.389 -11.642  1.00 79.55           N
ATOM   2570  N   GLY C 174      -1.528 -51.194 -14.498  1.00 49.54           N
ATOM   2571  CA  GLY C 174      -2.949 -51.063 -14.730  1.00 47.05           C
ATOM   2572  C   GLY C 174      -3.259 -50.323 -16.018  1.00 47.76           C
ATOM   2573  O   GLY C 174      -2.387 -50.046 -16.844  1.00 44.34           O
ATOM   2574  N   LEU C 175      -4.540 -50.006 -16.185  1.00 44.56           N
ATOM   2575  CA  LEU C 175      -4.983 -49.276 -17.363  1.00 43.88           C
ATOM   2576  C   LEU C 175      -4.545 -47.820 -17.279  1.00 42.08           C
ATOM   2577  O   LEU C 175      -4.665 -47.176 -16.233  1.00 42.30           O
ATOM   2578  CB  LEU C 175      -6.502 -49.359 -17.497  1.00 40.03           C
ATOM   2579  CG  LEU C 175      -7.076 -50.747 -17.781  1.00 42.73           C
ATOM   2580  CD1 LEU C 175      -8.594 -50.720 -17.704  1.00 38.86           C
ATOM   2581  CD2 LEU C 175      -6.610 -51.248 -19.139  1.00 48.32           C
ATOM   2582  N   GLU C 176      -4.033 -47.300 -18.393  1.00 36.04           N
ATOM   2583  CA  GLU C 176      -3.533 -45.931 -18.461  1.00 43.73           C
ATOM   2584  C   GLU C 176      -4.097 -45.252 -19.700  1.00 45.92           C
ATOM   2585  O   GLU C 176      -3.896 -45.732 -20.821  1.00 48.08           O
ATOM   2586  CB  GLU C 176      -2.003 -45.904 -18.481  1.00 42.54           C
ATOM   2587  CG  GLU C 176      -1.413 -44.522 -18.679  1.00 43.47           C
ATOM   2588  CD  GLU C 176       0.100 -44.540 -18.705  1.00 48.87           C
ATOM   2589  OE1 GLU C 176       0.677 -45.643 -18.810  1.00 49.85           O
ATOM   2590  OE2 GLU C 176       0.710 -43.453 -18.622  1.00 56.09           O
ATOM   2591  N   TRP C 177      -4.792 -44.136 -19.497  1.00 40.17           N
ATOM   2592  CA  TRP C 177      -5.344 -43.382 -20.613  1.00 39.58           C
ATOM   2593  C   TRP C 177      -4.226 -42.681 -21.378  1.00 42.49           C
ATOM   2594  O   TRP C 177      -3.317 -42.092 -20.783  1.00 40.95           O
ATOM   2595  CB  TRP C 177      -6.364 -42.364 -20.101  1.00 39.97           C
ATOM   2596  CG  TRP C 177      -6.919 -41.452 -21.154  1.00 40.85           C
ATOM   2597  CD1 TRP C 177      -7.889 -41.749 -22.067  1.00 42.05           C
ATOM   2598  CD2 TRP C 177      -6.544 -40.091 -21.395  1.00 39.44           C
ATOM   2599  NE1 TRP C 177      -8.138 -40.658 -22.864  1.00 39.92           N
ATOM   2600  CE2 TRP C 177      -7.325 -39.627 -22.472  1.00 36.90           C
ATOM   2601  CE3 TRP C 177      -5.622 -39.220 -20.806  1.00 35.87           C
ATOM   2602  CZ2 TRP C 177      -7.213 -38.333 -22.973  1.00 38.76           C
ATOM   2603  CZ3 TRP C 177      -5.513 -37.936 -21.303  1.00 42.56           C
ATOM   2604  CH2 TRP C 177      -6.303 -37.504 -22.377  1.00 44.65           C
ATOM   2605  N   VAL C 178      -4.297 -42.753 -22.709  1.00 44.65           N
ATOM   2606  CA  VAL C 178      -3.258 -42.228 -23.592  1.00 38.94           C
ATOM   2607  C   VAL C 178      -3.693 -40.921 -24.244  1.00 44.19           C
ATOM   2608  O   VAL C 178      -3.034 -39.889 -24.092  1.00 45.69           O
ATOM   2609  CB  VAL C 178      -2.854 -43.273 -24.654  1.00 39.18           C
ATOM   2610  CG1 VAL C 178      -1.696 -42.755 -25.498  1.00 45.23           C
ATOM   2611  CG2 VAL C 178      -2.508 -44.593 -24.000  1.00 45.36           C
ATOM   2612  N   SER C 179      -4.803 -40.946 -24.977  1.00 43.44           N
ATOM   2613  CA  SER C 179      -5.233 -39.793 -25.753  1.00 44.85           C
ATOM   2614  C   SER C 179      -6.723 -39.923 -26.021  1.00 42.01           C
ATOM   2615  O   SER C 179      -7.327 -40.969 -25.780  1.00 39.58           O
ATOM   2616  CB  SER C 179      -4.440 -39.674 -27.059  1.00 38.99           C
```

[2151]

```
ATOM   2617  OG  SER C 179      -4.851 -38.545 -27.806  1.00 43.27           O
ATOM   2618  N   ALA C 180      -7.312 -38.837 -26.517  1.00 40.37           N
ATOM   2619  CA  ALA C 180      -8.722 -38.829 -26.877  1.00 43.13           C
ATOM   2620  C   ALA C 180      -8.938 -37.815 -27.990  1.00 42.09           C
ATOM   2621  O   ALA C 180      -8.136 -36.899 -28.185  1.00 42.95           O
ATOM   2622  CB  ALA C 180      -9.618 -38.509 -25.673  1.00 42.29           C
ATOM   2623  N   ILE C 181     -10.035 -37.990 -28.721  1.00 40.34           N
ATOM   2624  CA  ILE C 181     -10.387 -37.089 -29.813  1.00 39.88           C
ATOM   2625  C   ILE C 181     -11.904 -36.963 -29.863  1.00 36.18           C
ATOM   2626  O   ILE C 181     -12.630 -37.927 -29.603  1.00 28.55           O
ATOM   2627  CB  ILE C 181      -9.815 -37.585 -31.160  1.00 38.31           C
ATOM   2628  CG1 ILE C 181     -10.072 -36.562 -32.267  1.00 39.14           C
ATOM   2629  CG2 ILE C 181     -10.407 -38.938 -31.536  1.00 40.29           C
ATOM   2630  CD1 ILE C 181      -9.311 -36.842 -33.546  1.00 44.64           C
ATOM   2631  N   SER C 182     -12.379 -35.763 -30.189  1.00 37.99           N
ATOM   2632  CA  SER C 182     -13.807 -35.538 -30.329  1.00 33.86           C
ATOM   2633  C   SER C 182     -14.329 -36.222 -31.592  1.00 36.60           C
ATOM   2634  O   SER C 182     -13.568 -36.714 -32.429  1.00 34.61           O
ATOM   2635  CB  SER C 182     -14.112 -34.042 -30.375  1.00 36.00           C
ATOM   2636  OG  SER C 182     -13.452 -33.423 -31.465  1.00 37.36           O
ATOM   2637  N   GLY C 183     -15.657 -36.247 -31.720  1.00 37.66           N
ATOM   2638  CA  GLY C 183     -16.266 -36.900 -32.867  1.00 35.29           C
ATOM   2639  C   GLY C 183     -15.897 -36.243 -34.183  1.00 46.95           C
ATOM   2640  O   GLY C 183     -15.560 -36.924 -35.156  1.00 46.23           O
ATOM   2641  N   SER C 184     -15.949 -34.910 -34.232  1.00 44.17           N
ATOM   2642  CA  SER C 184     -15.619 -34.197 -35.459  1.00 35.14           C
ATOM   2643  C   SER C 184     -14.121 -34.169 -35.730  1.00 40.81           C
ATOM   2644  O   SER C 184     -13.717 -33.962 -36.879  1.00 45.75           O
ATOM   2645  CB  SER C 184     -16.155 -32.767 -35.397  1.00 41.87           C
ATOM   2646  OG  SER C 184     -15.514 -32.032 -34.370  1.00 38.21           O
ATOM   2647  N   GLY C 185     -13.296 -34.369 -34.708  1.00 40.00           N
ATOM   2648  CA  GLY C 185     -11.859 -34.311 -34.853  1.00 31.84           C
ATOM   2649  C   GLY C 185     -11.227 -32.981 -34.515  1.00 40.19           C
ATOM   2650  O   GLY C 185     -10.014 -32.830 -34.700  1.00 46.37           O
ATOM   2651  N   GLY C 186     -12.003 -32.017 -34.012  1.00 40.90           N
ATOM   2652  CA  GLY C 186     -11.468 -30.698 -33.723  1.00 39.51           C
ATOM   2653  C   GLY C 186     -10.782 -30.565 -32.382  1.00 42.26           C
ATOM   2654  O   GLY C 186      -9.950 -29.667 -32.213  1.00 42.94           O
ATOM   2655  N   SER C 187     -11.110 -31.428 -31.425  1.00 43.20           N
ATOM   2656  CA  SER C 187     -10.538 -31.382 -30.085  1.00 41.01           C
ATOM   2657  C   SER C 187      -9.668 -32.609 -29.854  1.00 38.55           C
ATOM   2658  O   SER C 187     -10.088 -33.736 -30.137  1.00 42.76           O
ATOM   2659  CB  SER C 187     -11.639 -31.311 -29.025  1.00 38.68           C
ATOM   2660  OG  SER C 187     -12.458 -30.170 -29.215  1.00 40.60           O
ATOM   2661  N   THR C 188      -8.463 -32.390 -29.331  1.00 34.10           N
ATOM   2662  CA  THR C 188      -7.535 -33.473 -29.037  1.00 39.71           C
ATOM   2663  C   THR C 188      -7.037 -33.352 -27.605  1.00 42.62           C
ATOM   2664  O   THR C 188      -6.802 -32.246 -27.107  1.00 41.51           O
ATOM   2665  CB  THR C 188      -6.341 -33.467 -30.000  1.00 37.07           C
ATOM   2666  OG1 THR C 188      -5.756 -32.159 -30.031  1.00 37.99           O
ATOM   2667  CG2 THR C 188      -6.782 -33.857 -31.397  1.00 32.85           C
ATOM   2668  N   TYR C 189      -6.870 -34.500 -26.952  1.00 41.25           N
ATOM   2669  CA  TYR C 189      -6.385 -34.575 -25.583  1.00 40.80           C
ATOM   2670  C   TYR C 189      -5.303 -35.639 -25.496  1.00 44.62           C
ATOM   2671  O   TYR C 189      -5.335 -36.638 -26.218  1.00 44.55           O
ATOM   2672  CB  TYR C 189      -7.510 -34.911 -24.599  1.00 42.78           C
ATOM   2673  CG  TYR C 189      -8.815 -34.215 -24.897  1.00 44.78           C
ATOM   2674  CD1 TYR C 189      -9.734 -34.775 -25.777  1.00 46.14           C
ATOM   2675  CD2 TYR C 189      -9.130 -33.000 -24.305  1.00 43.38           C
ATOM   2676  CE1 TYR C 189     -10.929 -34.144 -26.057  1.00 46.71           C
ATOM   2677  CE2 TYR C 189     -10.324 -32.362 -24.578  1.00 38.80           C
ATOM   2678  CZ  TYR C 189     -11.219 -32.939 -25.454  1.00 43.52           C
ATOM   2679  OH  TYR C 189     -12.411 -32.309 -25.730  1.00 43.88           O
ATOM   2680  N   TYR C 190      -4.341 -35.418 -24.605  1.00 47.18           N
ATOM   2681  CA  TYR C 190      -3.233 -36.344 -24.438  1.00 46.61           C
ATOM   2682  C   TYR C 190      -2.868 -36.437 -22.964  1.00 47.11           C
ATOM   2683  O   TYR C 190      -3.104 -35.506 -22.189  1.00 39.65           O
ATOM   2684  CB  TYR C 190      -2.004 -35.911 -25.249  1.00 44.47           C
```

[2152]

```
ATOM   2685  CG  TYR C 190      -2.244 -35.789 -26.737  1.00 47.63           C
ATOM   2686  CD1 TYR C 190      -2.641 -34.582 -27.297  1.00 46.29           C
ATOM   2687  CD2 TYR C 190      -2.065 -36.876 -27.582  1.00 48.94           C
ATOM   2688  CE1 TYR C 190      -2.860 -34.461 -28.656  1.00 43.62           C
ATOM   2689  CE2 TYR C 190      -2.281 -36.765 -28.945  1.00 50.65           C
ATOM   2690  CZ  TYR C 190      -2.678 -35.554 -29.476  1.00 47.24           C
ATOM   2691  OH  TYR C 190      -2.895 -35.436 -30.830  1.00 48.02           O
ATOM   2692  N   ALA C 191      -2.295 -37.574 -22.582  1.00 47.11           N
ATOM   2693  CA  ALA C 191      -1.743 -37.711 -21.246  1.00 46.82           C
ATOM   2694  C   ALA C 191      -0.372 -37.044 -21.183  1.00 53.25           C
ATOM   2695  O   ALA C 191       0.316 -36.887 -22.195  1.00 53.59           O
ATOM   2696  CB  ALA C 191      -1.640 -39.184 -20.850  1.00 45.48           C
ATOM   2697  N   ASP C 192       0.026 -36.655 -19.969  1.00 51.47           N
ATOM   2698  CA  ASP C 192       1.285 -35.934 -19.808  1.00 55.10           C
ATOM   2699  C   ASP C 192       2.476 -36.790 -20.219  1.00 54.45           C
ATOM   2700  O   ASP C 192       3.403 -36.302 -20.877  1.00 54.15           O
ATOM   2701  CB  ASP C 192       1.435 -35.463 -18.361  1.00 58.17           C
ATOM   2702  CG  ASP C 192       0.466 -34.353 -18.007  1.00 60.87           C
ATOM   2703  OD1 ASP C 192       0.092 -33.576 -18.912  1.00 58.63           O
ATOM   2704  OD2 ASP C 192       0.078 -34.258 -16.823  1.00 60.53           O
ATOM   2705  N   SER C 193       2.461 -38.076 -19.860  1.00 53.64           N
ATOM   2706  CA  SER C 193       3.562 -38.966 -20.211  1.00 57.81           C
ATOM   2707  C   SER C 193       3.657 -39.208 -21.711  1.00 59.96           C
ATOM   2708  O   SER C 193       4.700 -39.668 -22.188  1.00 58.09           O
ATOM   2709  CB  SER C 193       3.409 -40.303 -19.487  1.00 58.16           C
ATOM   2710  OG  SER C 193       2.258 -40.992 -19.945  1.00 50.87           O
ATOM   2711  N   VAL C 194       2.597 -38.909 -22.458  1.00 59.38           N
ATOM   2712  CA  VAL C 194       2.565 -39.159 -23.887  1.00 58.23           C
ATOM   2713  C   VAL C 194       2.533 -37.875 -24.714  1.00 61.89           C
ATOM   2714  O   VAL C 194       3.082 -37.855 -25.823  1.00 64.75           O
ATOM   2715  CB  VAL C 194       1.362 -40.068 -24.225  1.00 58.93           C
ATOM   2716  CG1 VAL C 194       0.683 -39.654 -25.522  1.00 56.51           C
ATOM   2717  CG2 VAL C 194       1.800 -41.523 -24.283  1.00 57.75           C
ATOM   2718  N   LYS C 195       1.943 -36.797 -24.196  1.00 61.88           N
ATOM   2719  CA  LYS C 195       1.753 -35.582 -24.979  1.00 63.79           C
ATOM   2720  C   LYS C 195       3.081 -35.048 -25.504  1.00 65.91           C
ATOM   2721  O   LYS C 195       4.100 -35.062 -24.807  1.00 63.34           O
ATOM   2722  CB  LYS C 195       1.054 -34.516 -24.132  1.00 54.43           C
ATOM   2723  CG  LYS C 195       0.491 -33.354 -24.931  1.00 56.17           C
ATOM   2724  CD  LYS C 195      -0.400 -32.477 -24.068  1.00 56.58           C
ATOM   2725  CE  LYS C 195      -0.801 -31.207 -24.801  1.00 61.90           C
ATOM   2726  NZ  LYS C 195      -1.817 -30.433 -24.034  1.00 61.32           N
ATOM   2727  N   GLY C 196       3.062 -34.577 -26.751  1.00 64.29           N
ATOM   2728  CA  GLY C 196       4.238 -34.088 -27.430  1.00 62.48           C
ATOM   2729  C   GLY C 196       4.905 -35.103 -28.333  1.00 67.61           C
ATOM   2730  O   GLY C 196       5.647 -34.713 -29.242  1.00 64.65           O
ATOM   2731  N   ARG C 197       4.659 -36.393 -28.107  1.00 68.47           N
ATOM   2732  CA  ARG C 197       5.237 -37.460 -28.912  1.00 64.75           C
ATOM   2733  C   ARG C 197       4.214 -38.195 -29.760  1.00 62.64           C
ATOM   2734  O   ARG C 197       4.554 -38.664 -30.848  1.00 57.77           O
ATOM   2735  CB  ARG C 197       5.966 -38.470 -28.014  1.00 59.89           C
ATOM   2736  CG  ARG C 197       7.057 -37.844 -27.158  1.00 65.08           C
ATOM   2737  CD  ARG C 197       7.803 -38.872 -26.317  1.00 73.08           C
ATOM   2738  NE  ARG C 197       6.931 -39.589 -25.390  1.00 69.58           N
ATOM   2739  CZ  ARG C 197       6.677 -40.892 -25.457  1.00 65.74           C
ATOM   2740  NH1 ARG C 197       7.231 -41.630 -26.408  1.00 67.05           N
ATOM   2741  NH2 ARG C 197       5.873 -41.458 -24.568  1.00 61.72           N
ATOM   2742  N   PHE C 198       2.978 -38.307 -29.287  1.00 61.02           N
ATOM   2743  CA  PHE C 198       1.914 -39.000 -29.997  1.00 57.73           C
ATOM   2744  C   PHE C 198       0.985 -37.986 -30.655  1.00 55.68           C
ATOM   2745  O   PHE C 198       0.893 -36.830 -30.238  1.00 59.74           O
ATOM   2746  CB  PHE C 198       1.109 -39.901 -29.053  1.00 58.41           C
ATOM   2747  CG  PHE C 198       1.860 -41.113 -28.555  1.00 61.28           C
ATOM   2748  CD1 PHE C 198       3.234 -41.222 -28.706  1.00 63.23           C
ATOM   2749  CD2 PHE C 198       1.181 -42.143 -27.924  1.00 60.75           C
ATOM   2750  CE1 PHE C 198       3.913 -42.331 -28.240  1.00 65.17           C
ATOM   2751  CE2 PHE C 198       1.855 -43.255 -27.456  1.00 60.84           C
ATOM   2752  CZ  PHE C 198       3.223 -43.347 -27.614  1.00 64.65           C
```

[2153]

```
ATOM   2753  N   THR C 199       0.293 -38.435 -31.700  1.00 51.56           N
ATOM   2754  CA  THR C 199      -0.649 -37.586 -32.421  1.00 53.72           C
ATOM   2755  C   THR C 199      -1.869 -38.414 -32.794  1.00 53.75           C
ATOM   2756  O   THR C 199      -1.760 -39.368 -33.571  1.00 52.73           O
ATOM   2757  CB  THR C 199      -0.007 -36.975 -33.671  1.00 58.32           C
ATOM   2758  OG1 THR C 199       1.204 -36.299 -33.307  1.00 43.61           O
ATOM   2759  CG2 THR C 199      -0.958 -35.981 -34.323  1.00 54.82           C
ATOM   2760  N   ILE C 200      -3.022 -38.051 -32.238  1.00 50.09           N
ATOM   2761  CA  ILE C 200      -4.277 -38.746 -32.501  1.00 48.69           C
ATOM   2762  C   ILE C 200      -5.004 -38.050 -33.643  1.00 48.94           C
ATOM   2763  O   ILE C 200      -4.997 -36.818 -33.748  1.00 54.16           O
ATOM   2764  CB  ILE C 200      -5.147 -38.807 -31.229  1.00 53.04           C
ATOM   2765  CG1 ILE C 200      -6.401 -39.651 -31.468  1.00 50.73           C
ATOM   2766  CG2 ILE C 200      -5.526 -37.408 -30.756  1.00 42.45           C
ATOM   2767  CD1 ILE C 200      -7.129 -40.036 -30.197  1.00 41.32           C
ATOM   2768  N   SER C 201      -5.614 -38.845 -34.518  1.00 49.53           N
ATOM   2769  CA  SER C 201      -6.388 -38.322 -35.635  1.00 50.75           C
ATOM   2770  C   SER C 201      -7.438 -39.356 -36.012  1.00 46.66           C
ATOM   2771  O   SER C 201      -7.385 -40.508 -35.577  1.00 49.33           O
ATOM   2772  CB  SER C 201      -5.494 -37.984 -36.833  1.00 47.41           C
ATOM   2773  OG  SER C 201      -4.827 -39.139 -37.313  1.00 52.30           O
ATOM   2774  N   ARG C 202      -8.390 -38.939 -36.842  1.00 41.98           N
ATOM   2775  CA  ARG C 202      -9.488 -39.815 -37.220  1.00 45.05           C
ATOM   2776  C   ARG C 202      -9.952 -39.471 -38.626  1.00 48.52           C
ATOM   2777  O   ARG C 202      -9.779 -38.344 -39.098  1.00 52.54           O
ATOM   2778  CB  ARG C 202     -10.661 -39.708 -36.240  1.00 46.17           C
ATOM   2779  CG  ARG C 202     -11.353 -38.354 -36.239  1.00 46.95           C
ATOM   2780  CD  ARG C 202     -12.372 -38.265 -35.117  1.00 42.94           C
ATOM   2781  NE  ARG C 202     -13.433 -39.258 -35.255  1.00 36.84           N
ATOM   2782  CZ  ARG C 202     -14.163 -39.711 -34.241  1.00 36.67           C
ATOM   2783  NH1 ARG C 202     -13.941 -39.267 -33.011  1.00 38.16           N
ATOM   2784  NH2 ARG C 202     -15.109 -40.615 -34.453  1.00 38.99           N
ATOM   2785  N   ASP C 203     -10.540 -40.463 -39.292  1.00 46.71           N
ATOM   2786  CA  ASP C 203     -11.095 -40.305 -40.634  1.00 45.52           C
ATOM   2787  C   ASP C 203     -12.543 -40.782 -40.587  1.00 50.99           C
ATOM   2788  O   ASP C 203     -12.809 -41.987 -40.645  1.00 50.09           O
ATOM   2789  CB  ASP C 203     -10.284 -41.086 -41.663  1.00 54.80           C
ATOM   2790  CG  ASP C 203     -10.713 -40.795 -43.088  1.00 56.55           C
ATOM   2791  OD1 ASP C 203     -11.525 -39.868 -43.292  1.00 54.65           O
ATOM   2792  OD2 ASP C 203     -10.239 -41.498 -44.006  1.00 56.59           O
ATOM   2793  N   ASN C 204     -13.477 -39.833 -40.482  1.00 50.59           N
ATOM   2794  CA  ASN C 204     -14.886 -40.188 -40.370  1.00 48.04           C
ATOM   2795  C   ASN C 204     -15.442 -40.767 -41.663  1.00 50.77           C
ATOM   2796  O   ASN C 204     -16.424 -41.514 -41.619  1.00 49.51           O
ATOM   2797  CB  ASN C 204     -15.706 -38.967 -39.951  1.00 48.93           C
ATOM   2798  CG  ASN C 204     -15.333 -38.461 -38.571  1.00 46.38           C
ATOM   2799  OD1 ASN C 204     -14.794 -39.203 -37.749  1.00 47.12           O
ATOM   2800  ND2 ASN C 204     -15.618 -37.192 -38.309  1.00 39.36           N
ATOM   2801  N   SER C 205     -14.838 -40.441 -42.808  1.00 56.61           N
ATOM   2802  CA  SER C 205     -15.307 -40.998 -44.072  1.00 59.65           C
ATOM   2803  C   SER C 205     -15.049 -42.496 -44.157  1.00 60.11           C
ATOM   2804  O   SER C 205     -15.814 -43.219 -44.804  1.00 65.96           O
ATOM   2805  CB  SER C 205     -14.638 -40.281 -45.245  1.00 60.18           C
ATOM   2806  OG  SER C 205     -13.238 -40.498 -45.242  1.00 67.22           O
ATOM   2807  N   LYS C 206     -13.988 -42.980 -43.512  1.00 57.90           N
ATOM   2808  CA  LYS C 206     -13.628 -44.389 -43.559  1.00 59.59           C
ATOM   2809  C   LYS C 206     -13.782 -45.081 -42.210  1.00 53.33           C
ATOM   2810  O   LYS C 206     -13.383 -46.243 -42.074  1.00 52.56           O
ATOM   2811  CB  LYS C 206     -12.198 -44.549 -44.079  1.00 64.62           C
ATOM   2812  CG  LYS C 206     -11.954 -43.870 -45.420  1.00 66.34           C
ATOM   2813  CD  LYS C 206     -13.003 -44.275 -46.444  1.00 69.13           C
ATOM   2814  CE  LYS C 206     -12.887 -43.449 -47.716  1.00 59.97           C
ATOM   2815  NZ  LYS C 206     -14.002 -43.734 -48.663  1.00 52.13           N
ATOM   2816  N   ASN C 207     -14.349 -44.396 -41.214  1.00 52.00           N
ATOM   2817  CA  ASN C 207     -14.640 -44.985 -39.903  1.00 49.36           C
ATOM   2818  C   ASN C 207     -13.399 -45.622 -39.283  1.00 46.77           C
ATOM   2819  O   ASN C 207     -13.447 -46.726 -38.737  1.00 48.78           O
ATOM   2820  CB  ASN C 207     -15.780 -46.002 -39.999  1.00 43.73           C
```

[2154]

```
ATOM   2821  CG  ASN C 207     -17.102 -45.362 -40.365  1.00 39.72           C
ATOM   2822  OD1 ASN C 207     -17.147 -44.215 -40.806  1.00 49.20           O
ATOM   2823  ND2 ASN C 207     -18.187 -46.106 -40.191  1.00 39.12           N
ATOM   2824  N   THR C 208     -12.273 -44.919 -39.371  1.00 42.64           N
ATOM   2825  CA  THR C 208     -11.000 -45.415 -38.870  1.00 45.49           C
ATOM   2826  C   THR C 208     -10.394 -44.368 -37.950  1.00 49.34           C
ATOM   2827  O   THR C 208     -10.376 -43.179 -38.284  1.00 52.31           O
ATOM   2828  CB  THR C 208     -10.033 -45.743 -40.011  1.00 50.67           C
ATOM   2829  OG1 THR C 208      -9.969 -44.635 -40.918  1.00 63.50           O
ATOM   2830  CG2 THR C 208     -10.493 -46.985 -40.759  1.00 49.12           C
ATOM   2831  N   LEU C 209      -9.908 -44.810 -36.797  1.00 41.65           N
ATOM   2832  CA  LEU C 209      -9.301 -43.935 -35.805  1.00 48.76           C
ATOM   2833  C   LEU C 209      -7.822 -44.290 -35.683  1.00 47.69           C
ATOM   2834  O   LEU C 209      -7.472 -45.468 -35.555  1.00 52.07           O
ATOM   2835  CB  LEU C 209     -10.051 -44.071 -34.476  1.00 47.79           C
ATOM   2836  CG  LEU C 209      -9.647 -43.408 -33.161  1.00 42.40           C
ATOM   2837  CD1 LEU C 209      -8.712 -44.298 -32.389  1.00 46.24           C
ATOM   2838  CD2 LEU C 209      -9.044 -42.032 -33.384  1.00 48.45           C
ATOM   2839  N   TYR C 210      -6.959 -43.274 -35.735  1.00 44.39           N
ATOM   2840  CA  TYR C 210      -5.515 -43.461 -35.808  1.00 49.59           C
ATOM   2841  C   TYR C 210      -4.813 -42.895 -34.577  1.00 49.10           C
ATOM   2842  O   TYR C 210      -5.317 -41.991 -33.904  1.00 50.30           O
ATOM   2843  CB  TYR C 210      -4.930 -42.800 -37.065  1.00 45.96           C
ATOM   2844  CG  TYR C 210      -5.374 -43.422 -38.368  1.00 53.76           C
ATOM   2845  CD1 TYR C 210      -5.820 -44.735 -38.420  1.00 54.66           C
ATOM   2846  CD2 TYR C 210      -5.341 -42.695 -39.551  1.00 60.43           C
ATOM   2847  CE1 TYR C 210      -6.225 -45.304 -39.612  1.00 57.88           C
ATOM   2848  CE2 TYR C 210      -5.742 -43.256 -40.747  1.00 52.07           C
ATOM   2849  CZ  TYR C 210      -6.184 -44.560 -40.772  1.00 60.26           C
ATOM   2850  OH  TYR C 210      -6.585 -45.124 -41.961  1.00 70.14           O
ATOM   2851  N   LEU C 211      -3.627 -43.442 -34.299  1.00 44.60           N
ATOM   2852  CA  LEU C 211      -2.746 -42.945 -33.238  1.00 49.28           C
ATOM   2853  C   LEU C 211      -1.312 -42.972 -33.759  1.00 52.12           C
ATOM   2854  O   LEU C 211      -0.697 -44.039 -33.848  1.00 55.18           O
ATOM   2855  CB  LEU C 211      -2.874 -43.769 -31.963  1.00 48.51           C
ATOM   2856  CG  LEU C 211      -1.968 -43.331 -30.808  1.00 51.95           C
ATOM   2857  CD1 LEU C 211      -2.320 -41.925 -30.346  1.00 45.96           C
ATOM   2858  CD2 LEU C 211      -2.043 -44.315 -29.650  1.00 54.85           C
ATOM   2859  N   GLN C 212      -0.786 -41.799 -34.099  1.00 54.21           N
ATOM   2860  CA  GLN C 212       0.606 -41.675 -34.511  1.00 57.74           C
ATOM   2861  C   GLN C 212       1.508 -41.662 -33.283  1.00 60.29           C
ATOM   2862  O   GLN C 212       1.234 -40.951 -32.312  1.00 62.42           O
ATOM   2863  CB  GLN C 212       0.803 -40.400 -35.332  1.00 54.34           C
ATOM   2864  CG  GLN C 212       2.226 -40.173 -35.809  1.00 58.73           C
ATOM   2865  CD  GLN C 212       2.667 -41.196 -36.837  1.00 68.57           C
ATOM   2866  OE1 GLN C 212       1.849 -41.743 -37.577  1.00 69.04           O
ATOM   2867  NE2 GLN C 212       3.968 -41.459 -36.888  1.00 68.46           N
ATOM   2868  N   MET C 213       2.575 -42.458 -33.317  1.00 58.33           N
ATOM   2869  CA  MET C 213       3.520 -42.559 -32.209  1.00 62.16           C
ATOM   2870  C   MET C 213       4.923 -42.256 -32.712  1.00 65.42           C
ATOM   2871  O   MET C 213       5.422 -42.936 -33.616  1.00 66.38           O
ATOM   2872  CB  MET C 213       3.482 -43.949 -31.570  1.00 63.72           C
ATOM   2873  CG  MET C 213       2.178 -44.307 -30.889  1.00 62.83           C
ATOM   2874  SD  MET C 213       2.030 -46.088 -30.659  1.00 65.30           S
ATOM   2875  CE  MET C 213       3.159 -46.372 -29.300  1.00 64.44           C
ATOM   2876  N   ASN C 214       5.559 -41.243 -32.126  1.00 62.25           N
ATOM   2877  CA  ASN C 214       6.929 -40.880 -32.451  1.00 61.13           C
ATOM   2878  C   ASN C 214       7.771 -40.881 -31.183  1.00 60.65           C
ATOM   2879  O   ASN C 214       7.263 -40.642 -30.084  1.00 61.87           O
ATOM   2880  CB  ASN C 214       7.017 -39.496 -33.116  1.00 65.63           C
ATOM   2881  CG  ASN C 214       6.251 -39.418 -34.422  1.00 66.50           C
ATOM   2882  OD1 ASN C 214       5.151 -39.953 -34.545  1.00 67.88           O
ATOM   2883  ND2 ASN C 214       6.835 -38.748 -35.409  1.00 73.27           N
ATOM   2884  N   SER C 215       9.065 -41.149 -31.354  1.00 66.62           N
ATOM   2885  CA  SER C 215      10.049 -41.105 -30.273  1.00 63.83           C
ATOM   2886  C   SER C 215       9.622 -41.985 -29.096  1.00 66.66           C
ATOM   2887  O   SER C 215       9.508 -41.540 -27.953  1.00 67.78           O
ATOM   2888  CB  SER C 215      10.296 -39.663 -29.823  1.00 61.70           C
```

[2155]

```
ATOM   2889  OG  SER C 215      10.550 -38.819 -30.933  1.00 56.62           O
ATOM   2890  N   LEU C 216       9.390 -43.259 -29.400  1.00 67.11           N
ATOM   2891  CA  LEU C 216       8.903 -44.199 -28.401  1.00 67.53           C
ATOM   2892  C   LEU C 216      10.013 -44.601 -27.439  1.00 71.10           C
ATOM   2893  O   LEU C 216      11.191 -44.674 -27.803  1.00 73.53           O
ATOM   2894  CB  LEU C 216       8.303 -45.452 -29.050  1.00 66.45           C
ATOM   2895  CG  LEU C 216       7.046 -45.435 -29.937  1.00 69.60           C
ATOM   2896  CD1 LEU C 216       7.007 -44.327 -30.974  1.00 71.57           C
ATOM   2897  CD2 LEU C 216       6.881 -46.789 -30.614  1.00 72.75           C
ATOM   2898  N   ARG C 217       9.619 -44.857 -26.196  1.00 72.37           N
ATOM   2899  CA  ARG C 217      10.518 -45.263 -25.128  1.00 69.51           C
ATOM   2900  C   ARG C 217      10.117 -46.646 -24.633  1.00 69.98           C
ATOM   2901  O   ARG C 217       9.042 -47.157 -24.955  1.00 66.62           O
ATOM   2902  CB  ARG C 217      10.485 -44.250 -23.976  1.00 66.02           C
ATOM   2903  CG  ARG C 217      10.861 -42.838 -24.388  1.00 70.59           C
ATOM   2904  CD  ARG C 217      10.429 -41.824 -23.343  1.00 75.05           C
ATOM   2905  NE  ARG C 217      10.826 -40.467 -23.705  1.00 80.95           N
ATOM   2906  CZ  ARG C 217      10.380 -39.371 -23.101  1.00 81.43           C
ATOM   2907  NH1 ARG C 217       9.513 -39.469 -22.102  1.00 78.43           N
ATOM   2908  NH2 ARG C 217      10.799 -38.176 -23.496  1.00 70.61           N
ATOM   2909  N   ALA C 218      10.995 -47.246 -23.823  1.00 76.68           N
ATOM   2910  CA  ALA C 218      10.711 -48.568 -23.270  1.00 70.03           C
ATOM   2911  C   ALA C 218       9.443 -48.568 -22.428  1.00 66.88           C
ATOM   2912  O   ALA C 218       8.762 -49.595 -22.333  1.00 65.82           O
ATOM   2913  CB  ALA C 218      11.899 -49.055 -22.440  1.00 64.29           C
ATOM   2914  N   GLU C 219       9.111 -47.431 -21.813  1.00 69.89           N
ATOM   2915  CA  GLU C 219       7.880 -47.332 -21.035  1.00 67.87           C
ATOM   2916  C   GLU C 219       6.644 -47.507 -21.908  1.00 66.80           C
ATOM   2917  O   GLU C 219       5.589 -47.918 -21.412  1.00 62.63           O
ATOM   2918  CB  GLU C 219       7.827 -45.989 -20.303  1.00 67.77           C
ATOM   2919  CG  GLU C 219       8.928 -45.784 -19.264  1.00 85.17           C
ATOM   2920  CD  GLU C 219      10.249 -45.326 -19.863  1.00 87.20           C
ATOM   2921  OE1 GLU C 219      10.540 -45.671 -21.028  1.00 75.66           O
ATOM   2922  OE2 GLU C 219      11.001 -44.617 -19.161  1.00 94.45           O
ATOM   2923  N   ASP C 220       6.750 -47.202 -23.202  1.00 66.21           N
ATOM   2924  CA  ASP C 220       5.599 -47.270 -24.096  1.00 63.42           C
ATOM   2925  C   ASP C 220       5.200 -48.694 -24.466  1.00 63.83           C
ATOM   2926  O   ASP C 220       4.225 -48.863 -25.206  1.00 64.11           O
ATOM   2927  CB  ASP C 220       5.869 -46.458 -25.365  1.00 63.87           C
ATOM   2928  CG  ASP C 220       6.156 -44.999 -25.070  1.00 69.50           C
ATOM   2929  OD1 ASP C 220       5.612 -44.475 -24.074  1.00 62.57           O
ATOM   2930  OD2 ASP C 220       6.916 -44.372 -25.837  1.00 74.67           O
ATOM   2931  N   THR C 221       5.916 -49.710 -23.993  1.00 60.59           N
ATOM   2932  CA  THR C 221       5.517 -51.094 -24.230  1.00 56.25           C
ATOM   2933  C   THR C 221       4.219 -51.369 -23.481  1.00 60.13           C
ATOM   2934  O   THR C 221       4.192 -51.346 -22.246  1.00 57.49           O
ATOM   2935  CB  THR C 221       6.614 -52.055 -23.780  1.00 62.15           C
ATOM   2936  OG1 THR C 221       7.775 -51.878 -24.598  1.00 71.10           O
ATOM   2937  CG2 THR C 221       6.137 -53.496 -23.891  1.00 60.21           C
ATOM   2938  N   ALA C 222       3.141 -51.615 -24.221  1.00 58.10           N
ATOM   2939  CA  ALA C 222       1.826 -51.813 -23.626  1.00 52.33           C
ATOM   2940  C   ALA C 222       0.882 -52.353 -24.692  1.00 56.63           C
ATOM   2941  O   ALA C 222       1.181 -52.325 -25.889  1.00 49.31           O
ATOM   2942  CB  ALA C 222       1.275 -50.515 -23.030  1.00 50.66           C
ATOM   2943  N   VAL C 223      -0.263 -52.849 -24.236  1.00 55.51           N
ATOM   2944  CA  VAL C 223      -1.364 -53.211 -25.119  1.00 45.60           C
ATOM   2945  C   VAL C 223      -2.266 -51.993 -25.253  1.00 51.82           C
ATOM   2946  O   VAL C 223      -2.754 -51.459 -24.251  1.00 50.44           O
ATOM   2947  CB  VAL C 223      -2.141 -54.421 -24.581  1.00 45.83           C
ATOM   2948  CG1 VAL C 223      -3.329 -54.727 -25.477  1.00 47.77           C
ATOM   2949  CG2 VAL C 223      -1.227 -55.630 -24.474  1.00 52.01           C
ATOM   2950  N   TYR C 224      -2.482 -51.547 -26.487  1.00 50.70           N
ATOM   2951  CA  TYR C 224      -3.239 -50.333 -26.761  1.00 46.43           C
ATOM   2952  C   TYR C 224      -4.645 -50.704 -27.213  1.00 46.35           C
ATOM   2953  O   TYR C 224      -4.813 -51.403 -28.218  1.00 48.36           O
ATOM   2954  CB  TYR C 224      -2.539 -49.488 -27.824  1.00 47.37           C
ATOM   2955  CG  TYR C 224      -1.248 -48.862 -27.350  1.00 48.74           C
ATOM   2956  CD1 TYR C 224      -0.082 -49.610 -27.268  1.00 48.19           C
```

[2156]

```
ATOM   2957  CD2 TYR C 224      -1.196 -47.524 -26.984  1.00 48.32           C
ATOM   2958  CE1 TYR C 224       1.100 -49.045 -26.837  1.00 53.66           C
ATOM   2959  CE2 TYR C 224      -0.017 -46.949 -26.551  1.00 49.96           C
ATOM   2960  CZ  TYR C 224       1.127 -47.714 -26.480  1.00 54.46           C
ATOM   2961  OH  TYR C 224       2.304 -47.148 -26.051  1.00 54.77           O
ATOM   2962  N   TYR C 225      -5.646 -50.225 -26.481  1.00 47.35           N
ATOM   2963  CA  TYR C 225      -7.041 -50.527 -26.765  1.00 48.85           C
ATOM   2964  C   TYR C 225      -7.712 -49.337 -27.436  1.00 46.34           C
ATOM   2965  O   TYR C 225      -7.435 -48.182 -27.101  1.00 42.40           O
ATOM   2966  CB  TYR C 225      -7.808 -50.880 -25.489  1.00 47.92           C
ATOM   2967  CG  TYR C 225      -7.315 -52.112 -24.772  1.00 50.94           C
ATOM   2968  CD1 TYR C 225      -7.817 -53.368 -25.085  1.00 50.94           C
ATOM   2969  CD2 TYR C 225      -6.362 -52.018 -23.766  1.00 50.25           C
ATOM   2970  CE1 TYR C 225      -7.374 -54.499 -24.425  1.00 60.64           C
ATOM   2971  CE2 TYR C 225      -5.914 -53.141 -23.100  1.00 55.70           C
ATOM   2972  CZ  TYR C 225      -6.422 -54.379 -23.433  1.00 59.03           C
ATOM   2973  OH  TYR C 225      -5.976 -55.499 -22.770  1.00 53.70           O
ATOM   2974  N   CYS C 226      -8.593 -49.631 -28.387  1.00 46.52           N
ATOM   2975  CA  CYS C 226      -9.467 -48.628 -28.973  1.00 48.83           C
ATOM   2976  C   CYS C 226     -10.708 -48.494 -28.102  1.00 45.01           C
ATOM   2977  O   CYS C 226     -11.220 -49.487 -27.578  1.00 43.04           O
ATOM   2978  CB  CYS C 226      -9.849 -49.017 -30.403  1.00 49.34           C
ATOM   2979  SG  CYS C 226     -10.624 -47.703 -31.371  1.00 72.20           S
ATOM   2980  N   ALA C 227     -11.188 -47.263 -27.943  1.00 40.50           N
ATOM   2981  CA  ALA C 227     -12.280 -46.993 -27.019  1.00 37.69           C
ATOM   2982  C   ALA C 227     -13.277 -46.029 -27.640  1.00 43.93           C
ATOM   2983  O   ALA C 227     -12.888 -44.993 -28.188  1.00 46.55           O
ATOM   2984  CB  ALA C 227     -11.750 -46.420 -25.700  1.00 38.57           C
ATOM   2985  N   ARG C 228     -14.558 -46.370 -27.542  1.00 45.99           N
ATOM   2986  CA  ARG C 228     -15.645 -45.504 -27.980  1.00 42.23           C
ATOM   2987  C   ARG C 228     -16.287 -44.866 -26.756  1.00 43.64           C
ATOM   2988  O   ARG C 228     -16.619 -45.562 -25.790  1.00 44.62           O
ATOM   2989  CB  ARG C 228     -16.679 -46.295 -28.784  1.00 37.60           C
ATOM   2990  CG  ARG C 228     -18.017 -45.595 -28.988  1.00 35.77           C
ATOM   2991  CD  ARG C 228     -18.931 -46.449 -29.861  1.00 46.08           C
ATOM   2992  NE  ARG C 228     -20.329 -46.024 -29.827  1.00 45.16           N
ATOM   2993  CZ  ARG C 228     -21.271 -46.612 -29.095  1.00 48.16           C
ATOM   2994  NH1 ARG C 228     -20.967 -47.650 -28.331  1.00 45.45           N
ATOM   2995  NH2 ARG C 228     -22.519 -46.168 -29.126  1.00 51.25           N
ATOM   2996  N   ASP C 229     -16.449 -43.545 -26.793  1.00 37.16           N
ATOM   2997  CA  ASP C 229     -16.952 -42.782 -25.660  1.00 30.30           C
ATOM   2998  C   ASP C 229     -18.283 -42.140 -26.018  1.00 33.86           C
ATOM   2999  O   ASP C 229     -18.405 -41.496 -27.065  1.00 41.47           O
ATOM   3000  CB  ASP C 229     -15.955 -41.701 -25.228  1.00 35.27           C
ATOM   3001  CG  ASP C 229     -14.553 -42.242 -25.023  1.00 43.57           C
ATOM   3002  OD1 ASP C 229     -13.589 -41.552 -25.415  1.00 48.92           O
ATOM   3003  OD2 ASP C 229     -14.412 -43.364 -24.496  1.00 44.28           O
ATOM   3004  N   LEU C 230     -19.278 -42.322 -25.147  1.00 36.63           N
ATOM   3005  CA  LEU C 230     -20.557 -41.641 -25.323  1.00 35.37           C
ATOM   3006  C   LEU C 230     -20.382 -40.131 -25.218  1.00 36.98           C
ATOM   3007  O   LEU C 230     -20.893 -39.372 -26.050  1.00 47.79           O
ATOM   3008  CB  LEU C 230     -21.556 -42.141 -24.280  1.00 34.50           C
ATOM   3009  CG  LEU C 230     -21.745 -43.656 -24.197  1.00 37.43           C
ATOM   3010  CD1 LEU C 230     -22.257 -44.053 -22.825  1.00 41.34           C
ATOM   3011  CD2 LEU C 230     -22.700 -44.130 -25.277  1.00 42.91           C
ATOM   3012  N   ILE C 231     -19.662 -39.678 -24.192  1.00 33.34           N
ATOM   3013  CA  ILE C 231     -19.191 -38.306 -24.081  1.00 30.50           C
ATOM   3014  C   ILE C 231     -17.728 -38.349 -23.661  1.00 31.66           C
ATOM   3015  O   ILE C 231     -17.182 -39.407 -23.346  1.00 36.85           O
ATOM   3016  CB  ILE C 231     -20.016 -37.471 -23.079  1.00 32.64           C
ATOM   3017  CG1 ILE C 231     -19.960 -38.109 -21.689  1.00 33.04           C
ATOM   3018  CG2 ILE C 231     -21.454 -37.308 -23.563  1.00 31.58           C
ATOM   3019  CD1 ILE C 231     -20.476 -37.217 -20.585  1.00 34.05           C
ATOM   3020  N   HIS C 232     -17.094 -37.178 -23.664  1.00 30.17           N
ATOM   3021  CA  HIS C 232     -15.685 -37.081 -23.302  1.00 33.88           C
ATOM   3022  C   HIS C 232     -15.432 -37.653 -21.911  1.00 39.50           C
ATOM   3023  O   HIS C 232     -15.865 -37.078 -20.906  1.00 34.22           O
ATOM   3024  CB  HIS C 232     -15.214 -35.626 -23.367  1.00 27.15           C
```

[2157]

```
ATOM   3025  CG  HIS C 232     -13.850 -35.406 -22.786  1.00 40.08           C
ATOM   3026  ND1 HIS C 232     -12.692 -35.735 -23.457  1.00 41.20           N
ATOM   3027  CD2 HIS C 232     -13.462 -34.896 -21.593  1.00 35.14           C
ATOM   3028  CE1 HIS C 232     -11.649 -35.432 -22.705  1.00 39.78           C
ATOM   3029  NE2 HIS C 232     -12.088 -34.922 -21.568  1.00 41.89           N
ATOM   3030  N   GLY C 233     -14.741 -38.790 -21.847  1.00 34.67           N
ATOM   3031  CA  GLY C 233     -14.369 -39.396 -20.588  1.00 32.50           C
ATOM   3032  C   GLY C 233     -15.270 -40.507 -20.097  1.00 36.30           C
ATOM   3033  O   GLY C 233     -15.030 -41.031 -19.003  1.00 42.36           O
ATOM   3034  N   VAL C 234     -16.304 -40.870 -20.847  1.00 35.61           N
ATOM   3035  CA  VAL C 234     -17.214 -41.952 -20.468  1.00 34.04           C
ATOM   3036  C   VAL C 234     -17.093 -43.025 -21.545  1.00 34.97           C
ATOM   3037  O   VAL C 234     -17.784 -42.991 -22.566  1.00 33.65           O
ATOM   3038  CB  VAL C 234     -18.659 -41.474 -20.306  1.00 36.26           C
ATOM   3039  CG1 VAL C 234     -19.575 -42.646 -19.976  1.00 29.76           C
ATOM   3040  CG2 VAL C 234     -18.740 -40.410 -19.222  1.00 34.49           C
ATOM   3041  N   THR C 235     -16.207 -43.992 -21.321  1.00 38.23           N
ATOM   3042  CA  THR C 235     -15.984 -45.061 -22.284  1.00 32.21           C
ATOM   3043  C   THR C 235     -17.065 -46.128 -22.165  1.00 38.48           C
ATOM   3044  O   THR C 235     -17.442 -46.535 -21.061  1.00 37.55           O
ATOM   3045  CB  THR C 235     -14.605 -45.686 -22.072  1.00 38.63           C
ATOM   3046  OG1 THR C 235     -13.599 -44.666 -22.142  1.00 35.94           O
ATOM   3047  CG2 THR C 235     -14.325 -46.747 -23.123  1.00 45.07           C
ATOM   3048  N   ARG C 236     -17.550 -46.594 -23.315  1.00 39.02           N
ATOM   3049  CA  ARG C 236     -18.627 -47.572 -23.376  1.00 38.98           C
ATOM   3050  C   ARG C 236     -18.238 -48.879 -24.050  1.00 37.83           C
ATOM   3051  O   ARG C 236     -18.776 -49.927 -23.685  1.00 37.36           O
ATOM   3052  CB  ARG C 236     -19.840 -46.969 -24.106  1.00 38.46           C
ATOM   3053  CG  ARG C 236     -21.045 -47.889 -24.218  1.00 39.99           C
ATOM   3054  CD  ARG C 236     -21.508 -48.383 -22.860  1.00 41.27           C
ATOM   3055  NE  ARG C 236     -22.710 -49.203 -22.968  1.00 41.78           N
ATOM   3056  CZ  ARG C 236     -22.708 -50.491 -23.293  1.00 38.77           C
ATOM   3057  NH1 ARG C 236     -21.562 -51.109 -23.545  1.00 35.14           N
ATOM   3058  NH2 ARG C 236     -23.851 -51.161 -23.369  1.00 34.29           N
ATOM   3059  N   ASN C 237     -17.316 -48.855 -25.009  1.00 40.10           N
ATOM   3060  CA  ASN C 237     -16.923 -50.058 -25.727  1.00 43.79           C
ATOM   3061  C   ASN C 237     -15.409 -50.094 -25.862  1.00 42.40           C
ATOM   3062  O   ASN C 237     -14.752 -49.054 -25.960  1.00 45.50           O
ATOM   3063  CB  ASN C 237     -17.581 -50.128 -27.111  1.00 40.90           C
ATOM   3064  CG  ASN C 237     -19.069 -49.848 -27.058  1.00 40.34           C
ATOM   3065  OD1 ASN C 237     -19.489 -48.693 -27.008  1.00 42.71           O
ATOM   3066  ND2 ASN C 237     -19.874 -50.904 -27.066  1.00 36.65           N
ATOM   3067  N   TRP C 238     -14.863 -51.306 -25.880  1.00 42.38           N
ATOM   3068  CA  TRP C 238     -13.428 -51.511 -25.975  1.00 42.30           C
ATOM   3069  C   TRP C 238     -13.126 -52.455 -27.127  1.00 43.16           C
ATOM   3070  O   TRP C 238     -13.950 -53.297 -27.493  1.00 47.06           O
ATOM   3071  CB  TRP C 238     -12.855 -52.091 -24.675  1.00 44.73           C
ATOM   3072  CG  TRP C 238     -12.987 -51.184 -23.492  1.00 50.28           C
ATOM   3073  CD1 TRP C 238     -14.143 -50.820 -22.863  1.00 46.46           C
ATOM   3074  CD2 TRP C 238     -11.925 -50.524 -22.792  1.00 54.43           C
ATOM   3075  NE1 TRP C 238     -13.867 -49.977 -21.815  1.00 52.12           N
ATOM   3076  CE2 TRP C 238     -12.512 -49.779 -21.750  1.00 54.74           C
ATOM   3077  CE3 TRP C 238     -10.535 -50.491 -22.945  1.00 49.82           C
ATOM   3078  CZ2 TRP C 238     -11.758 -49.010 -20.866  1.00 55.50           C
ATOM   3079  CZ3 TRP C 238      -9.789 -49.727 -22.066  1.00 51.93           C
ATOM   3080  CH2 TRP C 238     -10.402 -48.997 -21.040  1.00 53.56           C
ATOM   3081  N   GLY C 239     -11.931 -52.309 -27.694  1.00 44.78           N
ATOM   3082  CA  GLY C 239     -11.455 -53.200 -28.728  1.00 45.55           C
ATOM   3083  C   GLY C 239     -10.658 -54.359 -28.161  1.00 47.84           C
ATOM   3084  O   GLY C 239     -10.569 -54.567 -26.949  1.00 52.27           O
ATOM   3085  N   GLN C 240     -10.072 -55.136 -29.073  1.00 45.86           N
ATOM   3086  CA  GLN C 240      -9.267 -56.280 -28.665  1.00 47.18           C
ATOM   3087  C   GLN C 240      -7.905 -55.861 -28.134  1.00 46.30           C
ATOM   3088  O   GLN C 240      -7.342 -56.549 -27.276  1.00 52.64           O
ATOM   3089  CB  GLN C 240      -9.089 -57.241 -29.839  1.00 53.18           C
ATOM   3090  CG  GLN C 240     -10.361 -57.509 -30.612  1.00 59.04           C
ATOM   3091  CD  GLN C 240     -10.110 -58.304 -31.872  1.00 65.85           C
ATOM   3092  OE1 GLN C 240      -8.998 -58.315 -32.403  1.00 60.54           O
```

[2158]

```
ATOM   3093  NE2 GLN C 240     -11.141 -58.981 -32.358  1.00 77.03           N
ATOM   3094  N   GLY C 241      -7.359 -54.759 -28.634  1.00 47.75           N
ATOM   3095  CA  GLY C 241      -6.048 -54.314 -28.211  1.00 48.36           C
ATOM   3096  C   GLY C 241      -4.941 -54.827 -29.106  1.00 46.97           C
ATOM   3097  O   GLY C 241      -5.005 -55.957 -29.597  1.00 59.28           O
ATOM   3098  N   THR C 242      -3.921 -54.005 -29.329  1.00 48.37           N
ATOM   3099  CA  THR C 242      -2.770 -54.381 -30.135  1.00 48.39           C
ATOM   3100  C   THR C 242      -1.505 -54.261 -29.296  1.00 50.29           C
ATOM   3101  O   THR C 242      -1.359 -53.326 -28.503  1.00 48.53           O
ATOM   3102  CB  THR C 242      -2.664 -53.515 -31.401  1.00 52.92           C
ATOM   3103  OG1 THR C 242      -1.485 -53.872 -32.131  1.00 52.98           O
ATOM   3104  CG2 THR C 242      -2.621 -52.032 -31.053  1.00 55.12           C
ATOM   3105  N   LEU C 243      -0.602 -55.222 -29.461  1.00 56.01           N
ATOM   3106  CA  LEU C 243       0.597 -55.305 -28.639  1.00 50.92           C
ATOM   3107  C   LEU C 243       1.728 -54.525 -29.295  1.00 54.14           C
ATOM   3108  O   LEU C 243       2.024 -54.723 -30.478  1.00 58.69           O
ATOM   3109  CB  LEU C 243       1.001 -56.766 -28.430  1.00 60.03           C
ATOM   3110  CG  LEU C 243       2.193 -57.055 -27.515  1.00 65.10           C
ATOM   3111  CD1 LEU C 243       1.898 -58.259 -26.634  1.00 54.03           C
ATOM   3112  CD2 LEU C 243       3.455 -57.294 -28.331  1.00 64.52           C
ATOM   3113  N   VAL C 244       2.355 -53.640 -28.525  1.00 53.41           N
ATOM   3114  CA  VAL C 244       3.475 -52.832 -28.995  1.00 60.54           C
ATOM   3115  C   VAL C 244       4.654 -53.071 -28.064  1.00 68.47           C
ATOM   3116  O   VAL C 244       4.554 -52.836 -26.852  1.00 60.17           O
ATOM   3117  CB  VAL C 244       3.118 -51.338 -29.053  1.00 56.41           C
ATOM   3118  CG1 VAL C 244       4.352 -50.511 -29.383  1.00 52.04           C
ATOM   3119  CG2 VAL C 244       2.017 -51.093 -30.074  1.00 59.38           C
ATOM   3120  N   THR C 245       5.765 -53.543 -28.626  1.00 71.20           N
ATOM   3121  CA  THR C 245       6.993 -53.794 -27.884  1.00 66.50           C
ATOM   3122  C   THR C 245       8.121 -52.986 -28.507  1.00 68.26           C
ATOM   3123  O   THR C 245       8.275 -52.970 -29.733  1.00 70.39           O
ATOM   3124  CB  THR C 245       7.347 -55.284 -27.873  1.00 63.69           C
ATOM   3125  OG1 THR C 245       7.108 -55.845 -29.170  1.00 75.00           O
ATOM   3126  CG2 THR C 245       6.513 -56.022 -26.838  1.00 63.04           C
ATOM   3127  N   VAL C 246       8.905 -52.319 -27.666  1.00 69.97           N
ATOM   3128  CA  VAL C 246      10.035 -51.511 -28.110  1.00 75.37           C
ATOM   3129  C   VAL C 246      11.291 -52.011 -27.408  1.00 82.25           C
ATOM   3130  O   VAL C 246      11.374 -51.983 -26.173  1.00 85.23           O
ATOM   3131  CB  VAL C 246       9.806 -50.014 -27.847  1.00 72.54           C
ATOM   3132  CG1 VAL C 246       9.095 -49.814 -26.529  1.00 74.60           C
ATOM   3133  CG2 VAL C 246      11.125 -49.258 -27.868  1.00 75.60           C
ATOM   3134  N   SER C 247      12.255 -52.484 -28.193  1.00 81.89           N
ATOM   3135  CA  SER C 247      13.508 -53.003 -27.658  1.00 77.57           C
ATOM   3136  C   SER C 247      14.601 -52.972 -28.720  1.00 79.17           C
ATOM   3137  O   SER C 247      15.749 -52.631 -28.435  1.00 89.55           O
ATOM   3138  CB  SER C 247      13.323 -54.429 -27.136  1.00 84.04           C
ATOM   3139  OG  SER C 247      13.201 -55.350 -28.206  1.00 86.56           O
TER
ATOM   3140  N   ASN D   1     -55.754 -24.516 -19.888  1.00 64.59           N
ATOM   3141  CA  ASN D   1     -56.633 -25.419 -19.152  1.00 64.29           C
ATOM   3142  C   ASN D   1     -56.428 -25.277 -17.645  1.00 57.46           C
ATOM   3143  O   ASN D   1     -56.958 -26.062 -16.860  1.00 61.56           O
ATOM   3144  CB  ASN D   1     -56.401 -26.867 -19.588  1.00 63.27           C
ATOM   3145  CG  ASN D   1     -56.664 -27.080 -21.068  1.00 65.57           C
ATOM   3146  OD1 ASN D   1     -57.494 -26.394 -21.667  1.00 59.31           O
ATOM   3147  ND2 ASN D   1     -55.956 -28.032 -21.666  1.00 66.78           N
ATOM   3148  N   PHE D   2     -55.648 -24.273 -17.250  1.00 50.62           N
ATOM   3149  CA  PHE D   2     -55.456 -23.929 -15.850  1.00 51.04           C
ATOM   3150  C   PHE D   2     -55.634 -22.428 -15.677  1.00 47.02           C
ATOM   3151  O   PHE D   2     -55.553 -21.658 -16.638  1.00 49.19           O
ATOM   3152  CB  PHE D   2     -54.069 -24.355 -15.339  1.00 44.67           C
ATOM   3153  CG  PHE D   2     -52.928 -23.639 -16.007  1.00 43.40           C
ATOM   3154  CD1 PHE D   2     -52.398 -24.111 -17.196  1.00 45.46           C
ATOM   3155  CD2 PHE D   2     -52.382 -22.497 -15.443  1.00 43.36           C
ATOM   3156  CE1 PHE D   2     -51.347 -23.455 -17.813  1.00 45.34           C
ATOM   3157  CE2 PHE D   2     -51.334 -21.836 -16.056  1.00 39.67           C
ATOM   3158  CZ  PHE D   2     -50.814 -22.317 -17.240  1.00 38.15           C
ATOM   3159  N   MET D   3     -55.876 -22.016 -14.438  1.00 43.59           N
```

[2159]

```
ATOM   3160  CA  MET D   3     -56.035 -20.609 -14.111  1.00 48.40           C
ATOM   3161  C   MET D   3     -54.978 -20.177 -13.103  1.00 44.81           C
ATOM   3162  O   MET D   3     -54.429 -20.987 -12.351  1.00 40.48           O
ATOM   3163  CB  MET D   3     -57.438 -20.308 -13.566  1.00 49.19           C
ATOM   3164  CG  MET D   3     -57.865 -21.166 -12.392  1.00 55.39           C
ATOM   3165  SD  MET D   3     -59.375 -20.540 -11.631  1.00 83.34           S
ATOM   3166  CE  MET D   3     -60.357 -20.165 -13.082  1.00 65.29           C
ATOM   3167  N   LEU D   4     -54.701 -18.876 -13.104  1.00 37.33           N
ATOM   3168  CA  LEU D   4     -53.768 -18.252 -12.174  1.00 36.55           C
ATOM   3169  C   LEU D   4     -54.558 -17.269 -11.322  1.00 41.59           C
ATOM   3170  O   LEU D   4     -55.068 -16.267 -11.835  1.00 48.71           O
ATOM   3171  CB  LEU D   4     -52.637 -17.547 -12.919  1.00 38.35           C
ATOM   3172  CG  LEU D   4     -51.747 -18.416 -13.805  1.00 32.98           C
ATOM   3173  CD1 LEU D   4     -50.684 -17.562 -14.474  1.00 38.20           C
ATOM   3174  CD2 LEU D   4     -51.114 -19.530 -12.992  1.00 34.97           C
ATOM   3175  N   THR D   5     -54.661 -17.553 -10.028  1.00 34.79           N
ATOM   3176  CA  THR D   5     -55.468 -16.756  -9.116  1.00 33.45           C
ATOM   3177  C   THR D   5     -54.569 -15.795  -8.350  1.00 36.00           C
ATOM   3178  O   THR D   5     -53.660 -16.224  -7.632  1.00 46.27           O
ATOM   3179  CB  THR D   5     -56.247 -17.648  -8.150  1.00 40.53           C
ATOM   3180  OG1 THR D   5     -57.068 -18.556  -8.896  1.00 38.09           O
ATOM   3181  CG2 THR D   5     -57.128 -16.803  -7.239  1.00 35.59           C
ATOM   3182  N   GLN D   6     -54.828 -14.504  -8.505  1.00 34.80           N
ATOM   3183  CA  GLN D   6     -54.150 -13.442  -7.785  1.00 34.53           C
ATOM   3184  C   GLN D   6     -55.116 -12.758  -6.830  1.00 35.70           C
ATOM   3185  O   GLN D   6     -56.336 -12.837  -7.004  1.00 42.32           O
ATOM   3186  CB  GLN D   6     -53.581 -12.396  -8.753  1.00 35.10           C
ATOM   3187  CG  GLN D   6     -52.677 -12.942  -9.836  1.00 41.64           C
ATOM   3188  CD  GLN D   6     -52.172 -11.849 -10.761  1.00 44.25           C
ATOM   3189  OE1 GLN D   6     -52.383 -11.894 -11.973  1.00 37.27           O
ATOM   3190  NE2 GLN D   6     -51.505 -10.852 -10.187  1.00 39.00           N
ATOM   3191  N   PRO D   7     -54.608 -12.080  -5.801  1.00 41.72           N
ATOM   3192  CA  PRO D   7     -55.481 -11.211  -5.006  1.00 43.91           C
ATOM   3193  C   PRO D   7     -56.056 -10.099  -5.872  1.00 46.73           C
ATOM   3194  O   PRO D   7     -55.414  -9.613  -6.806  1.00 38.83           O
ATOM   3195  CB  PRO D   7     -54.550 -10.663  -3.917  1.00 30.41           C
ATOM   3196  CG  PRO D   7     -53.167 -10.870  -4.445  1.00 36.38           C
ATOM   3197  CD  PRO D   7     -53.235 -12.115  -5.272  1.00 38.09           C
ATOM   3198  N   HIS D   8     -57.294  -9.711  -5.559  1.00 50.91           N
ATOM   3199  CA  HIS D   8     -57.996  -8.740  -6.392  1.00 53.27           C
ATOM   3200  C   HIS D   8     -57.321  -7.375  -6.350  1.00 53.03           C
ATOM   3201  O   HIS D   8     -57.131  -6.734  -7.391  1.00 49.63           O
ATOM   3202  CB  HIS D   8     -59.455  -8.632  -5.951  1.00 60.38           C
ATOM   3203  CG  HIS D   8     -60.237  -7.603  -6.704  1.00 64.33           C
ATOM   3204  ND1 HIS D   8     -60.507  -7.712  -8.051  1.00 64.84           N
ATOM   3205  CD2 HIS D   8     -60.807  -6.444  -6.299  1.00 65.08           C
ATOM   3206  CE1 HIS D   8     -61.209  -6.664  -8.443  1.00 68.15           C
ATOM   3207  NE2 HIS D   8     -61.404  -5.879  -7.399  1.00 69.28           N
ATOM   3208  N   SER D   9     -56.948  -6.912  -5.160  1.00 48.28           N
ATOM   3209  CA  SER D   9     -56.317  -5.606  -5.040  1.00 50.38           C
ATOM   3210  C   SER D   9     -55.509  -5.551  -3.754  1.00 54.29           C
ATOM   3211  O   SER D   9     -55.784  -6.273  -2.791  1.00 55.73           O
ATOM   3212  CB  SER D   9     -57.354  -4.477  -5.072  1.00 54.65           C
ATOM   3213  OG  SER D   9     -58.204  -4.528  -3.939  1.00 57.14           O
ATOM   3214  N   VAL D  10     -54.509  -4.675  -3.755  1.00 50.80           N
ATOM   3215  CA  VAL D  10     -53.688  -4.401  -2.583  1.00 44.16           C
ATOM   3216  C   VAL D  10     -53.469  -2.898  -2.509  1.00 48.46           C
ATOM   3217  O   VAL D  10     -53.260  -2.239  -3.533  1.00 52.93           O
ATOM   3218  CB  VAL D  10     -52.345  -5.159  -2.627  1.00 44.36           C
ATOM   3219  CG1 VAL D  10     -52.549  -6.618  -2.262  1.00 50.14           C
ATOM   3220  CG2 VAL D  10     -51.719  -5.046  -4.002  1.00 50.66           C
ATOM   3221  N   SER D  11     -53.525  -2.354  -1.296  1.00 48.08           N
ATOM   3222  CA  SER D  11     -53.390  -0.918  -1.083  1.00 46.30           C
ATOM   3223  C   SER D  11     -52.473  -0.687   0.106  1.00 45.35           C
ATOM   3224  O   SER D  11     -52.755  -1.166   1.208  1.00 46.49           O
ATOM   3225  CB  SER D  11     -54.756  -0.268  -0.847  1.00 49.99           C
ATOM   3226  OG  SER D  11     -55.665  -0.614  -1.879  1.00 52.95           O
ATOM   3227  N   GLU D  12     -51.385   0.049  -0.115  1.00 40.10           N
```

[2160]

```
ATOM   3228  CA  GLU D  12     -50.418   0.326   0.934  1.00 38.13           C
ATOM   3229  C   GLU D  12     -49.869   1.735   0.762  1.00 40.94           C
ATOM   3230  O   GLU D  12     -50.028   2.370  -0.284  1.00 48.12           O
ATOM   3231  CB  GLU D  12     -49.277  -0.701   0.929  1.00 31.35           C
ATOM   3232  N   SER D  13     -49.210   2.214   1.810  1.00 41.55           N
ATOM   3233  CA  SER D  13     -48.621   3.540   1.837  1.00 39.63           C
ATOM   3234  C   SER D  13     -47.231   3.523   1.207  1.00 33.31           C
ATOM   3235  O   SER D  13     -46.600   2.468   1.101  1.00 36.36           O
ATOM   3236  CB  SER D  13     -48.542   4.042   3.276  1.00 45.50           C
ATOM   3237  OG  SER D  13     -49.828   4.098   3.867  1.00 52.41           O
ATOM   3238  N   PRO D  14     -46.738   4.679   0.761  1.00 32.10           N
ATOM   3239  CA  PRO D  14     -45.370   4.732   0.232  1.00 34.13           C
ATOM   3240  C   PRO D  14     -44.357   4.304   1.284  1.00 34.43           C
ATOM   3241  O   PRO D  14     -44.492   4.617   2.469  1.00 40.25           O
ATOM   3242  CB  PRO D  14     -45.194   6.207  -0.149  1.00 28.94           C
ATOM   3243  CG  PRO D  14     -46.581   6.709  -0.371  1.00 22.05           C
ATOM   3244  CD  PRO D  14     -47.442   5.964   0.605  1.00 29.08           C
ATOM   3245  N   GLY D  15     -43.337   3.572   0.839  1.00 34.75           N
ATOM   3246  CA  GLY D  15     -42.293   3.093   1.714  1.00 28.95           C
ATOM   3247  C   GLY D  15     -42.503   1.696   2.259  1.00 35.51           C
ATOM   3248  O   GLY D  15     -41.544   1.086   2.745  1.00 34.39           O
ATOM   3249  N   LYS D  16     -43.724   1.172   2.202  1.00 33.75           N
ATOM   3250  CA  LYS D  16     -43.990  -0.165   2.703  1.00 34.85           C
ATOM   3251  C   LYS D  16     -43.514  -1.213   1.698  1.00 38.31           C
ATOM   3252  O   LYS D  16     -43.056  -0.900   0.595  1.00 38.58           O
ATOM   3253  CB  LYS D  16     -45.479  -0.335   2.994  1.00 36.54           C
ATOM   3254  CG  LYS D  16     -46.005   0.548   4.112  1.00 38.99           C
ATOM   3255  CD  LYS D  16     -47.123  -0.138   4.879  1.00 45.76           C
ATOM   3256  CE  LYS D  16     -47.625   0.735   6.019  1.00 46.51           C
ATOM   3257  NZ  LYS D  16     -46.513   1.226   6.878  1.00 37.34           N
ATOM   3258  N   THR D  17     -43.621  -2.480   2.090  1.00 38.24           N
ATOM   3259  CA  THR D  17     -43.289  -3.611   1.234  1.00 38.11           C
ATOM   3260  C   THR D  17     -44.521  -4.490   1.081  1.00 36.62           C
ATOM   3261  O   THR D  17     -45.159  -4.846   2.078  1.00 38.44           O
ATOM   3262  CB  THR D  17     -42.121  -4.417   1.806  1.00 33.18           C
ATOM   3263  OG1 THR D  17     -40.932  -3.617   1.783  1.00 32.12           O
ATOM   3264  CG2 THR D  17     -41.892  -5.680   0.994  1.00 30.28           C
ATOM   3265  N   VAL D  18     -44.858  -4.831  -0.159  1.00 34.89           N
ATOM   3266  CA  VAL D  18     -46.042  -5.628  -0.448  1.00 33.61           C
ATOM   3267  C   VAL D  18     -45.623  -6.879  -1.206  1.00 31.61           C
ATOM   3268  O   VAL D  18     -44.585  -6.908  -1.875  1.00 32.01           O
ATOM   3269  CB  VAL D  18     -47.102  -4.834  -1.245  1.00 35.17           C
ATOM   3270  CG1 VAL D  18     -47.461  -3.554  -0.512  1.00 32.66           C
ATOM   3271  CG2 VAL D  18     -46.608  -4.536  -2.654  1.00 41.96           C
ATOM   3272  N   THR D  19     -46.430  -7.928  -1.073  1.00 30.42           N
ATOM   3273  CA  THR D  19     -46.218  -9.183  -1.779  1.00 32.30           C
ATOM   3274  C   THR D  19     -47.523  -9.586  -2.450  1.00 38.34           C
ATOM   3275  O   THR D  19     -48.582  -9.561  -1.815  1.00 41.14           O
ATOM   3276  CB  THR D  19     -45.740 -10.290  -0.830  1.00 42.33           C
ATOM   3277  OG1 THR D  19     -46.646 -10.404   0.275  1.00 56.38           O
ATOM   3278  CG2 THR D  19     -44.343  -9.981  -0.306  1.00 39.04           C
ATOM   3279  N   ILE D  20     -47.444  -9.951  -3.727  1.00 34.85           N
ATOM   3280  CA  ILE D  20     -48.602 -10.360  -4.513  1.00 31.46           C
ATOM   3281  C   ILE D  20     -48.420 -11.815  -4.918  1.00 39.83           C
ATOM   3282  O   ILE D  20     -47.395 -12.175  -5.509  1.00 42.59           O
ATOM   3283  CB  ILE D  20     -48.791  -9.465  -5.751  1.00 36.88           C
ATOM   3284  CG1 ILE D  20     -48.974  -8.006  -5.329  1.00 37.13           C
ATOM   3285  CG2 ILE D  20     -49.974  -9.942  -6.578  1.00 37.57           C
ATOM   3286  CD1 ILE D  20     -49.085  -7.042  -6.488  1.00 37.67           C
ATOM   3287  N   SER D  21     -49.415 -12.642  -4.612  1.00 38.21           N
ATOM   3288  CA  SER D  21     -49.356 -14.070  -4.881  1.00 35.75           C
ATOM   3289  C   SER D  21     -50.012 -14.412  -6.217  1.00 41.80           C
ATOM   3290  O   SER D  21     -50.768 -13.625  -6.792  1.00 42.61           O
ATOM   3291  CB  SER D  21     -50.023 -14.861  -3.757  1.00 35.13           C
ATOM   3292  OG  SER D  21     -49.253 -14.795  -2.571  1.00 61.45           O
ATOM   3293  N   CYS D  22     -49.708 -15.617  -6.702  1.00 34.57           N
ATOM   3294  CA  CYS D  22     -50.188 -16.082  -8.002  1.00 34.43           C
ATOM   3295  C   CYS D  22     -50.274 -17.603  -7.923  1.00 38.87           C
```

[2161]

```
ATOM   3296  O   CYS D  22     -49.266 -18.291  -8.104  1.00 44.95           O
ATOM   3297  CB  CYS D  22     -49.256 -15.627  -9.117  1.00 41.46           C
ATOM   3298  SG  CYS D  22     -49.632 -16.257 -10.769  1.00 48.20           S
ATOM   3299  N   THR D  23     -51.472 -18.117  -7.660  1.00 39.02           N
ATOM   3300  CA  THR D  23     -51.681 -19.537  -7.413  1.00 37.03           C
ATOM   3301  C   THR D  23     -52.116 -20.243  -8.693  1.00 39.83           C
ATOM   3302  O   THR D  23     -53.040 -19.790  -9.377  1.00 38.51           O
ATOM   3303  CB  THR D  23     -52.728 -19.748  -6.318  1.00 38.01           C
ATOM   3304  OG1 THR D  23     -52.297 -19.098  -5.116  1.00 40.34           O
ATOM   3305  CG2 THR D  23     -52.918 -21.232  -6.043  1.00 31.12           C
ATOM   3306  N   ARG D  24     -51.443 -21.346  -9.011  1.00 40.88           N
ATOM   3307  CA  ARG D  24     -51.789 -22.169 -10.160  1.00 40.56           C
ATOM   3308  C   ARG D  24     -52.771 -23.259  -9.742  1.00 44.38           C
ATOM   3309  O   ARG D  24     -52.603 -23.895  -8.697  1.00 41.28           O
ATOM   3310  CB  ARG D  24     -50.529 -22.788 -10.767  1.00 37.80           C
ATOM   3311  CG  ARG D  24     -50.725 -23.422 -12.136  1.00 46.47           C
ATOM   3312  CD  ARG D  24     -49.463 -24.147 -12.580  1.00 44.94           C
ATOM   3313  NE  ARG D  24     -49.658 -24.895 -13.819  1.00 41.59           N
ATOM   3314  CZ  ARG D  24     -49.087 -24.584 -14.978  1.00 37.22           C
ATOM   3315  NH1 ARG D  24     -48.275 -23.540 -15.060  1.00 37.19           N
ATOM   3316  NH2 ARG D  24     -49.321 -25.322 -16.054  1.00 29.96           N
ATOM   3317  N   SER D  25     -53.803 -23.469 -10.563  1.00 40.07           N
ATOM   3318  CA  SER D  25     -54.871 -24.393 -10.192  1.00 33.09           C
ATOM   3319  C   SER D  25     -54.536 -25.842 -10.528  1.00 41.08           C
ATOM   3320  O   SER D  25     -54.973 -26.753  -9.816  1.00 44.28           O
ATOM   3321  CB  SER D  25     -56.179 -23.987 -10.873  1.00 37.05           C
ATOM   3322  OG  SER D  25     -56.080 -24.092 -12.283  1.00 47.93           O
ATOM   3323  N   SER D  26     -53.787 -26.079 -11.602  1.00 42.84           N
ATOM   3324  CA  SER D  26     -53.435 -27.433 -12.003  1.00 42.99           C
ATOM   3325  C   SER D  26     -52.054 -27.416 -12.642  1.00 50.32           C
ATOM   3326  O   SER D  26     -51.681 -26.458 -13.323  1.00 49.82           O
ATOM   3327  CB  SER D  26     -54.470 -28.028 -12.967  1.00 44.76           C
ATOM   3328  OG  SER D  26     -54.652 -27.202 -14.103  1.00 47.23           O
ATOM   3329  N   GLY D  27     -51.307 -28.487 -12.420  1.00 48.05           N
ATOM   3330  CA  GLY D  27     -49.930 -28.552 -12.885  1.00 39.88           C
ATOM   3331  C   GLY D  27     -48.965 -27.927 -11.898  1.00 45.54           C
ATOM   3332  O   GLY D  27     -49.304 -27.027 -11.130  1.00 46.50           O
ATOM   3333  N   SER D  28     -47.732 -28.429 -11.912  1.00 45.19           N
ATOM   3334  CA  SER D  28     -46.697 -27.946 -11.006  1.00 39.00           C
ATOM   3335  C   SER D  28     -46.164 -26.604 -11.492  1.00 45.22           C
ATOM   3336  O   SER D  28     -45.679 -26.494 -12.623  1.00 42.31           O
ATOM   3337  CB  SER D  28     -45.565 -28.965 -10.895  1.00 40.92           C
ATOM   3338  OG  SER D  28     -46.021 -30.172 -10.308  1.00 53.95           O
ATOM   3339  N   LEU D  29     -46.259 -25.582 -10.635  1.00 47.27           N
ATOM   3340  CA  LEU D  29     -45.738 -24.266 -10.988  1.00 43.40           C
ATOM   3341  C   LEU D  29     -44.225 -24.290 -11.170  1.00 39.20           C
ATOM   3342  O   LEU D  29     -43.680 -23.502 -11.950  1.00 47.51           O
ATOM   3343  CB  LEU D  29     -46.121 -23.244  -9.918  1.00 43.15           C
ATOM   3344  CG  LEU D  29     -45.760 -21.787 -10.211  1.00 35.36           C
ATOM   3345  CD1 LEU D  29     -46.992 -20.990 -10.611  1.00 38.97           C
ATOM   3346  CD2 LEU D  29     -45.069 -21.161  -9.021  1.00 35.96           C
ATOM   3347  N   ALA D  30     -43.532 -25.185 -10.465  1.00 40.20           N
ATOM   3348  CA  ALA D  30     -42.080 -25.255 -10.560  1.00 43.62           C
ATOM   3349  C   ALA D  30     -41.600 -25.849 -11.877  1.00 43.56           C
ATOM   3350  O   ALA D  30     -40.390 -25.857 -12.124  1.00 46.68           O
ATOM   3351  CB  ALA D  30     -41.514 -26.065  -9.391  1.00 39.51           C
ATOM   3352  N   ASN D  31     -42.505 -26.348 -12.717  1.00 41.75           N
ATOM   3353  CA  ASN D  31     -42.133 -26.895 -14.014  1.00 39.27           C
ATOM   3354  C   ASN D  31     -42.176 -25.866 -15.134  1.00 38.56           C
ATOM   3355  O   ASN D  31     -41.722 -26.168 -16.243  1.00 44.56           O
ATOM   3356  CB  ASN D  31     -43.046 -28.068 -14.381  1.00 39.94           C
ATOM   3357  CG  ASN D  31     -42.719 -29.323 -13.607  1.00 31.62           C
ATOM   3358  OD1 ASN D  31     -41.602 -29.492 -13.123  1.00 37.55           O
ATOM   3359  ND2 ASN D  31     -43.692 -30.217 -13.490  1.00 33.67           N
ATOM   3360  N   TYR D  32     -42.702 -24.670 -14.881  1.00 34.65           N
ATOM   3361  CA  TYR D  32     -42.804 -23.645 -15.908  1.00 43.21           C
ATOM   3362  C   TYR D  32     -42.463 -22.290 -15.310  1.00 38.09           C
ATOM   3363  O   TYR D  32     -42.843 -21.991 -14.175  1.00 41.91           O
```

[2162]

```
ATOM   3364  CB  TYR D  32     -44.209 -23.604 -16.522  1.00 43.21           C
ATOM   3365  CG  TYR D  32     -44.763 -24.969 -16.867  1.00 41.44           C
ATOM   3366  CD1 TYR D  32     -45.677 -25.595 -16.032  1.00 40.24           C
ATOM   3367  CD2 TYR D  32     -44.365 -25.633 -18.020  1.00 40.68           C
ATOM   3368  CE1 TYR D  32     -46.186 -26.841 -16.336  1.00 41.89           C
ATOM   3369  CE2 TYR D  32     -44.868 -26.881 -18.333  1.00 47.48           C
ATOM   3370  CZ  TYR D  32     -45.779 -27.481 -17.486  1.00 48.00           C
ATOM   3371  OH  TYR D  32     -46.288 -28.724 -17.787  1.00 44.99           O
ATOM   3372  N   TYR D  33     -41.749 -21.476 -16.083  1.00 35.15           N
ATOM   3373  CA  TYR D  33     -41.351 -20.152 -15.627  1.00 35.17           C
ATOM   3374  C   TYR D  33     -42.568 -19.257 -15.419  1.00 34.14           C
ATOM   3375  O   TYR D  33     -43.614 -19.432 -16.050  1.00 35.13           O
ATOM   3376  CB  TYR D  33     -40.393 -19.512 -16.630  1.00 36.24           C
ATOM   3377  CG  TYR D  33     -38.950 -19.907 -16.430  1.00 35.33           C
ATOM   3378  CD1 TYR D  33     -38.395 -19.959 -15.158  1.00 34.82           C
ATOM   3379  CD2 TYR D  33     -38.145 -20.243 -17.511  1.00 31.85           C
ATOM   3380  CE1 TYR D  33     -37.073 -20.320 -14.969  1.00 31.67           C
ATOM   3381  CE2 TYR D  33     -36.825 -20.608 -17.331  1.00 33.92           C
ATOM   3382  CZ  TYR D  33     -36.295 -20.645 -16.059  1.00 30.95           C
ATOM   3383  OH  TYR D  33     -34.982 -21.008 -15.880  1.00 29.79           O
ATOM   3384  N   VAL D  34     -42.422 -18.294 -14.513  1.00 32.32           N
ATOM   3385  CA  VAL D  34     -43.473 -17.339 -14.187  1.00 33.74           C
ATOM   3386  C   VAL D  34     -42.989 -15.938 -14.529  1.00 33.39           C
ATOM   3387  O   VAL D  34     -41.840 -15.582 -14.249  1.00 39.60           O
ATOM   3388  CB  VAL D  34     -43.880 -17.426 -12.702  1.00 31.30           C
ATOM   3389  CG1 VAL D  34     -45.024 -16.465 -12.407  1.00 27.15           C
ATOM   3390  CG2 VAL D  34     -44.267 -18.854 -12.344  1.00 29.17           C
ATOM   3391  N   GLN D  35     -43.867 -15.148 -15.143  1.00 33.42           N
ATOM   3392  CA  GLN D  35     -43.565 -13.776 -15.522  1.00 35.25           C
ATOM   3393  C   GLN D  35     -44.540 -12.823 -14.844  1.00 33.63           C
ATOM   3394  O   GLN D  35     -45.691 -13.173 -14.571  1.00 33.53           O
ATOM   3395  CB  GLN D  35     -43.628 -13.585 -17.046  1.00 34.19           C
ATOM   3396  CG  GLN D  35     -42.427 -14.130 -17.813  1.00 36.00           C
ATOM   3397  CD  GLN D  35     -42.297 -15.638 -17.726  1.00 34.74           C
ATOM   3398  OE1 GLN D  35     -41.219 -16.163 -17.446  1.00 35.07           O
ATOM   3399  NE2 GLN D  35     -43.397 -16.344 -17.966  1.00 34.22           N
ATOM   3400  N   TRP D  36     -44.068 -11.609 -14.580  1.00 29.06           N
ATOM   3401  CA  TRP D  36     -44.870 -10.560 -13.970  1.00 32.67           C
ATOM   3402  C   TRP D  36     -44.866  -9.335 -14.872  1.00 37.23           C
ATOM   3403  O   TRP D  36     -43.825  -8.961 -15.423  1.00 38.57           O
ATOM   3404  CB  TRP D  36     -44.352 -10.177 -12.574  1.00 36.81           C
ATOM   3405  CG  TRP D  36     -44.529 -11.240 -11.526  1.00 37.35           C
ATOM   3406  CD1 TRP D  36     -43.602 -12.157 -11.120  1.00 38.00           C
ATOM   3407  CD2 TRP D  36     -45.710 -11.497 -10.755  1.00 32.68           C
ATOM   3408  NE1 TRP D  36     -44.130 -12.963 -10.140  1.00 35.03           N
ATOM   3409  CE2 TRP D  36     -45.423 -12.580  -9.899  1.00 34.35           C
ATOM   3410  CE3 TRP D  36     -46.981 -10.916 -10.705  1.00 29.28           C
ATOM   3411  CZ2 TRP D  36     -46.361 -13.094  -9.005  1.00 34.89           C
ATOM   3412  CZ3 TRP D  36     -47.910 -11.425  -9.816  1.00 34.23           C
ATOM   3413  CH2 TRP D  36     -47.595 -12.504  -8.979  1.00 38.09           C
ATOM   3414  N   TYR D  37     -46.032  -8.712 -15.017  1.00 38.87           N
ATOM   3415  CA  TYR D  37     -46.198  -7.562 -15.891  1.00 39.40           C
ATOM   3416  C   TYR D  37     -46.804  -6.410 -15.107  1.00 36.64           C
ATOM   3417  O   TYR D  37     -47.618  -6.611 -14.203  1.00 36.96           O
ATOM   3418  CB  TYR D  37     -47.105  -7.885 -17.084  1.00 40.83           C
ATOM   3419  CG  TYR D  37     -46.682  -9.098 -17.873  1.00 50.93           C
ATOM   3420  CD1 TYR D  37     -45.782  -8.992 -18.925  1.00 52.15           C
ATOM   3421  CD2 TYR D  37     -47.174 -10.356 -17.558  1.00 46.60           C
ATOM   3422  CE1 TYR D  37     -45.401 -10.105 -19.650  1.00 52.19           C
ATOM   3423  CE2 TYR D  37     -46.790 -11.470 -18.271  1.00 47.20           C
ATOM   3424  CZ  TYR D  37     -45.904 -11.341 -19.315  1.00 53.89           C
ATOM   3425  OH  TYR D  37     -45.523 -12.456 -20.027  1.00 53.60           O
ATOM   3426  N   GLN D  38     -46.398  -5.198 -15.466  1.00 36.20           N
ATOM   3427  CA  GLN D  38     -46.919  -3.978 -14.869  1.00 38.35           C
ATOM   3428  C   GLN D  38     -47.685  -3.212 -15.936  1.00 42.13           C
ATOM   3429  O   GLN D  38     -47.172  -3.003 -17.041  1.00 50.84           O
ATOM   3430  CB  GLN D  38     -45.788  -3.123 -14.292  1.00 38.20           C
ATOM   3431  CG  GLN D  38     -46.224  -1.751 -13.812  1.00 42.02           C
```

[2163]

```
ATOM   3432  CD  GLN D  38     -45.057  -0.887 -13.376  1.00 43.13           C
ATOM   3433  OE1 GLN D  38     -44.308  -0.367 -14.204  1.00 44.63           O
ATOM   3434  NE2 GLN D  38     -44.897  -0.727 -12.067  1.00 41.05           N
ATOM   3435  N   GLN D  39     -48.910  -2.803 -15.614  1.00 43.86           N
ATOM   3436  CA  GLN D  39     -49.758  -2.082 -16.555  1.00 52.68           C
ATOM   3437  C   GLN D  39     -50.289  -0.816 -15.903  1.00 58.56           C
ATOM   3438  O   GLN D  39     -50.998  -0.884 -14.894  1.00 56.53           O
ATOM   3439  CB  GLN D  39     -50.919  -2.956 -17.036  1.00 55.79           C
ATOM   3440  CG  GLN D  39     -51.722  -2.335 -18.167  1.00 57.19           C
ATOM   3441  CD  GLN D  39     -52.993  -3.102 -18.469  1.00 56.45           C
ATOM   3442  OE1 GLN D  39     -53.284  -3.410 -19.625  1.00 53.36           O
ATOM   3443  NE2 GLN D  39     -53.761  -3.411 -17.430  1.00 55.86           N
ATOM   3444  N   ARG D  40     -49.955   0.325 -16.484  1.00 68.40           N
ATOM   3445  CA  ARG D  40     -50.437   1.619 -16.028  1.00 71.50           C
ATOM   3446  C   ARG D  40     -51.694   1.998 -16.798  1.00 72.15           C
ATOM   3447  O   ARG D  40     -52.029   1.372 -17.807  1.00 74.06           O
ATOM   3448  CB  ARG D  40     -49.331   2.661 -16.189  1.00 73.17           C
ATOM   3449  CG  ARG D  40     -48.131   2.421 -15.285  1.00 65.11           C
ATOM   3450  CD  ARG D  40     -47.209   3.632 -15.253  1.00 67.54           C
ATOM   3451  NE  ARG D  40     -46.212   3.535 -14.190  1.00 59.37           N
ATOM   3452  CZ  ARG D  40     -45.004   3.002 -14.341  1.00 60.55           C
ATOM   3453  NH1 ARG D  40     -44.633   2.513 -15.516  1.00 64.79           N
ATOM   3454  NH2 ARG D  40     -44.166   2.959 -13.314  1.00 52.25           N
ATOM   3455  N   PRO D  41     -52.446   3.018 -16.330  1.00 79.22           N
ATOM   3456  CA  PRO D  41     -53.675   3.412 -17.038  1.00 82.66           C
ATOM   3457  C   PRO D  41     -53.463   3.732 -18.511  1.00 82.27           C
ATOM   3458  O   PRO D  41     -52.742   4.673 -18.859  1.00 83.29           O
ATOM   3459  CB  PRO D  41     -54.147   4.654 -16.264  1.00 77.94           C
ATOM   3460  CG  PRO D  41     -52.996   5.049 -15.382  1.00 78.82           C
ATOM   3461  CD  PRO D  41     -52.279   3.780 -15.081  1.00 84.12           C
ATOM   3462  N   GLY D  42     -54.090   2.942 -19.382  1.00 79.90           N
ATOM   3463  CA  GLY D  42     -54.010   3.165 -20.811  1.00 83.27           C
ATOM   3464  C   GLY D  42     -52.672   2.857 -21.439  1.00 84.96           C
ATOM   3465  O   GLY D  42     -52.444   3.237 -22.592  1.00 79.25           O
ATOM   3466  N   SER D  43     -51.782   2.174 -20.726  1.00 78.90           N
ATOM   3467  CA  SER D  43     -50.435   1.908 -21.200  1.00 71.22           C
ATOM   3468  C   SER D  43     -50.273   0.443 -21.582  1.00 58.31           C
ATOM   3469  O   SER D  43     -51.042  -0.426 -21.164  1.00 57.56           O
ATOM   3470  CB  SER D  43     -49.401   2.280 -20.132  1.00 67.11           C
ATOM   3471  OG  SER D  43     -49.759   3.485 -19.482  1.00 65.75           O
ATOM   3472  N   SER D  44     -49.248   0.185 -22.389  1.00 54.99           N
ATOM   3473  CA  SER D  44     -48.909  -1.176 -22.756  1.00 55.85           C
ATOM   3474  C   SER D  44     -48.292  -1.903 -21.563  1.00 60.17           C
ATOM   3475  O   SER D  44     -47.592  -1.295 -20.749  1.00 62.52           O
ATOM   3476  CB  SER D  44     -47.934  -1.183 -23.930  1.00 50.81           C
ATOM   3477  OG  SER D  44     -47.387  -2.473 -24.135  1.00 56.36           O
ATOM   3478  N   PRO D  45     -48.545  -3.204 -21.429  1.00 58.82           N
ATOM   3479  CA  PRO D  45     -47.924  -3.963 -20.338  1.00 51.29           C
ATOM   3480  C   PRO D  45     -46.411  -3.992 -20.492  1.00 56.34           C
ATOM   3481  O   PRO D  45     -45.885  -4.225 -21.582  1.00 56.52           O
ATOM   3482  CB  PRO D  45     -48.536  -5.362 -20.483  1.00 54.10           C
ATOM   3483  CG  PRO D  45     -49.793  -5.154 -21.266  1.00 61.98           C
ATOM   3484  CD  PRO D  45     -49.494  -4.023 -22.202  1.00 61.37           C
ATOM   3485  N   THR D  46     -45.712  -3.744 -19.388  1.00 52.14           N
ATOM   3486  CA  THR D  46     -44.260  -3.772 -19.356  1.00 46.91           C
ATOM   3487  C   THR D  46     -43.797  -4.892 -18.435  1.00 47.36           C
ATOM   3488  O   THR D  46     -44.545  -5.372 -17.579  1.00 52.19           O
ATOM   3489  CB  THR D  46     -43.676  -2.431 -18.889  1.00 49.74           C
ATOM   3490  OG1 THR D  46     -42.264  -2.414 -19.130  1.00 63.80           O
ATOM   3491  CG2 THR D  46     -43.926  -2.223 -17.404  1.00 44.29           C
ATOM   3492  N   ILE D  47     -42.559  -5.325 -18.638  1.00 48.87           N
ATOM   3493  CA  ILE D  47     -41.996  -6.442 -17.891  1.00 44.80           C
ATOM   3494  C   ILE D  47     -41.319  -5.919 -16.632  1.00 47.02           C
ATOM   3495  O   ILE D  47     -40.538  -4.961 -16.685  1.00 50.13           O
ATOM   3496  CB  ILE D  47     -41.002  -7.232 -18.758  1.00 47.95           C
ATOM   3497  CG1 ILE D  47     -41.745  -8.173 -19.700  1.00 49.44           C
ATOM   3498  CG2 ILE D  47     -40.049  -8.030 -17.886  1.00 43.96           C
ATOM   3499  CD1 ILE D  47     -42.181  -9.448 -19.026  1.00 47.60           C
```

[2164]

```
ATOM   3500  N   VAL D  48     -41.617  -6.549 -15.497  1.00 40.15           N
ATOM   3501  CA  VAL D  48     -40.943  -6.263 -14.241  1.00 42.68           C
ATOM   3502  C   VAL D  48     -40.106  -7.449 -13.777  1.00 39.31           C
ATOM   3503  O   VAL D  48     -38.976  -7.273 -13.318  1.00 36.25           O
ATOM   3504  CB  VAL D  48     -41.946  -5.828 -13.148  1.00 36.09           C
ATOM   3505  CG1 VAL D  48     -42.367  -4.385 -13.364  1.00 35.04           C
ATOM   3506  CG2 VAL D  48     -43.164  -6.736 -13.137  1.00 39.20           C
ATOM   3507  N   ILE D  49     -40.645  -8.661 -13.887  1.00 36.33           N
ATOM   3508  CA  ILE D  49     -39.937  -9.887 -13.537  1.00 32.17           C
ATOM   3509  C   ILE D  49     -40.276 -10.938 -14.584  1.00 32.66           C
ATOM   3510  O   ILE D  49     -41.447 -11.110 -14.941  1.00 36.08           O
ATOM   3511  CB  ILE D  49     -40.307 -10.393 -12.127  1.00 32.82           C
ATOM   3512  CG1 ILE D  49     -39.811  -9.425 -11.049  1.00 34.49           C
ATOM   3513  CG2 ILE D  49     -39.740 -11.783 -11.884  1.00 28.05           C
ATOM   3514  CD1 ILE D  49     -38.303  -9.389 -10.907  1.00 37.27           C
ATOM   3515  N   PHE D  50     -39.257 -11.630 -15.088  1.00 28.31           N
ATOM   3516  CA  PHE D  50     -39.453 -12.763 -15.978  1.00 35.13           C
ATOM   3517  C   PHE D  50     -38.571 -13.911 -15.511  1.00 35.97           C
ATOM   3518  O   PHE D  50     -37.613 -13.712 -14.760  1.00 34.47           O
ATOM   3519  CB  PHE D  50     -39.141 -12.410 -17.442  1.00 29.25           C
ATOM   3520  CG  PHE D  50     -37.690 -12.139 -17.708  1.00 25.71           C
ATOM   3521  CD1 PHE D  50     -37.145 -10.892 -17.451  1.00 35.47           C
ATOM   3522  CD2 PHE D  50     -36.872 -13.127 -18.228  1.00 27.48           C
ATOM   3523  CE1 PHE D  50     -35.808 -10.640 -17.700  1.00 37.68           C
ATOM   3524  CE2 PHE D  50     -35.536 -12.881 -18.478  1.00 29.68           C
ATOM   3525  CZ  PHE D  50     -35.003 -11.637 -18.214  1.00 29.60           C
ATOM   3526  N   ALA D  51     -38.910 -15.117 -15.963  1.00 37.08           N
ATOM   3527  CA  ALA D  51     -38.189 -16.337 -15.602  1.00 35.03           C
ATOM   3528  C   ALA D  51     -38.026 -16.442 -14.086  1.00 35.91           C
ATOM   3529  O   ALA D  51     -36.918 -16.534 -13.553  1.00 35.95           O
ATOM   3530  CB  ALA D  51     -36.835 -16.403 -16.312  1.00 35.82           C
ATOM   3531  N   ASN D  52     -39.170 -16.398 -13.398  1.00 37.48           N
ATOM   3532  CA  ASN D  52     -39.266 -16.514 -11.945  1.00 35.34           C
ATOM   3533  C   ASN D  52     -38.667 -15.315 -11.217  1.00 40.06           C
ATOM   3534  O   ASN D  52     -39.372 -14.640 -10.459  1.00 40.93           O
ATOM   3535  CB  ASN D  52     -38.610 -17.808 -11.450  1.00 32.25           C
ATOM   3536  CG  ASN D  52     -39.311 -19.049 -11.961  1.00 33.21           C
ATOM   3537  OD1 ASN D  52     -40.423 -18.977 -12.484  1.00 37.91           O
ATOM   3538  ND2 ASN D  52     -38.668 -20.199 -11.798  1.00 34.10           N
ATOM   3539  N   ASN D  53     -37.376 -15.037 -11.424  1.00 36.09           N
ATOM   3540  CA  ASN D  53     -36.714 -13.994 -10.651  1.00 41.55           C
ATOM   3541  C   ASN D  53     -35.817 -13.066 -11.459  1.00 42.78           C
ATOM   3542  O   ASN D  53     -35.188 -12.186 -10.862  1.00 45.96           O
ATOM   3543  CB  ASN D  53     -35.877 -14.622  -9.526  1.00 34.74           C
ATOM   3544  CG  ASN D  53     -34.708 -15.430 -10.053  1.00 39.24           C
ATOM   3545  OD1 ASN D  53     -34.720 -15.889 -11.195  1.00 40.17           O
ATOM   3546  ND2 ASN D  53     -33.686 -15.606  -9.223  1.00 44.82           N
ATOM   3547  N   GLN D  54     -35.724 -13.224 -12.776  1.00 37.74           N
ATOM   3548  CA  GLN D  54     -34.819 -12.388 -13.553  1.00 42.74           C
ATOM   3549  C   GLN D  54     -35.386 -10.982 -13.703  1.00 41.46           C
ATOM   3550  O   GLN D  54     -36.511 -10.799 -14.178  1.00 35.18           O
ATOM   3551  CB  GLN D  54     -34.563 -13.010 -14.924  1.00 34.53           C
ATOM   3552  CG  GLN D  54     -33.897 -14.369 -14.852  1.00 38.42           C
ATOM   3553  CD  GLN D  54     -32.547 -14.314 -14.168  1.00 43.34           C
ATOM   3554  OE1 GLN D  54     -31.590 -13.755 -14.703  1.00 43.47           O
ATOM   3555  NE2 GLN D  54     -32.467 -14.888 -12.972  1.00 45.65           N
ATOM   3556  N   ARG D  55     -34.594  -9.985 -13.303  1.00 43.38           N
ATOM   3557  CA  ARG D  55     -35.003  -8.590 -13.375  1.00 44.56           C
ATOM   3558  C   ARG D  55     -34.323  -7.906 -14.549  1.00 49.73           C
ATOM   3559  O   ARG D  55     -33.087  -7.934 -14.645  1.00 57.68           O
ATOM   3560  CB  ARG D  55     -34.656  -7.869 -12.076  1.00 42.75           C
ATOM   3561  CG  ARG D  55     -35.143  -6.435 -11.994  1.00 39.02           C
ATOM   3562  CD  ARG D  55     -34.896  -5.859 -10.609  1.00 40.34           C
ATOM   3563  NE  ARG D  55     -33.813  -6.546  -9.910  1.00 43.23           N
ATOM   3564  CZ  ARG D  55     -32.544  -6.149  -9.913  1.00 44.29           C
ATOM   3565  NH1 ARG D  55     -32.188  -5.062 -10.583  1.00 44.53           N
ATOM   3566  NH2 ARG D  55     -31.630  -6.841  -9.246  1.00 43.53           N
ATOM   3567  N   PRO D  56     -35.082  -7.288 -15.449  1.00 46.18           N
```

[2165]

```
ATOM   3568  CA  PRO D  56     -34.475  -6.639 -16.616  1.00 46.95           C
ATOM   3569  C   PRO D  56     -33.717  -5.378 -16.230  1.00 53.47           C
ATOM   3570  O   PRO D  56     -33.737  -4.918 -15.086  1.00 53.26           O
ATOM   3571  CB  PRO D  56     -35.676  -6.304 -17.508  1.00 45.84           C
ATOM   3572  CG  PRO D  56     -36.812  -7.110 -16.962  1.00 43.53           C
ATOM   3573  CD  PRO D  56     -36.551  -7.260 -15.506  1.00 43.84           C
ATOM   3574  N   SER D  57     -33.030  -4.820 -17.223  1.00 59.67           N
ATOM   3575  CA  SER D  57     -32.356  -3.541 -17.057  1.00 58.13           C
ATOM   3576  C   SER D  57     -33.381  -2.419 -17.140  1.00 50.96           C
ATOM   3577  O   SER D  57     -34.160  -2.346 -18.096  1.00 49.11           O
ATOM   3578  CB  SER D  57     -31.275  -3.360 -18.122  1.00 57.20           C
ATOM   3579  N   GLY D  58     -33.386  -1.550 -16.134  1.00 47.90           N
ATOM   3580  CA  GLY D  58     -34.350  -0.474 -16.040  1.00 46.64           C
ATOM   3581  C   GLY D  58     -35.382  -0.661 -14.953  1.00 47.95           C
ATOM   3582  O   GLY D  58     -36.115   0.289 -14.646  1.00 49.67           O
ATOM   3583  N   VAL D  59     -35.468  -1.847 -14.364  1.00 42.89           N
ATOM   3584  CA  VAL D  59     -36.397  -2.129 -13.274  1.00 43.70           C
ATOM   3585  C   VAL D  59     -35.614  -2.068 -11.966  1.00 39.17           C
ATOM   3586  O   VAL D  59     -34.610  -2.783 -11.829  1.00 42.06           O
ATOM   3587  CB  VAL D  59     -37.072  -3.497 -13.450  1.00 46.84           C
ATOM   3588  CG1 VAL D  59     -38.084  -3.740 -12.339  1.00 44.04           C
ATOM   3589  CG2 VAL D  59     -37.740  -3.583 -14.812  1.00 36.70           C
ATOM   3590  N   PRO D  60     -36.025  -1.248 -11.000  1.00 39.98           N
ATOM   3591  CA  PRO D  60     -35.253  -1.127  -9.757  1.00 38.40           C
ATOM   3592  C   PRO D  60     -35.230  -2.429  -8.970  1.00 43.76           C
ATOM   3593  O   PRO D  60     -36.129  -3.266  -9.080  1.00 44.26           O
ATOM   3594  CB  PRO D  60     -35.987  -0.022  -8.989  1.00 40.29           C
ATOM   3595  CG  PRO D  60     -37.361   0.005  -9.575  1.00 44.35           C
ATOM   3596  CD  PRO D  60     -37.196  -0.358 -11.018  1.00 40.23           C
ATOM   3597  N   ASP D  61     -34.179  -2.586  -8.160  1.00 45.77           N
ATOM   3598  CA  ASP D  61     -33.968  -3.818  -7.408  1.00 39.93           C
ATOM   3599  C   ASP D  61     -35.057  -4.082  -6.377  1.00 41.02           C
ATOM   3600  O   ASP D  61     -35.116  -5.193  -5.839  1.00 39.65           O
ATOM   3601  CB  ASP D  61     -32.606  -3.786  -6.712  1.00 47.50           C
ATOM   3602  CG  ASP D  61     -32.450  -2.594  -5.786  1.00 55.78           C
ATOM   3603  OD1 ASP D  61     -33.349  -1.727  -5.764  1.00 56.43           O
ATOM   3604  OD2 ASP D  61     -31.423  -2.526  -5.076  1.00 54.90           O
ATOM   3605  N   ARG D  62     -35.905  -3.097  -6.076  1.00 34.85           N
ATOM   3606  CA  ARG D  62     -36.983  -3.332  -5.125  1.00 37.04           C
ATOM   3607  C   ARG D  62     -38.007  -4.324  -5.659  1.00 40.25           C
ATOM   3608  O   ARG D  62     -38.707  -4.963  -4.865  1.00 43.14           O
ATOM   3609  CB  ARG D  62     -37.680  -2.024  -4.761  1.00 36.49           C
ATOM   3610  CG  ARG D  62     -38.212  -1.223  -5.930  1.00 40.81           C
ATOM   3611  CD  ARG D  62     -38.851   0.068  -5.442  1.00 38.17           C
ATOM   3612  NE  ARG D  62     -39.576   0.753  -6.507  1.00 37.81           N
ATOM   3613  CZ  ARG D  62     -39.105   1.795  -7.181  1.00 44.44           C
ATOM   3614  NH1 ARG D  62     -37.902   2.281  -6.901  1.00 46.04           N
ATOM   3615  NH2 ARG D  62     -39.836   2.351  -8.138  1.00 51.89           N
ATOM   3616  N   PHE D  63     -38.119  -4.457  -6.978  1.00 35.94           N
ATOM   3617  CA  PHE D  63     -38.922  -5.513  -7.573  1.00 32.30           C
ATOM   3618  C   PHE D  63     -38.158  -6.829  -7.519  1.00 29.18           C
ATOM   3619  O   PHE D  63     -36.960  -6.878  -7.808  1.00 41.82           O
ATOM   3620  CB  PHE D  63     -39.266  -5.171  -9.022  1.00 38.41           C
ATOM   3621  CG  PHE D  63     -40.224  -4.026  -9.167  1.00 31.05           C
ATOM   3622  CD1 PHE D  63     -39.761  -2.722  -9.216  1.00 33.72           C
ATOM   3623  CD2 PHE D  63     -41.588  -4.254  -9.262  1.00 31.88           C
ATOM   3624  CE1 PHE D  63     -40.642  -1.664  -9.352  1.00 39.97           C
ATOM   3625  CE2 PHE D  63     -42.473  -3.201  -9.400  1.00 32.68           C
ATOM   3626  CZ  PHE D  63     -41.999  -1.905  -9.445  1.00 36.63           C
ATOM   3627  N   SER D  64     -38.858  -7.901  -7.157  1.00 25.87           N
ATOM   3628  CA  SER D  64     -38.222  -9.207  -7.053  1.00 32.11           C
ATOM   3629  C   SER D  64     -39.284 -10.292  -7.146  1.00 31.66           C
ATOM   3630  O   SER D  64     -40.428 -10.098  -6.728  1.00 35.59           O
ATOM   3631  CB  SER D  64     -37.430  -9.344  -5.746  1.00 34.37           C
ATOM   3632  OG  SER D  64     -38.270  -9.177  -4.618  1.00 41.31           O
ATOM   3633  N   GLY D  65     -38.888 -11.436  -7.697  1.00 31.29           N
ATOM   3634  CA  GLY D  65     -39.782 -12.566  -7.856  1.00 31.20           C
ATOM   3635  C   GLY D  65     -39.302 -13.772  -7.071  1.00 32.76           C
```

[2166]

```
ATOM   3636  O   GLY D  65     -38.109 -13.924  -6.801  1.00 36.07           O
ATOM   3637  N   SER D  66     -40.248 -14.636  -6.709  1.00 28.14           N
ATOM   3638  CA  SER D  66     -39.935 -15.835  -5.947  1.00 28.44           C
ATOM   3639  C   SER D  66     -40.964 -16.908  -6.269  1.00 32.78           C
ATOM   3640  O   SER D  66     -42.069 -16.618  -6.734  1.00 34.34           O
ATOM   3641  CB  SER D  66     -39.905 -15.552  -4.440  1.00 27.73           C
ATOM   3642  OG  SER D  66     -41.176 -15.127  -3.980  1.00 32.24           O
ATOM   3643  N   ILE D  67     -40.585 -18.159  -6.008  1.00 36.73           N
ATOM   3644  CA  ILE D  67     -41.416 -19.319  -6.304  1.00 34.32           C
ATOM   3645  C   ILE D  67     -41.559 -20.158  -5.041  1.00 38.63           C
ATOM   3646  O   ILE D  67     -40.603 -20.308  -4.272  1.00 45.67           O
ATOM   3647  CB  ILE D  67     -40.814 -20.161  -7.452  1.00 37.67           C
ATOM   3648  CG1 ILE D  67     -40.719 -19.334  -8.736  1.00 32.14           C
ATOM   3649  CG2 ILE D  67     -41.634 -21.417  -7.704  1.00 44.88           C
ATOM   3650  CD1 ILE D  67     -42.057 -18.861  -9.252  1.00 29.20           C
ATOM   3651  N   ASP D  68     -42.756 -20.700  -4.825  1.00 38.47           N
ATOM   3652  CA  ASP D  68     -43.029 -21.629  -3.730  1.00 39.13           C
ATOM   3653  C   ASP D  68     -43.611 -22.893  -4.356  1.00 40.08           C
ATOM   3654  O   ASP D  68     -44.798 -22.938  -4.695  1.00 39.03           O
ATOM   3655  CB  ASP D  68     -43.978 -21.014  -2.704  1.00 43.29           C
ATOM   3656  CG  ASP D  68     -44.182 -21.901  -1.486  1.00 53.80           C
ATOM   3657  OD1 ASP D  68     -43.453 -22.907  -1.341  1.00 51.00           O
ATOM   3658  OD2 ASP D  68     -45.069 -21.585  -0.666  1.00 57.04           O
ATOM   3659  N   SER D  69     -42.777 -23.925  -4.498  1.00 38.37           N
ATOM   3660  CA  SER D  69     -43.225 -25.142  -5.164  1.00 40.98           C
ATOM   3661  C   SER D  69     -44.224 -25.922  -4.318  1.00 45.95           C
ATOM   3662  O   SER D  69     -45.107 -26.590  -4.867  1.00 48.54           O
ATOM   3663  CB  SER D  69     -42.026 -26.023  -5.508  1.00 43.85           C
ATOM   3664  OG  SER D  69     -42.442 -27.218  -6.146  1.00 58.72           O
ATOM   3665  N   SER D  70     -44.103 -25.858  -2.990  1.00 45.07           N
ATOM   3666  CA  SER D  70     -45.019 -26.606  -2.134  1.00 46.14           C
ATOM   3667  C   SER D  70     -46.433 -26.043  -2.205  1.00 47.40           C
ATOM   3668  O   SER D  70     -47.408 -26.802  -2.213  1.00 47.66           O
ATOM   3669  CB  SER D  70     -44.514 -26.605  -0.691  1.00 50.54           C
ATOM   3670  OG  SER D  70     -43.287 -27.303  -0.582  1.00 59.13           O
ATOM   3671  N   SER D  71     -46.565 -24.720  -2.274  1.00 42.49           N
ATOM   3672  CA  SER D  71     -47.869 -24.081  -2.385  1.00 40.14           C
ATOM   3673  C   SER D  71     -48.300 -23.866  -3.828  1.00 43.02           C
ATOM   3674  O   SER D  71     -49.419 -23.396  -4.059  1.00 36.27           O
ATOM   3675  CB  SER D  71     -47.863 -22.739  -1.647  1.00 46.41           C
ATOM   3676  OG  SER D  71     -49.111 -22.080  -1.772  1.00 51.95           O
ATOM   3677  N   ASN D  72     -47.441 -24.200  -4.794  1.00 38.35           N
ATOM   3678  CA  ASN D  72     -47.749 -24.065  -6.217  1.00 39.72           C
ATOM   3679  C   ASN D  72     -48.155 -22.634  -6.561  1.00 43.36           C
ATOM   3680  O   ASN D  72     -49.131 -22.400  -7.277  1.00 39.14           O
ATOM   3681  CB  ASN D  72     -48.836 -25.056  -6.639  1.00 39.76           C
ATOM   3682  CG  ASN D  72     -48.682 -25.511  -8.072  1.00 38.76           C
ATOM   3683  OD1 ASN D  72     -47.567 -25.705  -8.556  1.00 40.51           O
ATOM   3684  ND2 ASN D  72     -49.801 -25.682  -8.763  1.00 50.01           N
ATOM   3685  N   SER D  73     -47.404 -21.667  -6.038  1.00 40.00           N
ATOM   3686  CA  SER D  73     -47.722 -20.260  -6.221  1.00 36.90           C
ATOM   3687  C   SER D  73     -46.441 -19.463  -6.417  1.00 36.81           C
ATOM   3688  O   SER D  73     -45.350 -19.890  -6.030  1.00 36.74           O
ATOM   3689  CB  SER D  73     -48.512 -19.699  -5.031  1.00 40.50           C
ATOM   3690  OG  SER D  73     -47.791 -19.861  -3.822  1.00 42.32           O
ATOM   3691  N   ALA D  74     -46.591 -18.292  -7.029  1.00 39.99           N
ATOM   3692  CA  ALA D  74     -45.499 -17.356  -7.245  1.00 36.83           C
ATOM   3693  C   ALA D  74     -45.786 -16.060  -6.500  1.00 32.86           C
ATOM   3694  O   ALA D  74     -46.936 -15.739  -6.193  1.00 37.79           O
ATOM   3695  CB  ALA D  74     -45.291 -17.072  -8.740  1.00 32.48           C
ATOM   3696  N   SER D  75     -44.724 -15.312  -6.206  1.00 32.69           N
ATOM   3697  CA  SER D  75     -44.849 -14.073  -5.450  1.00 34.06           C
ATOM   3698  C   SER D  75     -44.003 -12.984  -6.091  1.00 36.91           C
ATOM   3699  O   SER D  75     -42.851 -13.225  -6.464  1.00 36.14           O
ATOM   3700  CB  SER D  75     -44.428 -14.263  -3.986  1.00 34.67           C
ATOM   3701  OG  SER D  75     -45.396 -15.004  -3.264  1.00 42.63           O
ATOM   3702  N   LEU D  76     -44.585 -11.795  -6.221  1.00 32.85           N
ATOM   3703  CA  LEU D  76     -43.871 -10.589  -6.621  1.00 30.26           C
```

[2167]

```
ATOM   3704  C   LEU D  76     -43.754  -9.682  -5.404  1.00 30.62           C
ATOM   3705  O   LEU D  76     -44.767  -9.332  -4.788  1.00 31.21           O
ATOM   3706  CB  LEU D  76     -44.590  -9.871  -7.762  1.00 33.62           C
ATOM   3707  CG  LEU D  76     -44.071  -8.467  -8.087  1.00 31.36           C
ATOM   3708  CD1 LEU D  76     -42.695  -8.527  -8.732  1.00 31.86           C
ATOM   3709  CD2 LEU D  76     -45.052  -7.723  -8.974  1.00 34.36           C
ATOM   3710  N   THR D  77     -42.528  -9.314  -5.052  1.00 32.01           N
ATOM   3711  CA  THR D  77     -42.264  -8.503  -3.871  1.00 30.29           C
ATOM   3712  C   THR D  77     -41.791  -7.122  -4.304  1.00 32.51           C
ATOM   3713  O   THR D  77     -40.773  -6.999  -4.993  1.00 36.26           O
ATOM   3714  CB  THR D  77     -41.221  -9.171  -2.976  1.00 33.57           C
ATOM   3715  OG1 THR D  77     -41.643 -10.507  -2.674  1.00 42.98           O
ATOM   3716  CG2 THR D  77     -41.055  -8.391  -1.680  1.00 35.05           C
ATOM   3717  N   ILE D  78     -42.533  -6.094  -3.905  1.00 33.73           N
ATOM   3718  CA  ILE D  78     -42.183  -4.704  -4.175  1.00 35.72           C
ATOM   3719  C   ILE D  78     -41.845  -4.066  -2.833  1.00 36.79           C
ATOM   3720  O   ILE D  78     -42.738  -3.736  -2.045  1.00 40.21           O
ATOM   3721  CB  ILE D  78     -43.309  -3.951  -4.892  1.00 36.23           C
ATOM   3722  CG1 ILE D  78     -43.808  -4.757  -6.093  1.00 35.63           C
ATOM   3723  CG2 ILE D  78     -42.829  -2.581  -5.342  1.00 36.88           C
ATOM   3724  CD1 ILE D  78     -44.929  -4.087  -6.858  1.00 33.27           C
ATOM   3725  N   SER D  79     -40.554  -3.896  -2.564  1.00 41.61           N
ATOM   3726  CA  SER D  79     -40.096  -3.278  -1.327  1.00 38.81           C
ATOM   3727  C   SER D  79     -39.973  -1.771  -1.501  1.00 38.97           C
ATOM   3728  O   SER D  79     -39.611  -1.286  -2.574  1.00 40.87           O
ATOM   3729  CB  SER D  79     -38.752  -3.866  -0.899  1.00 37.22           C
ATOM   3730  OG  SER D  79     -38.277  -3.238   0.280  1.00 49.32           O
ATOM   3731  N   GLY D  80     -40.290  -1.030  -0.441  1.00 40.34           N
ATOM   3732  CA  GLY D  80     -40.225   0.418  -0.497  1.00 38.60           C
ATOM   3733  C   GLY D  80     -41.108   1.001  -1.581  1.00 38.76           C
ATOM   3734  O   GLY D  80     -40.610   1.508  -2.590  1.00 35.93           O
ATOM   3735  N   LEU D  81     -42.421   0.934  -1.378  1.00 38.48           N
ATOM   3736  CA  LEU D  81     -43.367   1.400  -2.378  1.00 38.37           C
ATOM   3737  C   LEU D  81     -43.180   2.888  -2.665  1.00 40.27           C
ATOM   3738  O   LEU D  81     -42.659   3.652  -1.848  1.00 38.24           O
ATOM   3739  CB  LEU D  81     -44.801   1.145  -1.913  1.00 43.48           C
ATOM   3740  CG  LEU D  81     -45.494  -0.130  -2.390  1.00 45.78           C
ATOM   3741  CD1 LEU D  81     -46.968  -0.098  -2.015  1.00 38.28           C
ATOM   3742  CD2 LEU D  81     -45.325  -0.302  -3.890  1.00 40.03           C
ATOM   3743  N   LYS D  82     -43.619   3.291  -3.854  1.00 49.19           N
ATOM   3744  CA  LYS D  82     -43.675   4.694  -4.231  1.00 47.09           C
ATOM   3745  C   LYS D  82     -44.753   4.864  -5.290  1.00 44.22           C
ATOM   3746  O   LYS D  82     -45.300   3.890  -5.812  1.00 41.00           O
ATOM   3747  CB  LYS D  82     -42.318   5.209  -4.719  1.00 41.49           C
ATOM   3748  CG  LYS D  82     -41.602   4.302  -5.691  1.00 43.50           C
ATOM   3749  CD  LYS D  82     -40.199   4.822  -5.946  1.00 44.59           C
ATOM   3750  CE  LYS D  82     -39.414   4.932  -4.651  1.00 41.44           C
ATOM   3751  NZ  LYS D  82     -38.017   5.390  -4.885  1.00 52.32           N
ATOM   3752  N   THR D  83     -45.056   6.128  -5.598  1.00 50.22           N
ATOM   3753  CA  THR D  83     -46.175   6.436  -6.484  1.00 45.97           C
ATOM   3754  C   THR D  83     -46.007   5.798  -7.857  1.00 44.02           C
ATOM   3755  O   THR D  83     -46.999   5.402  -8.480  1.00 46.41           O
ATOM   3756  CB  THR D  83     -46.330   7.954  -6.612  1.00 52.03           C
ATOM   3757  OG1 THR D  83     -46.461   8.532  -5.306  1.00 47.44           O
ATOM   3758  CG2 THR D  83     -47.562   8.308  -7.437  1.00 55.57           C
ATOM   3759  N   GLU D  84     -44.766   5.662  -8.331  1.00 49.34           N
ATOM   3760  CA  GLU D  84     -44.534   5.106  -9.660  1.00 41.87           C
ATOM   3761  C   GLU D  84     -45.003   3.660  -9.755  1.00 42.92           C
ATOM   3762  O   GLU D  84     -45.453   3.223 -10.820  1.00 45.05           O
ATOM   3763  CB  GLU D  84     -43.047   5.184 -10.016  1.00 45.14           C
ATOM   3764  CG  GLU D  84     -42.448   6.585 -10.043  1.00 52.41           C
ATOM   3765  CD  GLU D  84     -42.149   7.132  -8.653  1.00 52.89           C
ATOM   3766  OE1 GLU D  84     -43.086   7.261  -7.836  1.00 48.32           O
ATOM   3767  OE2 GLU D  84     -40.967   7.424  -8.374  1.00 58.68           O
ATOM   3768  N   ASP D  85     -44.908   2.908  -8.656  1.00 42.26           N
ATOM   3769  CA  ASP D  85     -45.283   1.499  -8.648  1.00 38.03           C
ATOM   3770  C   ASP D  85     -46.786   1.279  -8.749  1.00 37.30           C
ATOM   3771  O   ASP D  85     -47.211   0.150  -9.018  1.00 34.84           O
```

[2168]

```
ATOM   3772  CB  ASP D  85     -44.750   0.831  -7.381  1.00 35.51           C
ATOM   3773  CG  ASP D  85     -43.274   1.092  -7.163  1.00 43.40           C
ATOM   3774  OD1 ASP D  85     -42.545   1.255  -8.164  1.00 43.12           O
ATOM   3775  OD2 ASP D  85     -42.844   1.144  -5.991  1.00 43.86           O
ATOM   3776  N   GLU D  86     -47.594   2.317  -8.537  1.00 35.77           N
ATOM   3777  CA  GLU D  86     -49.043   2.183  -8.609  1.00 39.33           C
ATOM   3778  C   GLU D  86     -49.487   1.808 -10.017  1.00 45.85           C
ATOM   3779  O   GLU D  86     -49.448   2.642 -10.929  1.00 44.55           O
ATOM   3780  CB  GLU D  86     -49.719   3.478  -8.158  1.00 38.48           C
ATOM   3781  CG  GLU D  86     -51.235   3.408  -8.132  1.00 44.81           C
ATOM   3782  CD  GLU D  86     -51.858   4.601  -7.435  1.00 59.39           C
ATOM   3783  OE1 GLU D  86     -51.119   5.554  -7.107  1.00 68.90           O
ATOM   3784  OE2 GLU D  86     -53.083   4.578  -7.197  1.00 59.70           O
ATOM   3785  N   ALA D  87     -49.903   0.560 -10.203  1.00 37.58           N
ATOM   3786  CA  ALA D  87     -50.323   0.053 -11.506  1.00 42.09           C
ATOM   3787  C   ALA D  87     -50.986  -1.302 -11.293  1.00 42.41           C
ATOM   3788  O   ALA D  87     -51.075  -1.801 -10.167  1.00 41.66           O
ATOM   3789  CB  ALA D  87     -49.141  -0.053 -12.471  1.00 52.02           C
ATOM   3790  N   ASP D  88     -51.468  -1.888 -12.387  1.00 46.27           N
ATOM   3791  CA  ASP D  88     -51.981  -3.251 -12.371  1.00 44.52           C
ATOM   3792  C   ASP D  88     -50.836  -4.230 -12.589  1.00 42.71           C
ATOM   3793  O   ASP D  88     -49.923  -3.971 -13.379  1.00 40.72           O
ATOM   3794  CB  ASP D  88     -53.054  -3.449 -13.442  1.00 43.85           C
ATOM   3795  CG  ASP D  88     -54.332  -2.694 -13.133  1.00 49.67           C
ATOM   3796  OD1 ASP D  88     -54.608  -2.462 -11.938  1.00 42.92           O
ATOM   3797  OD2 ASP D  88     -55.064  -2.339 -14.083  1.00 59.01           O
ATOM   3798  N   TYR D  89     -50.890  -5.359 -11.887  1.00 39.45           N
ATOM   3799  CA  TYR D  89     -49.841  -6.369 -11.958  1.00 39.23           C
ATOM   3800  C   TYR D  89     -50.453  -7.718 -12.297  1.00 39.52           C
ATOM   3801  O   TYR D  89     -51.310  -8.218 -11.561  1.00 41.32           O
ATOM   3802  CB  TYR D  89     -49.060  -6.440 -10.644  1.00 35.57           C
ATOM   3803  CG  TYR D  89     -48.179  -5.235 -10.410  1.00 32.22           C
ATOM   3804  CD1 TYR D  89     -48.694  -4.071  -9.855  1.00 34.83           C
ATOM   3805  CD2 TYR D  89     -46.836  -5.256 -10.755  1.00 29.48           C
ATOM   3806  CE1 TYR D  89     -47.893  -2.964  -9.644  1.00 35.21           C
ATOM   3807  CE2 TYR D  89     -46.027  -4.155 -10.548  1.00 31.28           C
ATOM   3808  CZ  TYR D  89     -46.561  -3.012  -9.993  1.00 33.24           C
ATOM   3809  OH  TYR D  89     -45.759  -1.914  -9.785  1.00 32.34           O
ATOM   3810  N   TYR D  90     -50.013  -8.302 -13.408  1.00 36.66           N
ATOM   3811  CA  TYR D  90     -50.470  -9.607 -13.858  1.00 44.18           C
ATOM   3812  C   TYR D  90     -49.327 -10.608 -13.773  1.00 36.60           C
ATOM   3813  O   TYR D  90     -48.177 -10.278 -14.081  1.00 33.27           O
ATOM   3814  CB  TYR D  90     -50.985  -9.554 -15.302  1.00 42.03           C
ATOM   3815  CG  TYR D  90     -52.176  -8.651 -15.521  1.00 39.66           C
ATOM   3816  CD1 TYR D  90     -52.013  -7.284 -15.691  1.00 41.84           C
ATOM   3817  CD2 TYR D  90     -53.463  -9.169 -15.569  1.00 45.28           C
ATOM   3818  CE1 TYR D  90     -53.099  -6.454 -15.896  1.00 43.90           C
ATOM   3819  CE2 TYR D  90     -54.556  -8.347 -15.772  1.00 51.07           C
ATOM   3820  CZ  TYR D  90     -54.367  -6.990 -15.934  1.00 46.44           C
ATOM   3821  OH  TYR D  90     -55.451  -6.166 -16.136  1.00 50.43           O
ATOM   3822  N   CYS D  91     -49.640 -11.826 -13.349  1.00 31.89           N
ATOM   3823  CA  CYS D  91     -48.705 -12.932 -13.479  1.00 38.35           C
ATOM   3824  C   CYS D  91     -49.076 -13.780 -14.689  1.00 36.49           C
ATOM   3825  O   CYS D  91     -50.219 -13.781 -15.152  1.00 34.70           O
ATOM   3826  CB  CYS D  91     -48.676 -13.803 -12.221  1.00 32.14           C
ATOM   3827  SG  CYS D  91     -50.231 -14.608 -11.795  1.00 47.44           S
ATOM   3828  N   GLN D  92     -48.086 -14.503 -15.202  1.00 27.45           N
ATOM   3829  CA  GLN D  92     -48.287 -15.318 -16.390  1.00 37.76           C
ATOM   3830  C   GLN D  92     -47.318 -16.489 -16.371  1.00 39.50           C
ATOM   3831  O   GLN D  92     -46.128 -16.312 -16.093  1.00 34.44           O
ATOM   3832  CB  GLN D  92     -48.101 -14.489 -17.665  1.00 35.24           C
ATOM   3833  CG  GLN D  92     -48.080 -15.293 -18.950  1.00 37.71           C
ATOM   3834  CD  GLN D  92     -46.686 -15.398 -19.538  1.00 40.24           C
ATOM   3835  OE1 GLN D  92     -45.693 -15.363 -18.813  1.00 39.77           O
ATOM   3836  NE2 GLN D  92     -46.604 -15.519 -20.857  1.00 43.09           N
ATOM   3837  N   THR D  93     -47.841 -17.677 -16.654  1.00 38.17           N
ATOM   3838  CA  THR D  93     -47.030 -18.868 -16.853  1.00 35.46           C
ATOM   3839  C   THR D  93     -47.647 -19.645 -18.008  1.00 36.84           C
```

[2169]

```
ATOM   3840  O   THR D  93     -48.531 -19.148 -18.713  1.00 38.82           O
ATOM   3841  CB  THR D  93     -46.928 -19.701 -15.569  1.00 32.19           C
ATOM   3842  OG1 THR D  93     -46.057 -20.816 -15.796  1.00 38.49           O
ATOM   3843  CG2 THR D  93     -48.293 -20.212 -15.153  1.00 35.15           C
ATOM   3844  N   TYR D  94     -47.187 -20.874 -18.211  1.00 34.54           N
ATOM   3845  CA  TYR D  94     -47.556 -21.605 -19.411  1.00 37.71           C
ATOM   3846  C   TYR D  94     -47.561 -23.099 -19.129  1.00 40.82           C
ATOM   3847  O   TYR D  94     -47.120 -23.564 -18.076  1.00 49.30           O
ATOM   3848  CB  TYR D  94     -46.598 -21.283 -20.562  1.00 37.02           C
ATOM   3849  CG  TYR D  94     -45.143 -21.494 -20.204  1.00 35.28           C
ATOM   3850  CD1 TYR D  94     -44.395 -20.474 -19.628  1.00 36.07           C
ATOM   3851  CD2 TYR D  94     -44.521 -22.715 -20.432  1.00 32.12           C
ATOM   3852  CE1 TYR D  94     -43.067 -20.662 -19.294  1.00 34.46           C
ATOM   3853  CE2 TYR D  94     -43.194 -22.913 -20.099  1.00 35.18           C
ATOM   3854  CZ  TYR D  94     -42.473 -21.882 -19.531  1.00 35.04           C
ATOM   3855  OH  TYR D  94     -41.153 -22.073 -19.200  1.00 35.64           O
ATOM   3856  N   ASP D  95     -48.085 -23.840 -20.092  1.00 41.70           N
ATOM   3857  CA  ASP D  95     -47.983 -25.288 -20.179  1.00 44.79           C
ATOM   3858  C   ASP D  95     -47.521 -25.592 -21.592  1.00 44.59           C
ATOM   3859  O   ASP D  95     -47.433 -24.689 -22.430  1.00 44.69           O
ATOM   3860  CB  ASP D  95     -49.334 -25.956 -19.863  1.00 44.24           C
ATOM   3861  CG  ASP D  95     -50.330 -25.831 -20.995  1.00 45.51           C
ATOM   3862  OD1 ASP D  95     -50.366 -24.771 -21.647  1.00 48.33           O
ATOM   3863  OD2 ASP D  95     -51.084 -26.798 -21.229  1.00 49.30           O
ATOM   3864  N   PRO D  96     -47.195 -26.858 -21.901  1.00 49.83           N
ATOM   3865  CA  PRO D  96     -46.699 -27.167 -23.254  1.00 48.32           C
ATOM   3866  C   PRO D  96     -47.660 -26.836 -24.391  1.00 45.28           C
ATOM   3867  O   PRO D  96     -47.338 -27.101 -25.554  1.00 50.90           O
ATOM   3868  CB  PRO D  96     -46.441 -28.678 -23.191  1.00 45.58           C
ATOM   3869  CG  PRO D  96     -46.170 -28.951 -21.766  1.00 52.71           C
ATOM   3870  CD  PRO D  96     -47.017 -27.999 -20.982  1.00 46.53           C
ATOM   3871  N   TYR D  97     -48.829 -26.265 -24.096  1.00 42.02           N
ATOM   3872  CA  TYR D  97     -49.837 -26.085 -25.134  1.00 42.19           C
ATOM   3873  C   TYR D  97     -50.454 -24.690 -25.140  1.00 46.31           C
ATOM   3874  O   TYR D  97     -50.838 -24.189 -26.202  1.00 49.66           O
ATOM   3875  CB  TYR D  97     -50.922 -27.152 -24.974  1.00 46.18           C
ATOM   3876  CG  TYR D  97     -50.332 -28.510 -24.677  1.00 52.29           C
ATOM   3877  CD1 TYR D  97     -49.783 -29.287 -25.688  1.00 45.97           C
ATOM   3878  CD2 TYR D  97     -50.288 -28.997 -23.377  1.00 51.09           C
ATOM   3879  CE1 TYR D  97     -49.225 -30.520 -25.415  1.00 51.70           C
ATOM   3880  CE2 TYR D  97     -49.733 -30.228 -23.094  1.00 50.42           C
ATOM   3881  CZ  TYR D  97     -49.201 -30.984 -24.115  1.00 57.47           C
ATOM   3882  OH  TYR D  97     -48.649 -32.213 -23.836  1.00 60.82           O
ATOM   3883  N   SER D  98     -50.570 -24.055 -23.974  1.00 41.39           N
ATOM   3884  CA  SER D  98     -51.252 -22.772 -23.877  1.00 39.38           C
ATOM   3885  C   SER D  98     -50.460 -21.819 -22.992  1.00 40.11           C
ATOM   3886  O   SER D  98     -49.493 -22.202 -22.328  1.00 41.09           O
ATOM   3887  CB  SER D  98     -52.676 -22.937 -23.331  1.00 40.41           C
ATOM   3888  OG  SER D  98     -52.662 -23.523 -22.042  1.00 40.87           O
ATOM   3889  N   VAL D  99     -50.887 -20.558 -23.001  1.00 41.19           N
ATOM   3890  CA  VAL D  99     -50.346 -19.511 -22.142  1.00 42.26           C
ATOM   3891  C   VAL D  99     -51.509 -18.881 -21.388  1.00 44.28           C
ATOM   3892  O   VAL D  99     -52.551 -18.586 -21.984  1.00 40.42           O
ATOM   3893  CB  VAL D  99     -49.580 -18.445 -22.949  1.00 39.54           C
ATOM   3894  CG1 VAL D  99     -49.050 -17.360 -22.027  1.00 46.01           C
ATOM   3895  CG2 VAL D  99     -48.446 -19.082 -23.736  1.00 33.79           C
ATOM   3896  N   VAL D 100     -51.338 -18.678 -20.084  1.00 39.44           N
ATOM   3897  CA  VAL D 100     -52.409 -18.194 -19.221  1.00 38.91           C
ATOM   3898  C   VAL D 100     -51.922 -16.968 -18.461  1.00 41.80           C
ATOM   3899  O   VAL D 100     -50.804 -16.961 -17.933  1.00 46.18           O
ATOM   3900  CB  VAL D 100     -52.885 -19.282 -18.239  1.00 35.41           C
ATOM   3901  CG1 VAL D 100     -53.983 -18.744 -17.336  1.00 36.76           C
ATOM   3902  CG2 VAL D 100     -53.367 -20.507 -18.996  1.00 36.44           C
ATOM   3903  N   PHE D 101     -52.758 -15.937 -18.409  1.00 43.92           N
ATOM   3904  CA  PHE D 101     -52.538 -14.782 -17.552  1.00 42.32           C
ATOM   3905  C   PHE D 101     -53.440 -14.867 -16.328  1.00 44.23           C
ATOM   3906  O   PHE D 101     -54.498 -15.503 -16.354  1.00 40.95           O
ATOM   3907  CB  PHE D 101     -52.813 -13.476 -18.301  1.00 39.16           C
```

[2170]

```
ATOM   3908  CG  PHE D 101     -51.751 -13.110 -19.296  1.00 44.19           C
ATOM   3909  CD1 PHE D 101     -51.744 -13.675 -20.562  1.00 42.00           C
ATOM   3910  CD2 PHE D 101     -50.766 -12.193 -18.970  1.00 36.11           C
ATOM   3911  CE1 PHE D 101     -50.769 -13.338 -21.482  1.00 38.50           C
ATOM   3912  CE2 PHE D 101     -49.790 -11.850 -19.885  1.00 39.15           C
ATOM   3913  CZ  PHE D 101     -49.791 -12.424 -21.143  1.00 43.86           C
ATOM   3914  N   GLY D 102     -53.008 -14.224 -15.246  1.00 38.81           N
ATOM   3915  CA  GLY D 102     -53.828 -14.148 -14.059  1.00 37.87           C
ATOM   3916  C   GLY D 102     -54.929 -13.115 -14.195  1.00 44.76           C
ATOM   3917  O   GLY D 102     -55.000 -12.356 -15.161  1.00 48.85           O
ATOM   3918  N   GLY D 103     -55.809 -13.089 -13.193  1.00 43.14           N
ATOM   3919  CA  GLY D 103     -56.883 -12.113 -13.192  1.00 36.56           C
ATOM   3920  C   GLY D 103     -56.415 -10.685 -13.020  1.00 40.77           C
ATOM   3921  O   GLY D 103     -57.160  -9.756 -13.348  1.00 40.03           O
ATOM   3922  N   GLY D 104     -55.197 -10.489 -12.520  1.00 49.19           N
ATOM   3923  CA  GLY D 104     -54.658  -9.160 -12.320  1.00 43.80           C
ATOM   3924  C   GLY D 104     -54.854  -8.643 -10.911  1.00 39.73           C
ATOM   3925  O   GLY D 104     -55.917  -8.835 -10.315  1.00 43.43           O
ATOM   3926  N   THR D 105     -53.830  -7.990 -10.367  1.00 39.03           N
ATOM   3927  CA  THR D 105     -53.882  -7.393  -9.039  1.00 41.37           C
ATOM   3928  C   THR D 105     -53.725  -5.885  -9.165  1.00 39.95           C
ATOM   3929  O   THR D 105     -52.768  -5.405  -9.782  1.00 38.09           O
ATOM   3930  CB  THR D 105     -52.793  -7.964  -8.127  1.00 39.28           C
ATOM   3931  OG1 THR D 105     -53.063  -9.346  -7.870  1.00 39.95           O
ATOM   3932  CG2 THR D 105     -52.755  -7.208  -6.809  1.00 40.82           C
ATOM   3933  N   LYS D 106     -54.670  -5.146  -8.591  1.00 40.31           N
ATOM   3934  CA  LYS D 106     -54.676  -3.687  -8.671  1.00 43.56           C
ATOM   3935  C   LYS D 106     -53.945  -3.126  -7.456  1.00 45.45           C
ATOM   3936  O   LYS D 106     -54.476  -3.121  -6.342  1.00 49.58           O
ATOM   3937  CB  LYS D 106     -56.109  -3.175  -8.765  1.00 43.90           C
ATOM   3938  CG  LYS D 106     -56.855  -3.726  -9.972  1.00 54.97           C
ATOM   3939  CD  LYS D 106     -58.324  -3.343  -9.978  1.00 61.57           C
ATOM   3940  CE  LYS D 106     -59.038  -3.969 -11.170  1.00 57.82           C
ATOM   3941  NZ  LYS D 106     -60.503  -3.706 -11.157  1.00 61.11           N
ATOM   3942  N   LEU D 107     -52.719  -2.655  -7.671  1.00 42.64           N
ATOM   3943  CA  LEU D 107     -51.913  -2.058  -6.612  1.00 41.71           C
ATOM   3944  C   LEU D 107     -52.129  -0.550  -6.596  1.00 43.80           C
ATOM   3945  O   LEU D 107     -51.862   0.131  -7.593  1.00 46.92           O
ATOM   3946  CB  LEU D 107     -50.433  -2.381  -6.811  1.00 36.96           C
ATOM   3947  CG  LEU D 107     -49.458  -1.725  -5.829  1.00 40.62           C
ATOM   3948  CD1 LEU D 107     -49.836  -2.022  -4.387  1.00 43.40           C
ATOM   3949  CD2 LEU D 107     -48.031  -2.167  -6.115  1.00 41.73           C
ATOM   3950  N   THR D 108     -52.603  -0.030  -5.468  1.00 43.62           N
ATOM   3951  CA  THR D 108     -52.857   1.396  -5.306  1.00 51.81           C
ATOM   3952  C   THR D 108     -51.964   1.928  -4.193  1.00 47.60           C
ATOM   3953  O   THR D 108     -52.020   1.435  -3.061  1.00 48.08           O
ATOM   3954  CB  THR D 108     -54.330   1.661  -4.987  1.00 52.45           C
ATOM   3955  OG1 THR D 108     -54.583   1.353  -3.612  1.00 57.89           O
ATOM   3956  CG2 THR D 108     -55.224   0.792  -5.856  1.00 46.94           C
ATOM   3957  N   ALA D 109     -51.137   2.920  -4.517  1.00 44.76           N
ATOM   3958  CA  ALA D 109     -50.299   3.585  -3.527  1.00 49.24           C
ATOM   3959  C   ALA D 109     -51.041   4.796  -2.973  1.00 52.94           C
ATOM   3960  O   ALA D 109     -51.373   5.721  -3.723  1.00 55.65           O
ATOM   3961  CB  ALA D 109     -48.964   4.002  -4.142  1.00 47.78           C
ATOM   3962  N   LEU D 110     -51.297   4.793  -1.667  1.00 49.09           N
ATOM   3963  CA  LEU D 110     -52.075   5.862  -1.051  1.00 50.95           C
ATOM   3964  C   LEU D 110     -51.311   7.181  -1.078  1.00 56.02           C
ATOM   3965  O   LEU D 110     -50.135   7.238  -0.703  1.00 51.48           O
ATOM   3966  CB  LEU D 110     -52.451   5.492   0.383  1.00 41.21           C
ATOM   3967  CG  LEU D 110     -53.579   4.465   0.540  1.00 50.79           C
ATOM   3968  CD1 LEU D 110     -54.725   4.794  -0.410  1.00 54.74           C
ATOM   3969  CD2 LEU D 110     -53.104   3.034   0.338  1.00 52.70           C
ATOM   3970  N   ALA D 111     -51.990   8.239  -1.518  1.00 58.79           N
ATOM   3971  CA  ALA D 111     -51.411   9.579  -1.634  1.00 53.37           C
ATOM   3972  C   ALA D 111     -50.138   9.576  -2.476  1.00 61.24           C
ATOM   3973  O   ALA D 111     -50.132  10.048  -3.613  1.00 60.63           O
ATOM   3974  CB  ALA D 111     -51.133  10.161  -0.254  1.00 64.71           C
ATOM   3975  N   GLU D 131     -31.987  -2.499 -30.044  1.00 54.68           N
```

[2171]

```
ATOM   3976  CA  GLU D 131     -33.046  -2.648 -29.051  1.00 59.70           C
ATOM   3977  C   GLU D 131     -34.311  -3.199 -29.709  1.00 57.96           C
ATOM   3978  O   GLU D 131     -34.608  -2.884 -30.861  1.00 58.92           O
ATOM   3979  CB  GLU D 131     -33.332  -1.314 -28.360  1.00 55.40           C
ATOM   3980  CG  GLU D 131     -34.255  -1.428 -27.158  1.00 63.23           C
ATOM   3981  CD  GLU D 131     -35.458  -0.516 -27.256  1.00 69.69           C
ATOM   3982  OE1 GLU D 131     -35.604   0.168 -28.292  1.00 68.79           O
ATOM   3983  OE2 GLU D 131     -36.259  -0.484 -26.298  1.00 65.68           O
ATOM   3984  N   VAL D 132     -35.055  -4.021 -28.967  1.00 55.50           N
ATOM   3985  CA  VAL D 132     -36.246  -4.663 -29.511  1.00 51.36           C
ATOM   3986  C   VAL D 132     -37.359  -3.637 -29.667  1.00 47.87           C
ATOM   3987  O   VAL D 132     -37.614  -2.828 -28.765  1.00 56.17           O
ATOM   3988  CB  VAL D 132     -36.681  -5.827 -28.609  1.00 47.21           C
ATOM   3989  CG1 VAL D 132     -37.982  -6.443 -29.108  1.00 42.78           C
ATOM   3990  CG2 VAL D 132     -35.582  -6.875 -28.536  1.00 48.77           C
ATOM   3991  N   GLN D 133     -38.028  -3.664 -30.819  1.00 47.43           N
ATOM   3992  CA  GLN D 133     -39.100  -2.728 -31.128  1.00 46.94           C
ATOM   3993  C   GLN D 133     -40.200  -3.461 -31.882  1.00 44.91           C
ATOM   3994  O   GLN D 133     -39.928  -4.119 -32.890  1.00 50.16           O
ATOM   3995  CB  GLN D 133     -38.574  -1.549 -31.954  1.00 42.99           C
ATOM   3996  CG  GLN D 133     -39.565  -0.416 -32.133  1.00 49.79           C
ATOM   3997  CD  GLN D 133     -38.999   0.725 -32.956  1.00 54.32           C
ATOM   3998  OE1 GLN D 133     -39.523   1.060 -34.018  1.00 50.16           O
ATOM   3999  NE2 GLN D 133     -37.923   1.331 -32.466  1.00 59.10           N
ATOM   4000  N   LEU D 134     -41.432  -3.363 -31.384  1.00 47.32           N
ATOM   4001  CA  LEU D 134     -42.584  -4.032 -31.978  1.00 51.39           C
ATOM   4002  C   LEU D 134     -43.675  -3.016 -32.284  1.00 53.47           C
ATOM   4003  O   LEU D 134     -44.080  -2.250 -31.403  1.00 55.61           O
ATOM   4004  CB  LEU D 134     -43.131  -5.118 -31.046  1.00 50.28           C
ATOM   4005  CG  LEU D 134     -42.191  -6.261 -30.663  1.00 47.80           C
ATOM   4006  CD1 LEU D 134     -42.931  -7.290 -29.826  1.00 43.22           C
ATOM   4007  CD2 LEU D 134     -41.595  -6.903 -31.905  1.00 52.51           C
ATOM   4008  N   LEU D 135     -44.151  -3.015 -33.529  1.00 56.70           N
ATOM   4009  CA  LEU D 135     -45.212  -2.119 -33.975  1.00 54.92           C
ATOM   4010  C   LEU D 135     -46.354  -2.931 -34.568  1.00 52.33           C
ATOM   4011  O   LEU D 135     -46.134  -3.756 -35.460  1.00 49.96           O
ATOM   4012  CB  LEU D 135     -44.700  -1.110 -35.007  1.00 47.28           C
ATOM   4013  CG  LEU D 135     -44.023   0.155 -34.479  1.00 51.09           C
ATOM   4014  CD1 LEU D 135     -44.918   0.843 -33.456  1.00 54.37           C
ATOM   4015  CD2 LEU D 135     -42.651  -0.140 -33.898  1.00 48.70           C
ATOM   4016  N   GLU D 136     -47.567  -2.686 -34.083  1.00 52.43           N
ATOM   4017  CA  GLU D 136     -48.764  -3.351 -34.574  1.00 52.10           C
ATOM   4018  C   GLU D 136     -49.578  -2.405 -35.447  1.00 55.77           C
ATOM   4019  O   GLU D 136     -49.530  -1.182 -35.285  1.00 62.82           O
ATOM   4020  CB  GLU D 136     -49.629  -3.862 -33.417  1.00 49.07           C
ATOM   4021  CG  GLU D 136     -48.951  -4.916 -32.563  1.00 55.37           C
ATOM   4022  CD  GLU D 136     -48.133  -4.321 -31.432  1.00 59.19           C
ATOM   4023  OE1 GLU D 136     -48.702  -4.071 -30.350  1.00 47.74           O
ATOM   4024  OE2 GLU D 136     -46.918  -4.101 -31.628  1.00 59.23           O
ATOM   4025  N   SER D 137     -50.332  -2.988 -36.374  1.00 54.02           N
ATOM   4026  CA  SER D 137     -51.187  -2.223 -37.271  1.00 53.99           C
ATOM   4027  C   SER D 137     -52.257  -3.153 -37.822  1.00 52.59           C
ATOM   4028  O   SER D 137     -52.161  -4.378 -37.714  1.00 56.81           O
ATOM   4029  CB  SER D 137     -50.379  -1.579 -38.401  1.00 58.89           C
ATOM   4030  OG  SER D 137     -49.671  -2.559 -39.140  1.00 62.87           O
ATOM   4031  N   GLY D 138     -53.284  -2.552 -38.416  1.00 53.07           N
ATOM   4032  CA  GLY D 138     -54.370  -3.289 -39.030  1.00 49.60           C
ATOM   4033  C   GLY D 138     -55.676  -3.243 -38.270  1.00 52.43           C
ATOM   4034  O   GLY D 138     -56.710  -3.630 -38.829  1.00 59.86           O
ATOM   4035  N   GLY D 139     -55.670  -2.786 -37.021  1.00 50.23           N
ATOM   4036  CA  GLY D 139     -56.893  -2.734 -36.250  1.00 52.79           C
ATOM   4037  C   GLY D 139     -57.815  -1.617 -36.699  1.00 59.50           C
ATOM   4038  O   GLY D 139     -57.421  -0.675 -37.388  1.00 64.37           O
ATOM   4039  N   GLY D 140     -59.076  -1.734 -36.297  1.00 58.19           N
ATOM   4040  CA  GLY D 140     -60.064  -0.728 -36.655  1.00 52.51           C
ATOM   4041  C   GLY D 140     -61.466  -1.184 -36.317  1.00 56.74           C
ATOM   4042  O   GLY D 140     -61.676  -1.952 -35.370  1.00 51.92           O
ATOM   4043  N   LEU D 141     -62.422  -0.704 -37.107  1.00 60.13           N
```

[2172]

```
ATOM   4044  CA  LEU D 141     -63.828  -1.040 -36.930  1.00 58.55           C
ATOM   4045  C   LEU D 141     -64.250  -2.083 -37.955  1.00 59.26           C
ATOM   4046  O   LEU D 141     -63.812  -2.050 -39.109  1.00 65.11           O
ATOM   4047  CB  LEU D 141     -64.710   0.204 -37.061  1.00 60.88           C
ATOM   4048  CG  LEU D 141     -65.092   0.954 -35.783  1.00 63.18           C
ATOM   4049  CD1 LEU D 141     -66.109   0.160 -34.979  1.00 64.40           C
ATOM   4050  CD2 LEU D 141     -63.862   1.258 -34.944  1.00 62.03           C
ATOM   4051  N   VAL D 142     -65.104  -3.011 -37.524  1.00 54.61           N
ATOM   4052  CA  VAL D 142     -65.597  -4.073 -38.392  1.00 57.70           C
ATOM   4053  C   VAL D 142     -66.937  -4.536 -37.840  1.00 61.20           C
ATOM   4054  O   VAL D 142     -67.242  -4.341 -36.661  1.00 50.87           O
ATOM   4055  CB  VAL D 142     -64.580  -5.239 -38.492  1.00 60.89           C
ATOM   4056  CG1 VAL D 142     -64.594  -6.072 -37.221  1.00 61.54           C
ATOM   4057  CG2 VAL D 142     -64.854  -6.098 -39.721  1.00 62.53           C
ATOM   4058  N   GLN D 143     -67.758  -5.151 -38.711  1.00 65.92           N
ATOM   4059  CA  GLN D 143     -69.080  -5.638 -38.353  1.00 60.99           C
ATOM   4060  C   GLN D 143     -68.994  -7.039 -37.756  1.00 60.82           C
ATOM   4061  O   GLN D 143     -68.063  -7.794 -38.059  1.00 59.51           O
ATOM   4062  CB  GLN D 143     -69.988  -5.659 -39.580  1.00 58.94           C
ATOM   4063  N   PRO D 144     -69.945  -7.401 -36.894  1.00 56.58           N
ATOM   4064  CA  PRO D 144     -69.969  -8.765 -36.341  1.00 52.10           C
ATOM   4065  C   PRO D 144     -70.061  -9.806 -37.445  1.00 58.83           C
ATOM   4066  O   PRO D 144     -71.022  -9.839 -38.218  1.00 63.18           O
ATOM   4067  CB  PRO D 144     -71.219  -8.761 -35.453  1.00 52.62           C
ATOM   4068  CG  PRO D 144     -71.398  -7.329 -35.073  1.00 55.46           C
ATOM   4069  CD  PRO D 144     -70.962  -6.535 -36.271  1.00 54.70           C
ATOM   4070  N   GLY D 145     -69.045 -10.663 -37.513  1.00 55.46           N
ATOM   4071  CA  GLY D 145     -68.922 -11.659 -38.559  1.00 49.16           C
ATOM   4072  C   GLY D 145     -67.873 -11.339 -39.599  1.00 52.26           C
ATOM   4073  O   GLY D 145     -67.508 -12.228 -40.381  1.00 48.75           O
ATOM   4074  N   GLY D 146     -67.376 -10.107 -39.637  1.00 54.54           N
ATOM   4075  CA  GLY D 146     -66.362  -9.728 -40.594  1.00 56.39           C
ATOM   4076  C   GLY D 146     -64.996 -10.293 -40.247  1.00 51.02           C
ATOM   4077  O   GLY D 146     -64.788 -10.963 -39.235  1.00 52.80           O
ATOM   4078  N   SER D 147     -64.040 -10.004 -41.124  1.00 51.60           N
ATOM   4079  CA  SER D 147     -62.669 -10.463 -40.975  1.00 48.52           C
ATOM   4080  C   SER D 147     -61.731  -9.268 -40.875  1.00 51.18           C
ATOM   4081  O   SER D 147     -62.076  -8.144 -41.252  1.00 49.78           O
ATOM   4082  CB  SER D 147     -62.249 -11.369 -42.140  1.00 48.64           C
ATOM   4083  OG  SER D 147     -62.936 -12.608 -42.092  1.00 56.61           O
ATOM   4084  N   LEU D 148     -60.531  -9.531 -40.360  1.00 56.95           N
ATOM   4085  CA  LEU D 148     -59.543  -8.487 -40.125  1.00 47.87           C
ATOM   4086  C   LEU D 148     -58.188  -9.112 -39.817  1.00 50.12           C
ATOM   4087  O   LEU D 148     -58.086  -9.967 -38.933  1.00 57.40           O
ATOM   4088  CB  LEU D 148     -60.004  -7.586 -38.978  1.00 43.20           C
ATOM   4089  CG  LEU D 148     -59.239  -6.301 -38.674  1.00 53.43           C
ATOM   4090  CD1 LEU D 148     -60.219  -5.172 -38.410  1.00 56.66           C
ATOM   4091  CD2 LEU D 148     -58.337  -6.509 -37.474  1.00 55.01           C
ATOM   4092  N   ARG D 149     -57.144  -8.711 -40.536  1.00 43.36           N
ATOM   4093  CA  ARG D 149     -55.806  -9.246 -40.327  1.00 43.40           C
ATOM   4094  C   ARG D 149     -54.921  -8.191 -39.680  1.00 49.10           C
ATOM   4095  O   ARG D 149     -54.839  -7.058 -40.166  1.00 41.05           O
ATOM   4096  CB  ARG D 149     -55.174  -9.722 -41.636  1.00 36.57           C
ATOM   4097  CG  ARG D 149     -53.724 -10.148 -41.460  1.00 47.19           C
ATOM   4098  CD  ARG D 149     -53.231 -11.047 -42.579  1.00 49.80           C
ATOM   4099  NE  ARG D 149     -53.034 -10.324 -43.830  1.00 63.64           N
ATOM   4100  CZ  ARG D 149     -52.346 -10.802 -44.861  1.00 78.25           C
ATOM   4101  NH1 ARG D 149     -52.214 -10.081 -45.966  1.00 73.35           N
ATOM   4102  NH2 ARG D 149     -51.782 -12.000 -44.782  1.00 79.30           N
ATOM   4103  N   LEU D 150     -54.259  -8.570 -38.591  1.00 53.85           N
ATOM   4104  CA  LEU D 150     -53.315  -7.702 -37.906  1.00 46.81           C
ATOM   4105  C   LEU D 150     -51.893  -8.042 -38.329  1.00 45.43           C
ATOM   4106  O   LEU D 150     -51.588  -9.180 -38.695  1.00 43.50           O
ATOM   4107  CB  LEU D 150     -53.450  -7.840 -36.390  1.00 42.74           C
ATOM   4108  CG  LEU D 150     -54.802  -7.434 -35.810  1.00 49.77           C
ATOM   4109  CD1 LEU D 150     -54.833  -7.692 -34.314  1.00 42.36           C
ATOM   4110  CD2 LEU D 150     -55.076  -5.974 -36.112  1.00 46.77           C
ATOM   4111  N   SER D 151     -51.020  -7.041 -38.260  1.00 43.93           N
```

[2173]

```
ATOM   4112  CA  SER D 151     -49.610  -7.214 -38.565  1.00 48.06           C
ATOM   4113  C   SER D 151     -48.768  -6.680 -37.417  1.00 47.77           C
ATOM   4114  O   SER D 151     -49.203  -5.811 -36.658  1.00 46.00           O
ATOM   4115  CB  SER D 151     -49.227  -6.507 -39.873  1.00 45.06           C
ATOM   4116  OG  SER D 151     -49.578  -5.136 -39.832  1.00 55.42           O
ATOM   4117  N   CYS D 152     -47.557  -7.219 -37.293  1.00 44.83           N
ATOM   4118  CA  CYS D 152     -46.601  -6.795 -36.275  1.00 47.26           C
ATOM   4119  C   CYS D 152     -45.240  -6.619 -36.932  1.00 46.57           C
ATOM   4120  O   CYS D 152     -44.611  -7.601 -37.339  1.00 47.64           O
ATOM   4121  CB  CYS D 152     -46.527  -7.799 -35.124  1.00 47.33           C
ATOM   4122  SG  CYS D 152     -45.242  -7.413 -33.907  1.00 63.22           S
ATOM   4123  N   ALA D 153     -44.791  -5.371 -37.044  1.00 46.31           N
ATOM   4124  CA  ALA D 153     -43.481  -5.067 -37.610  1.00 48.95           C
ATOM   4125  C   ALA D 153     -42.424  -5.242 -36.527  1.00 51.76           C
ATOM   4126  O   ALA D 153     -42.382  -4.475 -35.559  1.00 52.10           O
ATOM   4127  CB  ALA D 153     -43.459  -3.651 -38.179  1.00 43.75           C
ATOM   4128  N   ALA D 154     -41.574  -6.254 -36.680  1.00 40.91           N
ATOM   4129  CA  ALA D 154     -40.519  -6.539 -35.719  1.00 51.60           C
ATOM   4130  C   ALA D 154     -39.189  -5.992 -36.216  1.00 50.11           C
ATOM   4131  O   ALA D 154     -38.873  -6.082 -37.406  1.00 46.81           O
ATOM   4132  CB  ALA D 154     -40.402  -8.042 -35.463  1.00 49.71           C
ATOM   4133  N   SER D 155     -38.408  -5.433 -35.295  1.00 46.87           N
ATOM   4134  CA  SER D 155     -37.109  -4.872 -35.638  1.00 48.03           C
ATOM   4135  C   SER D 155     -36.229  -4.851 -34.397  1.00 42.45           C
ATOM   4136  O   SER D 155     -36.722  -4.732 -33.272  1.00 41.15           O
ATOM   4137  CB  SER D 155     -37.245  -3.461 -36.220  1.00 45.71           C
ATOM   4138  OG  SER D 155     -37.570  -2.524 -35.207  1.00 48.92           O
ATOM   4139  N   GLY D 156     -34.922  -4.969 -34.620  1.00 44.57           N
ATOM   4140  CA  GLY D 156     -33.945  -4.916 -33.554  1.00 44.83           C
ATOM   4141  C   GLY D 156     -33.437  -6.255 -33.065  1.00 46.70           C
ATOM   4142  O   GLY D 156     -32.643  -6.284 -32.117  1.00 48.92           O
ATOM   4143  N   PHE D 157     -33.857  -7.359 -33.678  1.00 39.99           N
ATOM   4144  CA  PHE D 157     -33.428  -8.677 -33.233  1.00 44.87           C
ATOM   4145  C   PHE D 157     -33.676  -9.683 -34.348  1.00 42.96           C
ATOM   4146  O   PHE D 157     -34.430  -9.422 -35.289  1.00 45.38           O
ATOM   4147  CB  PHE D 157     -34.153  -9.102 -31.950  1.00 42.04           C
ATOM   4148  CG  PHE D 157     -35.639  -9.259 -32.115  1.00 45.77           C
ATOM   4149  CD1 PHE D 157     -36.479  -8.161 -32.034  1.00 44.00           C
ATOM   4150  CD2 PHE D 157     -36.195 -10.506 -32.351  1.00 40.54           C
ATOM   4151  CE1 PHE D 157     -37.846  -8.305 -32.188  1.00 42.54           C
ATOM   4152  CE2 PHE D 157     -37.559 -10.655 -32.505  1.00 37.28           C
ATOM   4153  CZ  PHE D 157     -38.386  -9.553 -32.423  1.00 36.39           C
ATOM   4154  N   GLY D 158     -33.025 -10.838 -34.227  1.00 36.95           N
ATOM   4155  CA  GLY D 158     -33.243 -11.930 -35.155  1.00 37.91           C
ATOM   4156  C   GLY D 158     -34.643 -12.497 -35.046  1.00 48.82           C
ATOM   4157  O   GLY D 158     -34.902 -13.373 -34.215  1.00 51.60           O
ATOM   4158  N   PHE D 159     -35.551 -11.999 -35.891  1.00 42.37           N
ATOM   4159  CA  PHE D 159     -36.968 -12.325 -35.753  1.00 44.46           C
ATOM   4160  C   PHE D 159     -37.218 -13.824 -35.871  1.00 48.22           C
ATOM   4161  O   PHE D 159     -38.063 -14.377 -35.157  1.00 44.15           O
ATOM   4162  CB  PHE D 159     -37.775 -11.558 -36.801  1.00 45.14           C
ATOM   4163  CG  PHE D 159     -39.227 -11.937 -36.849  1.00 43.61           C
ATOM   4164  CD1 PHE D 159     -40.104 -11.495 -35.873  1.00 40.64           C
ATOM   4165  CD2 PHE D 159     -39.717 -12.725 -37.878  1.00 41.82           C
ATOM   4166  CE1 PHE D 159     -41.442 -11.837 -35.918  1.00 44.63           C
ATOM   4167  CE2 PHE D 159     -41.054 -13.070 -37.930  1.00 41.23           C
ATOM   4168  CZ  PHE D 159     -41.917 -12.626 -36.949  1.00 46.20           C
ATOM   4169  N   SER D 160     -36.490 -14.502 -36.761  1.00 47.75           N
ATOM   4170  CA  SER D 160     -36.705 -15.929 -36.965  1.00 46.51           C
ATOM   4171  C   SER D 160     -36.287 -16.767 -35.765  1.00 46.99           C
ATOM   4172  O   SER D 160     -36.664 -17.942 -35.690  1.00 48.13           O
ATOM   4173  CB  SER D 160     -35.946 -16.403 -38.205  1.00 44.40           C
ATOM   4174  OG  SER D 160     -34.564 -16.544 -37.927  1.00 53.31           O
ATOM   4175  N   SER D 161     -35.538 -16.198 -34.826  1.00 42.70           N
ATOM   4176  CA  SER D 161     -35.026 -16.937 -33.682  1.00 44.87           C
ATOM   4177  C   SER D 161     -35.892 -16.777 -32.443  1.00 40.89           C
ATOM   4178  O   SER D 161     -35.490 -17.211 -31.359  1.00 43.46           O
ATOM   4179  CB  SER D 161     -33.596 -16.497 -33.366  1.00 38.17           C
```

[2174]

```
ATOM   4180  OG  SER D 161     -32.672 -17.069 -34.270  1.00 46.60           O
ATOM   4181  N   TYR D 162     -37.069 -16.173 -32.571  1.00 42.14           N
ATOM   4182  CA  TYR D 162     -37.909 -15.886 -31.419  1.00 37.85           C
ATOM   4183  C   TYR D 162     -39.344 -16.301 -31.694  1.00 39.64           C
ATOM   4184  O   TYR D 162     -39.912 -15.943 -32.730  1.00 42.91           O
ATOM   4185  CB  TYR D 162     -37.836 -14.401 -31.058  1.00 36.75           C
ATOM   4186  CG  TYR D 162     -36.538 -14.036 -30.382  1.00 40.63           C
ATOM   4187  CD1 TYR D 162     -35.441 -13.615 -31.122  1.00 41.01           C
ATOM   4188  CD2 TYR D 162     -36.400 -14.140 -29.005  1.00 39.11           C
ATOM   4189  CE1 TYR D 162     -34.248 -13.290 -30.506  1.00 43.50           C
ATOM   4190  CE2 TYR D 162     -35.212 -13.819 -28.381  1.00 37.84           C
ATOM   4191  CZ  TYR D 162     -34.139 -13.393 -29.136  1.00 40.06           C
ATOM   4192  OH  TYR D 162     -32.953 -13.070 -28.519  1.00 46.96           O
ATOM   4193  N   ALA D 163     -39.917 -17.062 -30.767  1.00 35.01           N
ATOM   4194  CA  ALA D 163     -41.337 -17.368 -30.820  1.00 32.58           C
ATOM   4195  C   ALA D 163     -42.144 -16.132 -30.450  1.00 33.08           C
ATOM   4196  O   ALA D 163     -41.773 -15.375 -29.550  1.00 33.15           O
ATOM   4197  CB  ALA D 163     -41.669 -18.525 -29.880  1.00 30.83           C
ATOM   4198  N   MET D 164     -43.249 -15.925 -31.154  1.00 40.55           N
ATOM   4199  CA  MET D 164     -44.094 -14.760 -30.959  1.00 39.24           C
ATOM   4200  C   MET D 164     -45.475 -15.197 -30.487  1.00 39.99           C
ATOM   4201  O   MET D 164     -45.843 -16.372 -30.568  1.00 43.40           O
ATOM   4202  CB  MET D 164     -44.203 -13.946 -32.254  1.00 36.85           C
ATOM   4203  CG  MET D 164     -42.859 -13.583 -32.873  1.00 41.23           C
ATOM   4204  SD  MET D 164     -41.903 -12.393 -31.914  1.00 35.38           S
ATOM   4205  CE  MET D 164     -42.931 -10.932 -32.064  1.00 29.69           C
ATOM   4206  N   SER D 165     -46.243 -14.230 -29.992  1.00 35.83           N
ATOM   4207  CA  SER D 165     -47.579 -14.514 -29.488  1.00 34.19           C
ATOM   4208  C   SER D 165     -48.411 -13.241 -29.544  1.00 35.75           C
ATOM   4209  O   SER D 165     -47.879 -12.127 -29.543  1.00 32.60           O
ATOM   4210  CB  SER D 165     -47.536 -15.073 -28.059  1.00 39.80           C
ATOM   4211  OG  SER D 165     -46.846 -14.200 -27.180  1.00 37.07           O
ATOM   4212  N   TRP D 166     -49.726 -13.427 -29.605  1.00 35.19           N
ATOM   4213  CA  TRP D 166     -50.690 -12.335 -29.575  1.00 35.98           C
ATOM   4214  C   TRP D 166     -51.468 -12.389 -28.269  1.00 39.70           C
ATOM   4215  O   TRP D 166     -51.956 -13.454 -27.875  1.00 33.62           O
ATOM   4216  CB  TRP D 166     -51.651 -12.415 -30.763  1.00 34.24           C
ATOM   4217  CG  TRP D 166     -51.032 -12.053 -32.079  1.00 39.95           C
ATOM   4218  CD1 TRP D 166     -50.547 -12.912 -33.020  1.00 39.27           C
ATOM   4219  CD2 TRP D 166     -50.853 -10.733 -32.610  1.00 41.62           C
ATOM   4220  NE1 TRP D 166     -50.066 -12.211 -34.099  1.00 44.81           N
ATOM   4221  CE2 TRP D 166     -50.244 -10.871 -33.874  1.00 42.01           C
ATOM   4222  CE3 TRP D 166     -51.144  -9.449 -32.139  1.00 40.93           C
ATOM   4223  CZ2 TRP D 166     -49.921  -9.775 -34.671  1.00 41.18           C
ATOM   4224  CZ3 TRP D 166     -50.821  -8.361 -32.932  1.00 42.36           C
ATOM   4225  CH2 TRP D 166     -50.216  -8.531 -34.184  1.00 44.13           C
ATOM   4226  N   VAL D 167     -51.576 -11.244 -27.599  1.00 34.21           N
ATOM   4227  CA  VAL D 167     -52.322 -11.121 -26.354  1.00 38.69           C
ATOM   4228  C   VAL D 167     -53.253  -9.925 -26.474  1.00 42.39           C
ATOM   4229  O   VAL D 167     -52.815  -8.827 -26.837  1.00 42.65           O
ATOM   4230  CB  VAL D 167     -51.390 -10.958 -25.137  1.00 36.83           C
ATOM   4231  CG1 VAL D 167     -52.205 -10.803 -23.864  1.00 36.73           C
ATOM   4232  CG2 VAL D 167     -50.443 -12.143 -25.025  1.00 40.22           C
ATOM   4233  N   ARG D 168     -54.534 -10.136 -26.185  1.00 43.16           N
ATOM   4234  CA  ARG D 168     -55.526  -9.076 -26.251  1.00 44.09           C
ATOM   4235  C   ARG D 168     -55.975  -8.682 -24.850  1.00 43.20           C
ATOM   4236  O   ARG D 168     -55.763  -9.408 -23.874  1.00 41.68           O
ATOM   4237  CB  ARG D 168     -56.735  -9.494 -27.097  1.00 40.00           C
ATOM   4238  CG  ARG D 168     -57.744 -10.380 -26.389  1.00 41.56           C
ATOM   4239  CD  ARG D 168     -58.622 -11.094 -27.406  1.00 38.43           C
ATOM   4240  NE  ARG D 168     -59.605 -11.975 -26.785  1.00 39.93           N
ATOM   4241  CZ  ARG D 168     -60.492 -12.694 -27.466  1.00 44.16           C
ATOM   4242  NH1 ARG D 168     -60.517 -12.636 -28.791  1.00 45.98           N
ATOM   4243  NH2 ARG D 168     -61.352 -13.473 -26.825  1.00 43.58           N
ATOM   4244  N   GLN D 169     -56.604  -7.511 -24.764  1.00 43.41           N
ATOM   4245  CA  GLN D 169     -57.187  -7.020 -23.518  1.00 47.70           C
ATOM   4246  C   GLN D 169     -58.471  -6.275 -23.849  1.00 49.83           C
ATOM   4247  O   GLN D 169     -58.422  -5.157 -24.372  1.00 50.62           O
```

[2175]

```
ATOM   4248  CB  GLN D 169     -56.222  -6.107 -22.763  1.00 45.66           C
ATOM   4249  CG  GLN D 169     -56.822  -5.528 -21.491  1.00 44.60           C
ATOM   4250  CD  GLN D 169     -55.888  -4.573 -20.776  1.00 53.64           C
ATOM   4251  OE1 GLN D 169     -56.073  -4.274 -19.596  1.00 56.09           O
ATOM   4252  NE2 GLN D 169     -54.884  -4.080 -21.491  1.00 51.83           N
ATOM   4253  N   ALA D 170     -59.612  -6.893 -23.559  1.00 47.29           N
ATOM   4254  CA  ALA D 170     -60.883  -6.217 -23.749  1.00 44.48           C
ATOM   4255  C   ALA D 170     -61.012  -5.062 -22.755  1.00 59.83           C
ATOM   4256  O   ALA D 170     -60.484  -5.130 -21.640  1.00 60.50           O
ATOM   4257  CB  ALA D 170     -62.042  -7.194 -23.570  1.00 43.32           C
ATOM   4258  N   PRO D 171     -61.709  -3.991 -23.134  1.00 55.97           N
ATOM   4259  CA  PRO D 171     -61.881  -2.859 -22.212  1.00 58.49           C
ATOM   4260  C   PRO D 171     -62.634  -3.279 -20.958  1.00 53.72           C
ATOM   4261  O   PRO D 171     -63.715  -3.868 -21.028  1.00 52.74           O
ATOM   4262  CB  PRO D 171     -62.672  -1.833 -23.034  1.00 55.41           C
ATOM   4263  CG  PRO D 171     -63.154  -2.544 -24.244  1.00 56.79           C
ATOM   4264  CD  PRO D 171     -62.310  -3.752 -24.456  1.00 50.07           C
ATOM   4265  N   GLY D 172     -62.050  -2.969 -19.802  1.00 57.00           N
ATOM   4266  CA  GLY D 172     -62.622  -3.379 -18.537  1.00 60.08           C
ATOM   4267  C   GLY D 172     -62.265  -4.780 -18.098  1.00 60.03           C
ATOM   4268  O   GLY D 172     -62.787  -5.244 -17.079  1.00 59.35           O
ATOM   4269  N   LYS D 173     -61.396  -5.467 -18.830  1.00 60.16           N
ATOM   4270  CA  LYS D 173     -60.974  -6.824 -18.514  1.00 51.97           C
ATOM   4271  C   LYS D 173     -59.457  -6.866 -18.361  1.00 53.30           C
ATOM   4272  O   LYS D 173     -58.762  -5.860 -18.529  1.00 54.61           O
ATOM   4273  CB  LYS D 173     -61.433  -7.803 -19.600  1.00 59.21           C
ATOM   4274  CG  LYS D 173     -62.913  -7.733 -19.946  1.00 55.25           C
ATOM   4275  CD  LYS D 173     -63.771  -8.255 -18.806  1.00 54.23           C
ATOM   4276  CE  LYS D 173     -65.141  -8.693 -19.301  1.00 63.40           C
ATOM   4277  NZ  LYS D 173     -65.913  -9.414 -18.248  1.00 52.45           N
ATOM   4278  N   GLY D 174     -58.944  -8.053 -18.044  1.00 47.62           N
ATOM   4279  CA  GLY D 174     -57.523  -8.257 -17.876  1.00 48.46           C
ATOM   4280  C   GLY D 174     -56.864  -8.762 -19.145  1.00 50.06           C
ATOM   4281  O   GLY D 174     -57.466  -8.824 -20.218  1.00 56.42           O
ATOM   4282  N   LEU D 175     -55.595  -9.132 -19.007  1.00 47.65           N
ATOM   4283  CA  LEU D 175     -54.853  -9.660 -20.142  1.00 48.80           C
ATOM   4284  C   LEU D 175     -55.309 -11.078 -20.463  1.00 43.79           C
ATOM   4285  O   LEU D 175     -55.488 -11.910 -19.569  1.00 42.29           O
ATOM   4286  CB  LEU D 175     -53.352  -9.634 -19.853  1.00 47.29           C
ATOM   4287  CG  LEU D 175     -52.746  -8.234 -19.733  1.00 48.29           C
ATOM   4288  CD1 LEU D 175     -51.301  -8.297 -19.268  1.00 41.56           C
ATOM   4289  CD2 LEU D 175     -52.851  -7.503 -21.062  1.00 49.05           C
ATOM   4290  N   GLU D 176     -55.502 -11.350 -21.753  1.00 47.20           N
ATOM   4291  CA  GLU D 176     -55.964 -12.652 -22.220  1.00 45.17           C
ATOM   4292  C   GLU D 176     -55.078 -13.109 -23.367  1.00 42.07           C
ATOM   4293  O   GLU D 176     -54.970 -12.419 -24.385  1.00 47.73           O
ATOM   4294  CB  GLU D 176     -57.426 -12.595 -22.672  1.00 40.21           C
ATOM   4295  CG  GLU D 176     -57.925 -13.892 -23.288  1.00 48.81           C
ATOM   4296  CD  GLU D 176     -59.367 -13.805 -23.749  1.00 54.71           C
ATOM   4297  OE1 GLU D 176     -59.966 -14.864 -24.041  1.00 50.10           O
ATOM   4298  OE2 GLU D 176     -59.900 -12.677 -23.818  1.00 54.78           O
ATOM   4299  N   TRP D 177     -54.447 -14.268 -23.199  1.00 39.00           N
ATOM   4300  CA  TRP D 177     -53.621 -14.829 -24.257  1.00 39.11           C
ATOM   4301  C   TRP D 177     -54.493 -15.372 -25.382  1.00 43.11           C
ATOM   4302  O   TRP D 177     -55.489 -16.060 -25.143  1.00 41.63           O
ATOM   4303  CB  TRP D 177     -52.728 -15.934 -23.699  1.00 40.04           C
ATOM   4304  CG  TRP D 177     -51.938 -16.665 -24.738  1.00 40.49           C
ATOM   4305  CD1 TRP D 177     -50.803 -16.234 -25.362  1.00 38.95           C
ATOM   4306  CD2 TRP D 177     -52.209 -17.972 -25.259  1.00 36.19           C
ATOM   4307  NE1 TRP D 177     -50.357 -17.186 -26.244  1.00 29.31           N
ATOM   4308  CE2 TRP D 177     -51.202 -18.263 -26.200  1.00 33.73           C
ATOM   4309  CE3 TRP D 177     -53.209 -18.921 -25.023  1.00 35.33           C
ATOM   4310  CZ2 TRP D 177     -51.165 -19.464 -26.905  1.00 38.72           C
ATOM   4311  CZ3 TRP D 177     -53.171 -20.112 -25.724  1.00 34.93           C
ATOM   4312  CH2 TRP D 177     -52.156 -20.374 -26.653  1.00 37.59           C
ATOM   4313  N   VAL D 178     -54.106 -15.062 -26.616  1.00 41.34           N
ATOM   4314  CA  VAL D 178     -54.876 -15.421 -27.803  1.00 36.53           C
ATOM   4315  C   VAL D 178     -54.224 -16.576 -28.553  1.00 36.46           C
```

[2176]

```
ATOM   4316  O   VAL D 178     -54.841 -17.623 -28.756  1.00 39.18           O
ATOM   4317  CB  VAL D 178     -55.076 -14.199 -28.727  1.00 38.98           C
ATOM   4318  CG1 VAL D 178     -55.960 -14.567 -29.905  1.00 40.45           C
ATOM   4319  CG2 VAL D 178     -55.660 -13.036 -27.947  1.00 40.40           C
ATOM   4320  N   SER D 179     -52.975 -16.403 -28.973  1.00 33.50           N
ATOM   4321  CA  SER D 179     -52.317 -17.389 -29.817  1.00 36.72           C
ATOM   4322  C   SER D 179     -50.811 -17.217 -29.693  1.00 35.14           C
ATOM   4323  O   SER D 179     -50.320 -16.212 -29.175  1.00 33.44           O
ATOM   4324  CB  SER D 179     -52.768 -17.250 -31.276  1.00 36.73           C
ATOM   4325  OG  SER D 179     -52.136 -18.212 -32.101  1.00 41.95           O
ATOM   4326  N   ALA D 180     -50.081 -18.211 -30.196  1.00 38.94           N
ATOM   4327  CA  ALA D 180     -48.627 -18.175 -30.202  1.00 38.80           C
ATOM   4328  C   ALA D 180     -48.117 -18.994 -31.377  1.00 38.80           C
ATOM   4329  O   ALA D 180     -48.820 -19.858 -31.908  1.00 36.82           O
ATOM   4330  CB  ALA D 180     -48.041 -18.702 -28.887  1.00 35.79           C
ATOM   4331  N   ILE D 181     -46.882 -18.709 -31.781  1.00 38.60           N
ATOM   4332  CA  ILE D 181     -46.241 -19.427 -32.879  1.00 38.55           C
ATOM   4333  C   ILE D 181     -44.752 -19.534 -32.578  1.00 35.94           C
ATOM   4334  O   ILE D 181     -44.154 -18.623 -31.998  1.00 32.78           O
ATOM   4335  CB  ILE D 181     -46.501 -18.736 -34.237  1.00 39.13           C
ATOM   4336  CG1 ILE D 181     -45.948 -19.578 -35.389  1.00 38.41           C
ATOM   4337  CG2 ILE D 181     -45.902 -17.336 -34.260  1.00 39.92           C
ATOM   4338  CD1 ILE D 181     -46.402 -19.113 -36.756  1.00 41.09           C
ATOM   4339  N   SER D 182     -44.160 -20.662 -32.961  1.00 35.50           N
ATOM   4340  CA  SER D 182     -42.732 -20.860 -32.777  1.00 33.82           C
ATOM   4341  C   SER D 182     -41.943 -19.978 -33.743  1.00 40.33           C
ATOM   4342  O   SER D 182     -42.493 -19.357 -34.658  1.00 42.00           O
ATOM   4343  CB  SER D 182     -42.367 -22.330 -32.972  1.00 37.68           C
ATOM   4344  OG  SER D 182     -42.720 -22.777 -34.268  1.00 40.35           O
ATOM   4345  N   GLY D 183     -40.625 -19.937 -33.531  1.00 48.30           N
ATOM   4346  CA  GLY D 183     -39.778 -19.096 -34.362  1.00 39.62           C
ATOM   4347  C   GLY D 183     -39.797 -19.500 -35.823  1.00 43.47           C
ATOM   4348  O   GLY D 183     -39.909 -18.650 -36.710  1.00 48.15           O
ATOM   4349  N   SER D 184     -39.696 -20.802 -36.095  1.00 41.20           N
ATOM   4350  CA  SER D 184     -39.707 -21.269 -37.475  1.00 41.57           C
ATOM   4351  C   SER D 184     -41.097 -21.213 -38.092  1.00 48.67           C
ATOM   4352  O   SER D 184     -41.215 -21.184 -39.322  1.00 49.50           O
ATOM   4353  CB  SER D 184     -39.169 -22.697 -37.553  1.00 37.88           C
ATOM   4354  OG  SER D 184     -40.020 -23.595 -36.863  1.00 42.04           O
ATOM   4355  N   GLY D 185     -42.145 -21.193 -37.275  1.00 54.00           N
ATOM   4356  CA  GLY D 185     -43.504 -21.189 -37.772  1.00 39.93           C
ATOM   4357  C   GLY D 185     -44.156 -22.548 -37.864  1.00 42.80           C
ATOM   4358  O   GLY D 185     -45.280 -22.642 -38.373  1.00 44.48           O
ATOM   4359  N   GLY D 186     -43.493 -23.606 -37.388  1.00 43.09           N
ATOM   4360  CA  GLY D 186     -44.044 -24.945 -37.500  1.00 44.55           C
ATOM   4361  C   GLY D 186     -45.022 -25.324 -36.411  1.00 42.68           C
ATOM   4362  O   GLY D 186     -45.859 -26.206 -36.629  1.00 56.00           O
ATOM   4363  N   SER D 187     -44.940 -24.685 -35.249  1.00 42.78           N
ATOM   4364  CA  SER D 187     -45.822 -24.970 -34.126  1.00 41.62           C
ATOM   4365  C   SER D 187     -46.714 -23.765 -33.875  1.00 38.03           C
ATOM   4366  O   SER D 187     -46.231 -22.628 -33.839  1.00 43.12           O
ATOM   4367  CB  SER D 187     -45.024 -25.312 -32.865  1.00 42.53           C
ATOM   4368  OG  SER D 187     -44.189 -26.440 -33.067  1.00 42.05           O
ATOM   4369  N   THR D 188     -48.011 -24.012 -33.714  1.00 37.22           N
ATOM   4370  CA  THR D 188     -48.979 -22.962 -33.440  1.00 35.96           C
ATOM   4371  C   THR D 188     -49.831 -23.350 -32.244  1.00 37.86           C
ATOM   4372  O   THR D 188     -50.144 -24.527 -32.044  1.00 41.39           O
ATOM   4373  CB  THR D 188     -49.886 -22.683 -34.646  1.00 39.92           C
ATOM   4374  OG1 THR D 188     -50.451 -23.912 -35.122  1.00 41.92           O
ATOM   4375  CG2 THR D 188     -49.101 -22.009 -35.763  1.00 37.24           C
ATOM   4376  N   TYR D 189     -50.196 -22.350 -31.449  1.00 38.36           N
ATOM   4377  CA  TYR D 189     -51.033 -22.534 -30.277  1.00 34.41           C
ATOM   4378  C   TYR D 189     -52.138 -21.490 -30.304  1.00 39.43           C
ATOM   4379  O   TYR D 189     -51.938 -20.370 -30.781  1.00 40.10           O
ATOM   4380  CB  TYR D 189     -50.216 -22.414 -28.983  1.00 36.08           C
ATOM   4381  CG  TYR D 189     -48.860 -23.086 -29.047  1.00 38.41           C
ATOM   4382  CD1 TYR D 189     -47.752 -22.417 -29.554  1.00 35.51           C
ATOM   4383  CD2 TYR D 189     -48.685 -24.385 -28.589  1.00 41.69           C
```

[2177]

```
ATOM   4384  CE1 TYR D 189     -46.513 -23.026 -29.615  1.00 35.55           C
ATOM   4385  CE2 TYR D 189     -47.448 -25.002 -28.642  1.00 43.24           C
ATOM   4386  CZ  TYR D 189     -46.366 -24.318 -29.156  1.00 43.04           C
ATOM   4387  OH  TYR D 189     -45.134 -24.930 -29.211  1.00 41.80           O
ATOM   4388  N   TYR D 190     -53.310 -21.865 -29.796  1.00 40.65           N
ATOM   4389  CA  TYR D 190     -54.464 -20.978 -29.800  1.00 39.08           C
ATOM   4390  C   TYR D 190     -55.256 -21.146 -28.513  1.00 37.80           C
ATOM   4391  O   TYR D 190     -55.234 -22.206 -27.882  1.00 37.50           O
ATOM   4392  CB  TYR D 190     -55.393 -21.247 -30.995  1.00 37.21           C
ATOM   4393  CG  TYR D 190     -54.754 -21.070 -32.354  1.00 36.38           C
ATOM   4394  CD1 TYR D 190     -54.769 -19.837 -32.993  1.00 39.28           C
ATOM   4395  CD2 TYR D 190     -54.153 -22.138 -33.005  1.00 33.81           C
ATOM   4396  CE1 TYR D 190     -54.195 -19.670 -34.237  1.00 36.05           C
ATOM   4397  CE2 TYR D 190     -53.575 -21.980 -34.250  1.00 34.35           C
ATOM   4398  CZ  TYR D 190     -53.600 -20.744 -34.861  1.00 37.11           C
ATOM   4399  OH  TYR D 190     -53.027 -20.581 -36.101  1.00 39.09           O
ATOM   4400  N   ALA D 191     -55.958 -20.082 -28.134  1.00 39.85           N
ATOM   4401  CA  ALA D 191     -56.904 -20.143 -27.035  1.00 40.66           C
ATOM   4402  C   ALA D 191     -58.220 -20.753 -27.508  1.00 45.30           C
ATOM   4403  O   ALA D 191     -58.546 -20.747 -28.698  1.00 46.34           O
ATOM   4404  CB  ALA D 191     -57.145 -18.751 -26.450  1.00 30.07           C
ATOM   4405  N   ASP D 192     -58.977 -21.296 -26.552  1.00 47.65           N
ATOM   4406  CA  ASP D 192     -60.239 -21.947 -26.891  1.00 49.59           C
ATOM   4407  C   ASP D 192     -61.231 -20.955 -27.489  1.00 48.64           C
ATOM   4408  O   ASP D 192     -61.971 -21.292 -28.421  1.00 48.72           O
ATOM   4409  CB  ASP D 192     -60.833 -22.625 -25.656  1.00 51.08           C
ATOM   4410  CG  ASP D 192     -60.044 -23.848 -25.225  1.00 59.22           C
ATOM   4411  OD1 ASP D 192     -59.433 -24.501 -26.096  1.00 60.86           O
ATOM   4412  OD2 ASP D 192     -60.037 -24.157 -24.015  1.00 68.99           O
ATOM   4413  N   SER D 193     -61.257 -19.725 -26.969  1.00 39.77           N
ATOM   4414  CA  SER D 193     -62.193 -18.720 -27.460  1.00 39.03           C
ATOM   4415  C   SER D 193     -61.914 -18.304 -28.899  1.00 46.31           C
ATOM   4416  O   SER D 193     -62.800 -17.732 -29.545  1.00 45.41           O
ATOM   4417  CB  SER D 193     -62.162 -17.490 -26.553  1.00 44.83           C
ATOM   4418  OG  SER D 193     -60.900 -16.846 -26.616  1.00 45.92           O
ATOM   4419  N   VAL D 194     -60.715 -18.568 -29.417  1.00 43.39           N
ATOM   4420  CA  VAL D 194     -60.358 -18.207 -30.785  1.00 47.41           C
ATOM   4421  C   VAL D 194     -60.138 -19.424 -31.664  1.00 49.10           C
ATOM   4422  O   VAL D 194     -59.806 -19.267 -32.849  1.00 48.65           O
ATOM   4423  CB  VAL D 194     -59.122 -17.288 -30.826  1.00 35.08           C
ATOM   4424  CG1 VAL D 194     -59.357 -16.045 -29.983  1.00 33.84           C
ATOM   4425  CG2 VAL D 194     -57.884 -18.036 -30.362  1.00 41.36           C
ATOM   4426  N   LYS D 195     -60.308 -20.631 -31.127  1.00 44.15           N
ATOM   4427  CA  LYS D 195     -60.144 -21.841 -31.922  1.00 48.34           C
ATOM   4428  C   LYS D 195     -61.144 -21.866 -33.071  1.00 51.18           C
ATOM   4429  O   LYS D 195     -62.335 -21.598 -32.881  1.00 48.70           O
ATOM   4430  CB  LYS D 195     -60.316 -23.076 -31.036  1.00 53.45           C
ATOM   4431  CG  LYS D 195     -60.591 -24.373 -31.788  1.00 49.57           C
ATOM   4432  CD  LYS D 195     -62.048 -24.799 -31.644  1.00 52.53           C
ATOM   4433  CE  LYS D 195     -62.338 -26.084 -32.405  1.00 56.05           C
ATOM   4434  NZ  LYS D 195     -62.144 -25.924 -33.872  1.00 52.52           N
ATOM   4435  N   GLY D 196     -60.653 -22.183 -34.269  1.00 52.17           N
ATOM   4436  CA  GLY D 196     -61.483 -22.259 -35.446  1.00 43.70           C
ATOM   4437  C   GLY D 196     -61.678 -20.949 -36.179  1.00 44.88           C
ATOM   4438  O   GLY D 196     -62.042 -20.967 -37.361  1.00 45.44           O
ATOM   4439  N   ARG D 197     -61.448 -19.815 -35.518  1.00 46.45           N
ATOM   4440  CA  ARG D 197     -61.647 -18.508 -36.129  1.00 41.38           C
ATOM   4441  C   ARG D 197     -60.362 -17.738 -36.389  1.00 43.41           C
ATOM   4442  O   ARG D 197     -60.302 -16.985 -37.364  1.00 45.87           O
ATOM   4443  CB  ARG D 197     -62.560 -17.645 -35.250  1.00 45.41           C
ATOM   4444  CG  ARG D 197     -63.914 -18.263 -34.959  1.00 45.91           C
ATOM   4445  CD  ARG D 197     -64.783 -17.329 -34.132  1.00 46.74           C
ATOM   4446  NE  ARG D 197     -64.163 -17.000 -32.851  1.00 50.04           N
ATOM   4447  CZ  ARG D 197     -63.760 -15.781 -32.509  1.00 47.93           C
ATOM   4448  NH1 ARG D 197     -63.913 -14.768 -33.350  1.00 46.91           N
ATOM   4449  NH2 ARG D 197     -63.203 -15.574 -31.325  1.00 48.31           N
ATOM   4450  N   PHE D 198     -59.341 -17.891 -35.552  1.00 42.18           N
ATOM   4451  CA  PHE D 198     -58.098 -17.156 -35.732  1.00 38.31           C
```

[2178]

```
ATOM   4452  C   PHE D 198     -57.023 -18.056 -36.327  1.00 40.32           C
ATOM   4453  O   PHE D 198     -57.045 -19.278 -36.163  1.00 47.03           O
ATOM   4454  CB  PHE D 198     -57.593 -16.563 -34.413  1.00 35.95           C
ATOM   4455  CG  PHE D 198     -58.408 -15.401 -33.904  1.00 41.19           C
ATOM   4456  CD1 PHE D 198     -59.663 -15.121 -34.421  1.00 41.45           C
ATOM   4457  CD2 PHE D 198     -57.899 -14.572 -32.918  1.00 43.58           C
ATOM   4458  CE1 PHE D 198     -60.401 -14.053 -33.950  1.00 42.83           C
ATOM   4459  CE2 PHE D 198     -58.631 -13.499 -32.447  1.00 46.62           C
ATOM   4460  CZ  PHE D 198     -59.884 -13.240 -32.964  1.00 42.40           C
ATOM   4461  N   THR D 199     -56.071 -17.428 -37.015  1.00 35.29           N
ATOM   4462  CA  THR D 199     -54.956 -18.131 -37.640  1.00 41.07           C
ATOM   4463  C   THR D 199     -53.704 -17.284 -37.486  1.00 41.11           C
ATOM   4464  O   THR D 199     -53.634 -16.179 -38.032  1.00 41.21           O
ATOM   4465  CB  THR D 199     -55.230 -18.410 -39.122  1.00 42.33           C
ATOM   4466  OG1 THR D 199     -56.480 -19.099 -39.262  1.00 37.49           O
ATOM   4467  CG2 THR D 199     -54.114 -19.256 -39.716  1.00 34.87           C
ATOM   4468  N   ILE D 200     -52.725 -17.793 -36.745  1.00 38.15           N
ATOM   4469  CA  ILE D 200     -51.467 -17.084 -36.543  1.00 36.54           C
ATOM   4470  C   ILE D 200     -50.461 -17.554 -37.584  1.00 32.78           C
ATOM   4471  O   ILE D 200     -50.391 -18.743 -37.917  1.00 34.19           O
ATOM   4472  CB  ILE D 200     -50.939 -17.291 -35.109  1.00 37.39           C
ATOM   4473  CG1 ILE D 200     -49.696 -16.431 -34.867  1.00 35.80           C
ATOM   4474  CG2 ILE D 200     -50.630 -18.758 -34.846  1.00 36.47           C
ATOM   4475  CD1 ILE D 200     -49.318 -16.310 -33.411  1.00 41.03           C
ATOM   4476  N   SER D 201     -49.686 -16.612 -38.114  1.00 36.02           N
ATOM   4477  CA  SER D 201     -48.656 -16.924 -39.092  1.00 41.48           C
ATOM   4478  C   SER D 201     -47.570 -15.864 -39.006  1.00 41.64           C
ATOM   4479  O   SER D 201     -47.740 -14.817 -38.376  1.00 45.23           O
ATOM   4480  CB  SER D 201     -49.229 -17.003 -40.510  1.00 37.60           C
ATOM   4481  OG  SER D 201     -49.794 -15.762 -40.898  1.00 37.37           O
ATOM   4482  N   ARG D 202     -46.442 -16.147 -39.651  1.00 35.99           N
ATOM   4483  CA  ARG D 202     -45.303 -15.247 -39.604  1.00 37.08           C
ATOM   4484  C   ARG D 202     -44.515 -15.371 -40.897  1.00 39.75           C
ATOM   4485  O   ARG D 202     -44.527 -16.417 -41.551  1.00 41.13           O
ATOM   4486  CB  ARG D 202     -44.407 -15.547 -38.398  1.00 38.14           C
ATOM   4487  CG  ARG D 202     -43.746 -16.914 -38.451  1.00 42.34           C
ATOM   4488  CD  ARG D 202     -43.023 -17.222 -37.156  1.00 45.61           C
ATOM   4489  NE  ARG D 202     -41.941 -16.278 -36.896  1.00 43.28           N
ATOM   4490  CZ  ARG D 202     -41.458 -16.014 -35.687  1.00 43.28           C
ATOM   4491  NH1 ARG D 202     -41.968 -16.618 -34.622  1.00 44.91           N
ATOM   4492  NH2 ARG D 202     -40.470 -15.142 -35.541  1.00 40.10           N
ATOM   4493  N   ASP D 203     -43.827 -14.289 -41.255  1.00 47.46           N
ATOM   4494  CA  ASP D 203     -42.973 -14.244 -42.439  1.00 49.63           C
ATOM   4495  C   ASP D 203     -41.602 -13.760 -41.979  1.00 48.16           C
ATOM   4496  O   ASP D 203     -41.393 -12.558 -41.788  1.00 49.17           O
ATOM   4497  CB  ASP D 203     -43.561 -13.338 -43.516  1.00 53.20           C
ATOM   4498  CG  ASP D 203     -42.808 -13.427 -44.827  1.00 57.54           C
ATOM   4499  OD1 ASP D 203     -41.930 -14.306 -44.954  1.00 64.02           O
ATOM   4500  OD2 ASP D 203     -43.099 -12.621 -45.735  1.00 60.30           O
ATOM   4501  N   ASN D 204     -40.670 -14.700 -41.803  1.00 50.65           N
ATOM   4502  CA  ASN D 204     -39.355 -14.357 -41.275  1.00 50.80           C
ATOM   4503  C   ASN D 204     -38.533 -13.527 -42.250  1.00 53.23           C
ATOM   4504  O   ASN D 204     -37.638 -12.793 -41.816  1.00 52.92           O
ATOM   4505  CB  ASN D 204     -38.593 -15.628 -40.898  1.00 48.43           C
ATOM   4506  CG  ASN D 204     -39.276 -16.409 -39.792  1.00 48.64           C
ATOM   4507  OD1 ASN D 204     -40.062 -15.858 -39.021  1.00 46.06           O
ATOM   4508  ND2 ASN D 204     -38.977 -17.700 -39.706  1.00 48.01           N
ATOM   4509  N   SER D 205     -38.814 -13.624 -43.552  1.00 53.26           N
ATOM   4510  CA  SER D 205     -38.089 -12.815 -44.525  1.00 50.77           C
ATOM   4511  C   SER D 205     -38.418 -11.334 -44.380  1.00 51.72           C
ATOM   4512  O   SER D 205     -37.595 -10.482 -44.733  1.00 48.61           O
ATOM   4513  CB  SER D 205     -38.402 -13.290 -45.943  1.00 51.37           C
ATOM   4514  OG  SER D 205     -38.032 -14.646 -46.124  1.00 52.98           O
ATOM   4515  N   LYS D 206     -39.602 -11.009 -43.862  1.00 49.99           N
ATOM   4516  CA  LYS D 206     -40.031  -9.627 -43.707  1.00 54.08           C
ATOM   4517  C   LYS D 206     -40.089  -9.176 -42.254  1.00 52.38           C
ATOM   4518  O   LYS D 206     -40.442  -8.019 -41.998  1.00 46.28           O
ATOM   4519  CB  LYS D 206     -41.402  -9.421 -44.362  1.00 53.39           C
```

[2179]

```
ATOM   4520  CG  LYS D 206     -41.481  -9.904 -45.800  1.00 55.23           C
ATOM   4521  CD  LYS D 206     -40.376  -9.306 -46.655  1.00 58.54           C
ATOM   4522  CE  LYS D 206     -40.376  -9.908 -48.052  1.00 59.60           C
ATOM   4523  NZ  LYS D 206     -40.204 -11.388 -48.019  1.00 54.86           N
ATOM   4524  N   ASN D 207     -39.752 -10.052 -41.303  1.00 53.11           N
ATOM   4525  CA  ASN D 207     -39.802  -9.736 -39.873  1.00 47.11           C
ATOM   4526  C   ASN D 207     -41.190  -9.251 -39.463  1.00 46.21           C
ATOM   4527  O   ASN D 207     -41.336  -8.278 -38.720  1.00 47.34           O
ATOM   4528  CB  ASN D 207     -38.734  -8.708 -39.493  1.00 40.84           C
ATOM   4529  CG  ASN D 207     -37.328  -9.242 -39.661  1.00 47.28           C
ATOM   4530  OD1 ASN D 207     -37.115 -10.268 -40.308  1.00 51.17           O
ATOM   4531  ND2 ASN D 207     -36.358  -8.549 -39.076  1.00 54.84           N
ATOM   4532  N   THR D 208     -42.219  -9.940 -39.947  1.00 46.00           N
ATOM   4533  CA  THR D 208     -43.600  -9.544 -39.720  1.00 44.06           C
ATOM   4534  C   THR D 208     -44.394 -10.713 -39.157  1.00 47.43           C
ATOM   4535  O   THR D 208     -44.285 -11.844 -39.640  1.00 45.06           O
ATOM   4536  CB  THR D 208     -44.255  -9.049 -41.017  1.00 46.23           C
ATOM   4537  OG1 THR D 208     -43.434  -8.034 -41.609  1.00 51.77           O
ATOM   4538  CG2 THR D 208     -45.632  -8.471 -40.732  1.00 43.06           C
ATOM   4539  N   LEU D 209     -45.199 -10.426 -38.137  1.00 42.99           N
ATOM   4540  CA  LEU D 209     -46.053 -11.411 -37.490  1.00 38.76           C
ATOM   4541  C   LEU D 209     -47.503 -11.077 -37.805  1.00 42.62           C
ATOM   4542  O   LEU D 209     -47.917  -9.918 -37.688  1.00 37.09           O
ATOM   4543  CB  LEU D 209     -45.831 -11.425 -35.976  1.00 42.09           C
ATOM   4544  CG  LEU D 209     -46.802 -12.281 -35.157  1.00 42.31           C
ATOM   4545  CD1 LEU D 209     -46.496 -13.764 -35.318  1.00 42.29           C
ATOM   4546  CD2 LEU D 209     -46.782 -11.873 -33.690  1.00 40.04           C
ATOM   4547  N   TYR D 210     -48.265 -12.083 -38.219  1.00 41.39           N
ATOM   4548  CA  TYR D 210     -49.629 -11.879 -38.675  1.00 48.61           C
ATOM   4549  C   TYR D 210     -50.607 -12.591 -37.754  1.00 45.28           C
ATOM   4550  O   TYR D 210     -50.273 -13.593 -37.115  1.00 42.99           O
ATOM   4551  CB  TYR D 210     -49.820 -12.384 -40.111  1.00 43.00           C
ATOM   4552  CG  TYR D 210     -49.023 -11.618 -41.138  1.00 45.68           C
ATOM   4553  CD1 TYR D 210     -49.388 -10.330 -41.510  1.00 44.39           C
ATOM   4554  CD2 TYR D 210     -47.908 -12.184 -41.741  1.00 46.59           C
ATOM   4555  CE1 TYR D 210     -48.661  -9.626 -42.451  1.00 53.47           C
ATOM   4556  CE2 TYR D 210     -47.175 -11.489 -42.684  1.00 53.05           C
ATOM   4557  CZ  TYR D 210     -47.555 -10.211 -43.036  1.00 55.85           C
ATOM   4558  OH  TYR D 210     -46.825  -9.516 -43.973  1.00 56.70           O
ATOM   4559  N   LEU D 211     -51.827 -12.061 -37.700  1.00 42.71           N
ATOM   4560  CA  LEU D 211     -52.926 -12.694 -36.974  1.00 43.93           C
ATOM   4561  C   LEU D 211     -54.180 -12.532 -37.826  1.00 48.75           C
ATOM   4562  O   LEU D 211     -54.763 -11.444 -37.879  1.00 52.99           O
ATOM   4563  CB  LEU D 211     -53.113 -12.085 -35.590  1.00 44.11           C
ATOM   4564  CG  LEU D 211     -54.259 -12.680 -34.769  1.00 38.28           C
ATOM   4565  CD1 LEU D 211     -53.990 -14.146 -34.471  1.00 37.84           C
ATOM   4566  CD2 LEU D 211     -54.478 -11.896 -33.485  1.00 36.94           C
ATOM   4567  N   GLN D 212     -54.585 -13.607 -38.494  1.00 43.17           N
ATOM   4568  CA  GLN D 212     -55.829 -13.598 -39.247  1.00 41.57           C
ATOM   4569  C   GLN D 212     -56.994 -13.796 -38.287  1.00 41.45           C
ATOM   4570  O   GLN D 212     -56.972 -14.705 -37.452  1.00 46.68           O
ATOM   4571  CB  GLN D 212     -55.821 -14.693 -40.314  1.00 41.36           C
ATOM   4572  CG  GLN D 212     -57.092 -14.767 -41.146  1.00 46.32           C
ATOM   4573  CD  GLN D 212     -57.280 -13.552 -42.035  1.00 50.26           C
ATOM   4574  OE1 GLN D 212     -56.313 -12.912 -42.445  1.00 50.55           O
ATOM   4575  NE2 GLN D 212     -58.532 -13.229 -42.336  1.00 51.96           N
ATOM   4576  N   MET D 213     -58.008 -12.945 -38.403  1.00 43.57           N
ATOM   4577  CA  MET D 213     -59.178 -12.990 -37.535  1.00 47.01           C
ATOM   4578  C   MET D 213     -60.418 -13.112 -38.406  1.00 52.52           C
ATOM   4579  O   MET D 213     -60.669 -12.251 -39.255  1.00 50.07           O
ATOM   4580  CB  MET D 213     -59.257 -11.741 -36.654  1.00 45.36           C
ATOM   4581  CG  MET D 213     -58.116 -11.602 -35.660  1.00 44.14           C
ATOM   4582  SD  MET D 213     -57.932  -9.910 -35.061  1.00 51.83           S
ATOM   4583  CE  MET D 213     -59.319  -9.790 -33.935  1.00 46.10           C
ATOM   4584  N   ASN D 214     -61.186 -14.177 -38.195  1.00 54.31           N
ATOM   4585  CA  ASN D 214     -62.419 -14.419 -38.925  1.00 52.87           C
ATOM   4586  C   ASN D 214     -63.572 -14.600 -37.948  1.00 50.74           C
ATOM   4587  O   ASN D 214     -63.374 -15.007 -36.799  1.00 49.25           O
```

[2180]

```
ATOM   4588  CB  ASN D 214     -62.299 -15.657 -39.825  1.00 48.72           C
ATOM   4589  CG  ASN D 214     -61.206 -15.516 -40.867  1.00 52.03           C
ATOM   4590  OD1 ASN D 214     -60.956 -14.423 -41.374  1.00 54.33           O
ATOM   4591  ND2 ASN D 214     -60.549 -16.624 -41.193  1.00 50.94           N
ATOM   4592  N   SER D 215     -64.780 -14.283 -38.417  1.00 48.50           N
ATOM   4593  CA  SER D 215     -66.013 -14.475 -37.654  1.00 46.90           C
ATOM   4594  C   SER D 215     -65.937 -13.764 -36.302  1.00 48.88           C
ATOM   4595  O   SER D 215     -66.102 -14.362 -35.237  1.00 49.94           O
ATOM   4596  CB  SER D 215     -66.307 -15.968 -37.478  1.00 48.25           C
ATOM   4597  OG  SER D 215     -66.202 -16.646 -38.716  1.00 48.98           O
ATOM   4598  N   LEU D 216     -65.689 -12.460 -36.367  1.00 51.68           N
ATOM   4599  CA  LEU D 216     -65.482 -11.682 -35.157  1.00 52.00           C
ATOM   4600  C   LEU D 216     -66.796 -11.440 -34.424  1.00 50.57           C
ATOM   4601  O   LEU D 216     -67.857 -11.271 -35.031  1.00 51.11           O
ATOM   4602  CB  LEU D 216     -64.814 -10.349 -35.494  1.00 51.29           C
ATOM   4603  CG  LEU D 216     -63.456 -10.495 -36.180  1.00 50.53           C
ATOM   4604  CD1 LEU D 216     -62.841  -9.140 -36.481  1.00 51.61           C
ATOM   4605  CD2 LEU D 216     -62.529 -11.328 -35.315  1.00 48.73           C
ATOM   4606  N   ARG D 217     -66.710 -11.425 -33.100  1.00 54.97           N
ATOM   4607  CA  ARG D 217     -67.844 -11.196 -32.221  1.00 56.90           C
ATOM   4608  C   ARG D 217     -67.583  -9.962 -31.369  1.00 55.04           C
ATOM   4609  O   ARG D 217     -66.476  -9.418 -31.344  1.00 55.32           O
ATOM   4610  CB  ARG D 217     -68.107 -12.414 -31.326  1.00 58.52           C
ATOM   4611  CG  ARG D 217     -68.381 -13.699 -32.085  1.00 58.74           C
ATOM   4612  CD  ARG D 217     -68.245 -14.911 -31.176  1.00 54.65           C
ATOM   4613  NE  ARG D 217     -66.936 -14.967 -30.531  1.00 52.64           N
ATOM   4614  CZ  ARG D 217     -66.490 -16.007 -29.833  1.00 58.85           C
ATOM   4615  NH1 ARG D 217     -67.247 -17.084 -29.688  1.00 59.63           N
ATOM   4616  NH2 ARG D 217     -65.287 -15.971 -29.278  1.00 59.93           N
ATOM   4617  N   ALA D 218     -68.632  -9.512 -30.676  1.00 56.34           N
ATOM   4618  CA  ALA D 218     -68.486  -8.374 -29.774  1.00 59.15           C
ATOM   4619  C   ALA D 218     -67.476  -8.664 -28.671  1.00 55.09           C
ATOM   4620  O   ALA D 218     -66.825  -7.741 -28.167  1.00 55.12           O
ATOM   4621  CB  ALA D 218     -69.841  -8.000 -29.176  1.00 55.20           C
ATOM   4622  N   GLU D 219     -67.335  -9.934 -28.282  1.00 52.64           N
ATOM   4623  CA  GLU D 219     -66.347 -10.301 -27.273  1.00 52.04           C
ATOM   4624  C   GLU D 219     -64.925 -10.043 -27.753  1.00 51.83           C
ATOM   4625  O   GLU D 219     -64.028  -9.805 -26.937  1.00 53.26           O
ATOM   4626  CB  GLU D 219     -66.513 -11.773 -26.890  1.00 58.45           C
ATOM   4627  CG  GLU D 219     -67.850 -12.125 -26.241  1.00 74.40           C
ATOM   4628  CD  GLU D 219     -68.975 -12.336 -27.246  1.00 76.39           C
ATOM   4629  OE1 GLU D 219     -68.949 -11.711 -28.328  1.00 62.84           O
ATOM   4630  OE2 GLU D 219     -69.889 -13.134 -26.950  1.00 81.17           O
ATOM   4631  N   ASP D 220     -64.698 -10.089 -29.064  1.00 52.92           N
ATOM   4632  CA  ASP D 220     -63.366  -9.918 -29.628  1.00 46.37           C
ATOM   4633  C   ASP D 220     -62.895  -8.468 -29.637  1.00 45.57           C
ATOM   4634  O   ASP D 220     -61.754  -8.211 -30.037  1.00 39.04           O
ATOM   4635  CB  ASP D 220     -63.329 -10.477 -31.053  1.00 47.42           C
ATOM   4636  CG  ASP D 220     -63.705 -11.943 -31.111  1.00 51.96           C
ATOM   4637  OD1 ASP D 220     -63.424 -12.669 -30.134  1.00 55.25           O
ATOM   4638  OD2 ASP D 220     -64.286 -12.369 -32.131  1.00 53.98           O
ATOM   4639  N   THR D 221     -63.731  -7.523 -29.209  1.00 43.49           N
ATOM   4640  CA  THR D 221     -63.322  -6.124 -29.127  1.00 43.45           C
ATOM   4641  C   THR D 221     -62.261  -5.975 -28.044  1.00 46.18           C
ATOM   4642  O   THR D 221     -62.547  -6.151 -26.855  1.00 42.52           O
ATOM   4643  CB  THR D 221     -64.526  -5.233 -28.835  1.00 49.91           C
ATOM   4644  OG1 THR D 221     -65.437  -5.278 -29.941  1.00 52.95           O
ATOM   4645  CG2 THR D 221     -64.080  -3.796 -28.609  1.00 45.08           C
ATOM   4646  N   ALA D 222     -61.038  -5.647 -28.451  1.00 41.63           N
ATOM   4647  CA  ALA D 222     -59.914  -5.574 -27.528  1.00 42.41           C
ATOM   4648  C   ALA D 222     -58.744  -4.905 -28.234  1.00 45.86           C
ATOM   4649  O   ALA D 222     -58.738  -4.741 -29.457  1.00 43.74           O
ATOM   4650  CB  ALA D 222     -59.512  -6.962 -27.022  1.00 43.25           C
ATOM   4651  N   VAL D 223     -57.755  -4.513 -27.438  1.00 43.94           N
ATOM   4652  CA  VAL D 223     -56.473  -4.049 -27.953  1.00 40.72           C
ATOM   4653  C   VAL D 223     -55.545  -5.254 -28.037  1.00 36.61           C
ATOM   4654  O   VAL D 223     -55.324  -5.948 -27.039  1.00 47.94           O
ATOM   4655  CB  VAL D 223     -55.878  -2.950 -27.060  1.00 43.26           C
```

[2181]

```
ATOM   4656  CG1 VAL D 223     -54.515  -2.521 -27.582  1.00 44.34           C
ATOM   4657  CG2 VAL D 223     -56.825  -1.764 -26.975  1.00 35.18           C
ATOM   4658  N   TYR D 224     -55.009  -5.510 -29.223  1.00 43.13           N
ATOM   4659  CA  TYR D 224     -54.186  -6.686 -29.473  1.00 43.94           C
ATOM   4660  C   TYR D 224     -52.717  -6.285 -29.468  1.00 47.81           C
ATOM   4661  O   TYR D 224     -52.300  -5.425 -30.252  1.00 50.20           O
ATOM   4662  CB  TYR D 224     -54.574  -7.346 -30.795  1.00 39.80           C
ATOM   4663  CG  TYR D 224     -55.923  -8.023 -30.738  1.00 36.11           C
ATOM   4664  CD1 TYR D 224     -57.096  -7.285 -30.811  1.00 35.22           C
ATOM   4665  CD2 TYR D 224     -56.022  -9.401 -30.600  1.00 32.64           C
ATOM   4666  CE1 TYR D 224     -58.330  -7.900 -30.748  1.00 37.84           C
ATOM   4667  CE2 TYR D 224     -57.251 -10.024 -30.541  1.00 36.70           C
ATOM   4668  CZ  TYR D 224     -58.402  -9.270 -30.614  1.00 38.10           C
ATOM   4669  OH  TYR D 224     -59.629  -9.888 -30.553  1.00 44.88           O
ATOM   4670  N   TYR D 225     -51.943  -6.909 -28.587  1.00 44.28           N
ATOM   4671  CA  TYR D 225     -50.535  -6.594 -28.410  1.00 46.14           C
ATOM   4672  C   TYR D 225     -49.662  -7.657 -29.064  1.00 43.17           C
ATOM   4673  O   TYR D 225     -49.988  -8.848 -29.039  1.00 42.30           O
ATOM   4674  CB  TYR D 225     -50.190  -6.480 -26.923  1.00 39.73           C
ATOM   4675  CG  TYR D 225     -50.932  -5.374 -26.202  1.00 44.70           C
ATOM   4676  CD1 TYR D 225     -50.414  -4.087 -26.142  1.00 46.43           C
ATOM   4677  CD2 TYR D 225     -52.150  -5.619 -25.581  1.00 44.23           C
ATOM   4678  CE1 TYR D 225     -51.090  -3.073 -25.484  1.00 45.01           C
ATOM   4679  CE2 TYR D 225     -52.833  -4.611 -24.921  1.00 42.71           C
ATOM   4680  CZ  TYR D 225     -52.298  -3.340 -24.876  1.00 45.10           C
ATOM   4681  OH  TYR D 225     -52.974  -2.334 -24.221  1.00 40.70           O
ATOM   4682  N   CYS D 226     -48.556  -7.215 -29.654  1.00 41.46           N
ATOM   4683  CA  CYS D 226     -47.521  -8.109 -30.152  1.00 41.42           C
ATOM   4684  C   CYS D 226     -46.557  -8.454 -29.023  1.00 40.99           C
ATOM   4685  O   CYS D 226     -46.234  -7.605 -28.188  1.00 41.24           O
ATOM   4686  CB  CYS D 226     -46.769  -7.455 -31.312  1.00 44.11           C
ATOM   4687  SG  CYS D 226     -45.711  -8.543 -32.282  1.00 62.03           S
ATOM   4688  N   ALA D 227     -46.102  -9.706 -28.997  1.00 36.85           N
ATOM   4689  CA  ALA D 227     -45.277 -10.190 -27.898  1.00 40.70           C
ATOM   4690  C   ALA D 227     -44.134 -11.042 -28.428  1.00 41.43           C
ATOM   4691  O   ALA D 227     -44.348 -11.930 -29.259  1.00 38.18           O
ATOM   4692  CB  ALA D 227     -46.112 -10.997 -26.898  1.00 38.28           C
ATOM   4693  N   ARG D 228     -42.925 -10.765 -27.943  1.00 37.82           N
ATOM   4694  CA  ARG D 228     -41.739 -11.554 -28.247  1.00 33.76           C
ATOM   4695  C   ARG D 228     -41.397 -12.428 -27.047  1.00 41.07           C
ATOM   4696  O   ARG D 228     -41.325 -11.934 -25.916  1.00 37.01           O
ATOM   4697  CB  ARG D 228     -40.560 -10.647 -28.602  1.00 34.26           C
ATOM   4698  CG  ARG D 228     -39.199 -11.330 -28.577  1.00 38.40           C
ATOM   4699  CD  ARG D 228     -38.110 -10.356 -28.998  1.00 44.40           C
ATOM   4700  NE  ARG D 228     -36.766 -10.822 -28.667  1.00 40.81           N
ATOM   4701  CZ  ARG D 228     -36.075 -10.407 -27.610  1.00 42.38           C
ATOM   4702  NH1 ARG D 228     -36.602  -9.521 -26.777  1.00 31.56           N
ATOM   4703  NH2 ARG D 228     -34.855 -10.875 -27.383  1.00 51.17           N
ATOM   4704  N   ASP D 229     -41.188 -13.719 -27.294  1.00 39.36           N
ATOM   4705  CA  ASP D 229     -40.961 -14.696 -26.237  1.00 30.03           C
ATOM   4706  C   ASP D 229     -39.564 -15.286 -26.360  1.00 34.42           C
ATOM   4707  O   ASP D 229     -39.174 -15.750 -27.437  1.00 33.38           O
ATOM   4708  CB  ASP D 229     -42.006 -15.812 -26.291  1.00 32.41           C
ATOM   4709  CG  ASP D 229     -43.426 -15.280 -26.346  1.00 42.95           C
ATOM   4710  OD1 ASP D 229     -43.708 -14.261 -25.681  1.00 38.30           O
ATOM   4711  OD2 ASP D 229     -44.262 -15.888 -27.050  1.00 49.77           O
ATOM   4712  N   LEU D 230     -38.817 -15.278 -25.251  1.00 33.15           N
ATOM   4713  CA  LEU D 230     -37.511 -15.932 -25.233  1.00 31.41           C
ATOM   4714  C   LEU D 230     -37.661 -17.433 -25.440  1.00 30.69           C
ATOM   4715  O   LEU D 230     -36.920 -18.043 -26.219  1.00 37.06           O
ATOM   4716  CB  LEU D 230     -36.785 -15.623 -23.922  1.00 29.04           C
ATOM   4717  CG  LEU D 230     -36.678 -14.136 -23.566  1.00 29.99           C
ATOM   4718  CD1 LEU D 230     -36.456 -13.947 -22.075  1.00 30.71           C
ATOM   4719  CD2 LEU D 230     -35.591 -13.435 -24.373  1.00 31.37           C
ATOM   4720  N   ILE D 231     -38.604 -18.050 -24.727  1.00 32.11           N
ATOM   4721  CA  ILE D 231     -39.076 -19.397 -25.014  1.00 31.84           C
ATOM   4722  C   ILE D 231     -40.597 -19.364 -24.944  1.00 32.18           C
ATOM   4723  O   ILE D 231     -41.199 -18.365 -24.547  1.00 32.11           O
```

[2182]

```
ATOM   4724  CB  ILE D 231     -38.506 -20.466 -24.056  1.00 32.97           C
ATOM   4725  CG1 ILE D 231     -38.883 -20.156 -22.607  1.00 33.38           C
ATOM   4726  CG2 ILE D 231     -36.997 -20.591 -24.219  1.00 34.39           C
ATOM   4727  CD1 ILE D 231     -38.625 -21.301 -21.658  1.00 29.69           C
ATOM   4728  N   HIS D 232     -41.217 -20.475 -25.337  1.00 31.92           N
ATOM   4729  CA  HIS D 232     -42.673 -20.555 -25.359  1.00 33.31           C
ATOM   4730  C   HIS D 232     -43.271 -20.235 -23.995  1.00 38.39           C
ATOM   4731  O   HIS D 232     -43.094 -20.995 -23.038  1.00 36.99           O
ATOM   4732  CB  HIS D 232     -43.133 -21.938 -25.818  1.00 30.30           C
ATOM   4733  CG  HIS D 232     -44.603 -22.163 -25.652  1.00 41.31           C
ATOM   4734  ND1 HIS D 232     -45.150 -22.687 -24.500  1.00 32.95           N
ATOM   4735  CD2 HIS D 232     -45.643 -21.922 -26.486  1.00 36.30           C
ATOM   4736  CE1 HIS D 232     -46.462 -22.765 -24.634  1.00 38.36           C
ATOM   4737  NE2 HIS D 232     -46.786 -22.308 -25.831  1.00 43.71           N
ATOM   4738  N   GLY D 233     -43.967 -19.103 -23.895  1.00 38.84           N
ATOM   4739  CA  GLY D 233     -44.644 -18.718 -22.675  1.00 38.17           C
ATOM   4740  C   GLY D 233     -43.894 -17.744 -21.793  1.00 32.85           C
ATOM   4741  O   GLY D 233     -44.406 -17.382 -20.728  1.00 34.04           O
ATOM   4742  N   VAL D 234     -42.711 -17.305 -22.200  1.00 36.74           N
ATOM   4743  CA  VAL D 234     -41.916 -16.344 -21.438  1.00 35.03           C
ATOM   4744  C   VAL D 234     -41.808 -15.096 -22.305  1.00 33.26           C
ATOM   4745  O   VAL D 234     -40.901 -14.962 -23.130  1.00 34.83           O
ATOM   4746  CB  VAL D 234     -40.537 -16.891 -21.062  1.00 30.57           C
ATOM   4747  CG1 VAL D 234     -39.722 -15.830 -20.336  1.00 25.44           C
ATOM   4748  CG2 VAL D 234     -40.680 -18.135 -20.203  1.00 33.31           C
ATOM   4749  N   THR D 235     -42.741 -14.169 -22.121  1.00 35.49           N
ATOM   4750  CA  THR D 235     -42.756 -12.940 -22.899  1.00 37.97           C
ATOM   4751  C   THR D 235     -41.757 -11.941 -22.330  1.00 38.86           C
ATOM   4752  O   THR D 235     -41.634 -11.789 -21.111  1.00 41.10           O
ATOM   4753  CB  THR D 235     -44.160 -12.334 -22.909  1.00 41.12           C
ATOM   4754  OG1 THR D 235     -45.101 -13.307 -23.383  1.00 37.45           O
ATOM   4755  CG2 THR D 235     -44.208 -11.113 -23.807  1.00 46.10           C
ATOM   4756  N   ARG D 236     -41.034 -11.265 -23.219  1.00 33.90           N
ATOM   4757  CA  ARG D 236     -40.013 -10.306 -22.823  1.00 34.22           C
ATOM   4758  C   ARG D 236     -40.284  -8.889 -23.307  1.00 36.58           C
ATOM   4759  O   ARG D 236     -39.894  -7.938 -22.627  1.00 38.10           O
ATOM   4760  CB  ARG D 236     -38.633 -10.758 -23.335  1.00 33.85           C
ATOM   4761  CG  ARG D 236     -37.470  -9.854 -22.944  1.00 22.18           C
ATOM   4762  CD  ARG D 236     -37.382  -9.683 -21.434  1.00 42.09           C
ATOM   4763  NE  ARG D 236     -36.225  -8.886 -21.036  1.00 42.39           N
ATOM   4764  CZ  ARG D 236     -36.191  -7.557 -21.050  1.00 46.50           C
ATOM   4765  NH1 ARG D 236     -37.253  -6.868 -21.444  1.00 44.87           N
ATOM   4766  NH2 ARG D 236     -35.092  -6.917 -20.673  1.00 51.86           N
ATOM   4767  N   ASN D 237     -40.949  -8.719 -24.450  1.00 36.83           N
ATOM   4768  CA  ASN D 237     -41.208  -7.399 -25.003  1.00 35.37           C
ATOM   4769  C   ASN D 237     -42.642  -7.317 -25.505  1.00 42.75           C
ATOM   4770  O   ASN D 237     -43.220  -8.312 -25.951  1.00 45.95           O
ATOM   4771  CB  ASN D 237     -40.240  -7.070 -26.147  1.00 37.17           C
ATOM   4772  CG  ASN D 237     -38.798  -7.375 -25.796  1.00 37.46           C
ATOM   4773  OD1 ASN D 237     -38.358  -8.520 -25.880  1.00 36.41           O
ATOM   4774  ND2 ASN D 237     -38.056  -6.350 -25.394  1.00 36.37           N
ATOM   4775  N   TRP D 238     -43.209  -6.116 -25.427  1.00 48.26           N
ATOM   4776  CA  TRP D 238     -44.569  -5.849 -25.870  1.00 46.68           C
ATOM   4777  C   TRP D 238     -44.580  -4.661 -26.819  1.00 51.72           C
ATOM   4778  O   TRP D 238     -43.723  -3.776 -26.744  1.00 48.03           O
ATOM   4779  CB  TRP D 238     -45.506  -5.566 -24.688  1.00 45.71           C
ATOM   4780  CG  TRP D 238     -45.745  -6.749 -23.808  1.00 55.60           C
ATOM   4781  CD1 TRP D 238     -44.831  -7.388 -23.024  1.00 55.44           C
ATOM   4782  CD2 TRP D 238     -46.994  -7.416 -23.595  1.00 50.03           C
ATOM   4783  NE1 TRP D 238     -45.429  -8.425 -22.351  1.00 58.59           N
ATOM   4784  CE2 TRP D 238     -46.758  -8.462 -22.682  1.00 54.26           C
ATOM   4785  CE3 TRP D 238     -48.288  -7.233 -24.089  1.00 49.97           C
ATOM   4786  CZ2 TRP D 238     -47.767  -9.322 -22.256  1.00 54.45           C
ATOM   4787  CZ3 TRP D 238     -49.288  -8.089 -23.666  1.00 51.50           C
ATOM   4788  CH2 TRP D 238     -49.022  -9.120 -22.759  1.00 44.67           C
ATOM   4789  N   GLY D 239     -45.566  -4.649 -27.714  1.00 52.65           N
ATOM   4790  CA  GLY D 239     -45.794  -3.526 -28.595  1.00 44.03           C
ATOM   4791  C   GLY D 239     -46.779  -2.545 -27.989  1.00 48.12           C
```

[2183]

```
ATOM   4792  O   GLY D 239     -47.206  -2.671 -26.841  1.00 52.52           O
ATOM   4793  N   GLN D 240     -47.150  -1.546 -28.790  1.00 56.40           N
ATOM   4794  CA  GLN D 240     -48.100  -0.554 -28.302  1.00 55.42           C
ATOM   4795  C   GLN D 240     -49.520  -1.100 -28.262  1.00 50.02           C
ATOM   4796  O   GLN D 240     -50.305  -0.703 -27.395  1.00 48.20           O
ATOM   4797  CB  GLN D 240     -48.056   0.703 -29.173  1.00 66.67           C
ATOM   4798  CG  GLN D 240     -46.661   1.191 -29.516  1.00 68.39           C
ATOM   4799  CD  GLN D 240     -46.685   2.323 -30.524  1.00 72.35           C
ATOM   4800  OE1 GLN D 240     -47.652   2.484 -31.268  1.00 73.49           O
ATOM   4801  NE2 GLN D 240     -45.621   3.119 -30.549  1.00 75.12           N
ATOM   4802  N   GLY D 241     -49.856  -2.019 -29.163  1.00 44.60           N
ATOM   4803  CA  GLY D 241     -51.202  -2.548 -29.243  1.00 51.40           C
ATOM   4804  C   GLY D 241     -52.053  -1.831 -30.270  1.00 52.80           C
ATOM   4805  O   GLY D 241     -51.924  -0.617 -30.456  1.00 52.31           O
ATOM   4806  N   THR D 242     -52.925  -2.572 -30.949  1.00 45.85           N
ATOM   4807  CA  THR D 242     -53.823  -2.013 -31.948  1.00 51.14           C
ATOM   4808  C   THR D 242     -55.265  -2.288 -31.543  1.00 50.20           C
ATOM   4809  O   THR D 242     -55.590  -3.377 -31.060  1.00 47.50           O
ATOM   4810  CB  THR D 242     -53.532  -2.586 -33.344  1.00 50.40           C
ATOM   4811  OG1 THR D 242     -54.473  -2.060 -34.286  1.00 52.07           O
ATOM   4812  CG2 THR D 242     -53.611  -4.105 -33.339  1.00 50.94           C
ATOM   4813  N   LEU D 243     -56.123  -1.292 -31.741  1.00 49.30           N
ATOM   4814  CA  LEU D 243     -57.497  -1.340 -31.260  1.00 44.49           C
ATOM   4815  C   LEU D 243     -58.412  -1.939 -32.323  1.00 51.07           C
ATOM   4816  O   LEU D 243     -58.398  -1.509 -33.481  1.00 53.86           O
ATOM   4817  CB  LEU D 243     -57.960   0.064 -30.865  1.00 39.59           C
ATOM   4818  CG  LEU D 243     -59.336   0.297 -30.233  1.00 48.91           C
ATOM   4819  CD1 LEU D 243     -60.380   0.594 -31.298  1.00 58.43           C
ATOM   4820  CD2 LEU D 243     -59.761  -0.880 -29.361  1.00 41.92           C
ATOM   4821  N   VAL D 244     -59.197  -2.936 -31.923  1.00 47.87           N
ATOM   4822  CA  VAL D 244     -60.158  -3.609 -32.790  1.00 41.27           C
ATOM   4823  C   VAL D 244     -61.522  -3.525 -32.120  1.00 46.44           C
ATOM   4824  O   VAL D 244     -61.685  -3.974 -30.979  1.00 50.20           O
ATOM   4825  CB  VAL D 244     -59.768  -5.072 -33.053  1.00 44.73           C
ATOM   4826  CG1 VAL D 244     -60.874  -5.785 -33.817  1.00 46.43           C
ATOM   4827  CG2 VAL D 244     -58.454  -5.145 -33.815  1.00 46.32           C
ATOM   4828  N   THR D 245     -62.498  -2.958 -32.824  1.00 51.65           N
ATOM   4829  CA  THR D 245     -63.852  -2.807 -32.306  1.00 51.40           C
ATOM   4830  C   THR D 245     -64.833  -3.537 -33.210  1.00 56.34           C
ATOM   4831  O   THR D 245     -64.774  -3.401 -34.437  1.00 57.60           O
ATOM   4832  CB  THR D 245     -64.244  -1.331 -32.201  1.00 52.88           C
ATOM   4833  OG1 THR D 245     -63.250  -0.622 -31.454  1.00 57.53           O
ATOM   4834  CG2 THR D 245     -65.589  -1.184 -31.504  1.00 54.45           C
ATOM   4835  N   VAL D 246     -65.732  -4.305 -32.600  1.00 56.48           N
ATOM   4836  CA  VAL D 246     -66.770  -5.043 -33.310  1.00 58.82           C
ATOM   4837  C   VAL D 246     -68.113  -4.612 -32.739  1.00 63.29           C
ATOM   4838  O   VAL D 246     -68.395  -4.851 -31.557  1.00 65.90           O
ATOM   4839  CB  VAL D 246     -66.583  -6.563 -33.178  1.00 58.55           C
ATOM   4840  CG1 VAL D 246     -67.682  -7.298 -33.925  1.00 55.79           C
ATOM   4841  CG2 VAL D 246     -65.210  -6.980 -33.686  1.00 56.22           C
ATOM   4842  N   SER D 247     -68.941  -3.989 -33.574  1.00 66.20           N
ATOM   4843  CA  SER D 247     -70.242  -3.510 -33.131  1.00 66.77           C
ATOM   4844  C   SER D 247     -71.147  -3.329 -34.340  1.00 71.51           C
ATOM   4845  O   SER D 247     -70.676  -3.089 -35.455  1.00 70.46           O
ATOM   4846  CB  SER D 247     -70.121  -2.195 -32.353  1.00 65.49           C
ATOM   4847  OG  SER D 247     -69.831  -1.115 -33.223  1.00 70.43           O
ATOM   4848  N   ALA D 248     -72.450  -3.441 -34.102  1.00 70.22           N
ATOM   4849  CA  ALA D 248     -73.444  -3.282 -35.156  1.00 59.97           C
ATOM   4850  C   ALA D 248     -73.516  -1.833 -35.629  1.00 62.28           C
ATOM   4851  O   ALA D 248     -74.501  -1.135 -35.384  1.00 59.10           O
ATOM   4852  CB  ALA D 248     -74.807  -3.750 -34.670  1.00 54.73           C
TER
HETATM 4853  O1  SO4 E   1     -13.042 -29.312 -11.307  1.00 39.93           O
HETATM 4854  O2  SO4 E   1     -15.148 -28.210 -11.045  1.00 42.67           O
HETATM 4855  O3  SO4 E   1     -14.672 -30.188  -9.811  1.00 44.34           O
HETATM 4856  O4  SO4 E   1     -13.540 -28.148  -9.287  1.00 45.86           O
HETATM 4857  S   SO4 E   1     -14.100 -28.963 -10.363  1.00 49.95           S
HETATM 4858  O1  SO4 E   2     -15.282 -30.271 -33.053  1.00 62.94           O
```

[2184]

```
HETATM 4859  O2  SO4 E   2     -16.525 -31.196 -31.234  1.00 43.52           O
HETATM 4860  O3  SO4 E   2     -14.202 -30.735 -30.984  1.00 45.85           O
HETATM 4861  O4  SO4 E   2     -15.767 -28.933 -31.146  1.00 46.26           O
HETATM 4862  S   SO4 E   2     -15.445 -30.284 -31.602  1.00 57.83           S
HETATM 4863  O1  SO4 E   3     -40.284 -25.927 -36.081  1.00 54.11           O
HETATM 4864  O2  SO4 E   3     -41.994 -25.778 -34.421  1.00 48.87           O
HETATM 4865  O3  SO4 E   3     -40.223 -27.353 -34.166  1.00 60.27           O
HETATM 4866  O4  SO4 E   3     -39.785 -25.020 -33.935  1.00 50.13           O
HETATM 4867  S   SO4 E   3     -40.572 -26.019 -34.651  1.00 61.86           S
HETATM 4868  O1  SO4 E   4     -46.207 -31.756 -15.849  1.00 63.78           O
HETATM 4869  O2  SO4 E   4     -47.926 -30.156 -15.422  1.00 66.79           O
HETATM 4870  O3  SO4 E   4     -47.514 -31.910 -13.860  1.00 61.76           O
HETATM 4871  O4  SO4 E   4     -45.934 -30.139 -14.118  1.00 50.08           O
HETATM 4872  S   SO4 E   4     -46.895 -30.991 -14.812  1.00 61.73           S
HETATM 4873  O   HOH S   1     -38.396 -17.571 -29.098  1.00 31.50           O
HETATM 4874  O   HOH S   2     -46.272 -22.425 -13.651  1.00 33.38           O
HETATM 4875  O   HOH S   3     -24.612 -45.175 -33.984  1.00 37.94           O
HETATM 4876  O   HOH S   4     -42.268 -23.273 -23.205  1.00 35.55           O
HETATM 4877  O   HOH S   5     -20.260 -45.325  -8.929  1.00 38.33           O
HETATM 4878  O   HOH S   6      -3.517 -32.878 -32.229  1.00 36.92           O
HETATM 4879  O   HOH S   7     -40.619  -1.252   4.187  1.00 35.36           O
HETATM 4880  O   HOH S   8      10.188 -45.600 -37.409  1.00 50.25           O
HETATM 4881  O   HOH S   9     -17.342 -14.474 -36.403  1.00 45.36           O
HETATM 4882  O   HOH S  10     -38.929 -22.647 -33.600  1.00 34.97           O
HETATM 4883  O   HOH S  11     -30.932 -12.385 -16.864  1.00 39.82           O
HETATM 4884  O   HOH S  12     -12.791 -36.965 -39.991  1.00 47.66           O
HETATM 4885  O   HOH S  13     -31.592 -37.775 -52.324  1.00 58.88           O
HETATM 4886  O   HOH S  14     -36.056 -26.336 -65.671  1.00 62.99           O
HETATM 4887  O   HOH S  15     -51.989 -22.814 -36.962  1.00 34.02           O
HETATM 4888  O   HOH S  16     -12.225 -42.206 -22.137  1.00 39.79           O
HETATM 4889  O   HOH S  17     -45.149 -27.227 -29.114  1.00 39.80           O
HETATM 4890  O   HOH S  18     -29.412 -23.064 -18.997  1.00 41.56           O
HETATM 4891  O   HOH S  19      10.634 -41.515 -33.660  1.00 61.38           O
HETATM 4892  O   HOH S  20     -38.725 -29.113 -52.166  1.00 56.02           O
HETATM 4893  O   HOH S  21     -42.718 -33.190 -38.576  1.00 56.05           O
HETATM 4894  O   HOH S  22     -55.016 -15.565 -20.394  1.00 42.09           O
HETATM 4895  O   HOH S  23     -19.498 -33.462 -60.556  1.00 60.65           O
HETATM 4896  O   HOH S  24     -26.371 -52.020 -34.373  1.00 48.74           O
HETATM 4897  O   HOH S  25     -42.036  -3.004 -28.023  1.00 45.51           O
HETATM 4898  O   HOH S  26     -50.000 -10.390 -46.620  1.00 53.26           O
HETATM 4899  O   HOH S  27     -38.031 -25.471 -60.960  1.00 51.92           O
HETATM 4900  O   HOH S  28     -51.942   0.218 -27.725  1.00 49.93           O
HETATM 4901  O   HOH S  29      -6.593 -39.761  -4.686  1.00 31.17           O
HETATM 4902  O   HOH S  30     -20.102 -30.260 -13.883  1.00 42.70           O
HETATM 4903  O   HOH S  31     -26.194 -49.246 -22.641  1.00 34.23           O
HETATM 4904  O   HOH S  32     -37.705 -32.111 -59.577  1.00 58.89           O
HETATM 4905  O   HOH S  33     -31.348 -32.933 -11.564  1.00 51.97           O
HETATM 4906  O   HOH S  34     -30.303 -41.905 -42.727  1.00 66.18           O
HETATM 4907  O   HOH S  35       0.944 -46.441 -41.988  1.00 56.37           O
HETATM 4908  O   HOH S  36     -77.074  -0.888 -35.765  1.00 57.95           O
HETATM 4909  O   HOH S  37     -43.771 -30.701 -17.131  1.00 44.75           O
HETATM 4910  O   HOH S  38      -8.830 -29.100 -26.972  1.00 42.31           O
HETATM 4911  O   HOH S  39      -8.061 -29.386 -29.036  1.00 40.29           O
HETATM 4912  O   HOH S  40     -12.412 -30.429 -25.132  1.00 26.95           O
HETATM 4913  O   HOH S  41     -45.738 -23.197   1.150  1.00 59.84           O
HETATM 4914  O   HOH S  42     -12.038 -28.994 -23.047  1.00 30.65           O
HETATM 4915  O   HOH S  43     -23.886 -32.926  -9.654  1.00 28.66           O
HETATM 4916  O   HOH S  44      -2.990 -41.468 -18.624  1.00 42.65           O
HETATM 4917  O   HOH S  45     -13.212 -50.416  -0.680  1.00 45.52           O
HETATM 4918  O   HOH S  46     -20.462 -24.743 -26.340  1.00 29.00           O
HETATM 4919  O   HOH S  47     -14.700 -43.551   0.791  1.00 39.73           O
HETATM 4920  O   HOH S  48     -26.380 -41.001 -11.666  1.00 47.72           O
HETATM 4921  O   HOH S  49      -4.120 -47.963 -13.546  1.00 40.92           O
HETATM 4922  O   HOH S  50     -19.548 -34.315 -33.674  1.00 42.53           O
HETATM 4923  O   HOH S  51     -25.998 -14.849 -40.112  1.00 39.43           O
HETATM 4924  O   HOH S  52     -51.890 -15.857 -40.533  1.00 34.50           O
HETATM 4925  O   HOH S  53     -16.329 -30.934 -46.693  1.00 44.41           O
HETATM 4926  O   HOH S  54     -30.330 -14.013 -19.595  1.00 48.67           O
```

[2185]

```
HETATM 4927  O   HOH S  55     -67.882  -3.570 -28.755  1.00 53.65           O
HETATM 4928  O   HOH S  56       2.407 -54.928 -36.929  1.00 62.53           O
HETATM 4929  O   HOH S  57     -26.198 -51.710 -22.915  1.00 44.54           O
HETATM 4930  O   HOH S  58      -3.626 -31.978 -23.963  1.00 45.62           O
HETATM 4931  O   HOH S  59     -23.873 -14.668 -39.463  1.00 47.93           O
HETATM 4932  O   HOH S  60     -39.871 -38.415 -17.790  1.00 40.39           O
HETATM 4933  O   HOH S  61     -41.062 -16.846 -42.774  1.00 46.03           O
HETATM 4934  O   HOH S  62     -56.250 -11.634 -16.652  1.00 48.17           O
HETATM 4935  O   HOH S  63     -36.890 -29.163 -42.990  1.00 53.59           O
HETATM 4936  O   HOH S  64     -28.156 -49.820 -21.323  1.00 50.86           O
HETATM 4937  O   HOH S  65     -27.314 -33.355 -41.315  1.00 42.59           O
HETATM 4938  O   HOH S  66       4.143 -56.193 -38.605  1.00 51.60           O
HETATM 4939  O   HOH S  67     -28.524 -34.140 -38.624  1.00 36.18           O
HETATM 4940  O   HOH S  68     -30.428 -34.992 -38.218  1.00 44.25           O
HETATM 4941  O   HOH S  69     -12.269 -27.928 -52.600  1.00 51.33           O
HETATM 4942  O   HOH S  70     -36.894 -27.546 -32.466  1.00 39.68           O
HETATM 4943  O   HOH S  71       7.493 -57.935 -38.286  1.00 47.56           O
HETATM 4944  O   HOH S  72       7.038 -60.542 -38.977  1.00 56.54           O
END
```

[2186]

[2187] [표 23]

CATspFv_LH/IL-17(mscw374)의 원자 좌표

```
REMARK   3
REMARK   3    정밀화.
REMARK   3   프로그램      : PHENIX (1.18_3855: ???)
REMARK   3     저자        : Adams,Afonine,Bunkoczi,Burnley,Chen,Dar,Davis,
REMARK   3                : Draizen,Echols,Gildea,Gros,Grosse-Kunstleve,Headd,
REMARK   3                : Hintze,Hung,Ioerger,Liebschner,McCoy,McKee,Moriarty,
REMARK   3                : Oeffner,Poon,Read,Richardson,Richardson,Sacchettini,
REMARK   3                : Sauter,Sobolev,Storoni,Terwilliger,Williams,Zwart
REMARK   3
REMARK   3  X선 데이터.
REMARK   3
REMARK   3  정밀화 표적 : ML
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터.
REMARK   3   분해능 범위 고 (Å)         : 2.20
REMARK   3   분해능 범위 저  (Å)        : 45.25
REMARK   3   MIN(FOBS/SIGMA_FOBS)     : 1.35
REMARK   3   범위의 완전성          (%)  : 99.38
REMARK   3   반사 수                    : 36069
REMARK   3   반사 수 (비이상)           : 36069
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅.
REMARK   3   R값      (작업 + 시험 세트)     : 0.1905
REMARK   3   R값             (작업 세트)     : 0.1881
REMARK   3   자유 R값                       : 0.2336
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 사이즈    (%) : 5.00
REMARK   3   자유 R값 시험 세트 카운트        : 1803
REMARK   3
REMARK   3  정밀화에 사용되는 데이터에 대한 피팅 (IN BINS).
REMARK   3  BIN      분해능 범위     COMPL.    NWORK NFREE   RWORK  RFREE  CCWORK CCFREE
REMARK   3    1   45.25 -    5.17    0.98     2751   145  0.2035 0.2380   0.922  0.878
REMARK   3    2    5.17 -    4.10    0.99     2671   140  0.1539 0.1812   0.950  0.906
REMARK   3    3    4.10 -    3.59    0.99     2638   139  0.1646 0.1791   0.939  0.916
REMARK   3    4    3.59 -    3.26    0.99     2656   140  0.1629 0.2208   0.939  0.894
REMARK   3    5    3.26 -    3.03    1.00     2633   138  0.1865 0.2306   0.929  0.865
REMARK   3    6    3.02 -    2.85    1.00     2631   139  0.1838 0.2508   0.930  0.860
REMARK   3    7    2.85 -    2.70    1.00     2626   138  0.1957 0.2838   0.910  0.821
REMARK   3    8    2.70 -    2.59    0.99     2600   137  0.1996 0.2752   0.917  0.845
REMARK   3    9    2.59 -    2.49    1.00     2632   139  0.2223 0.3012   0.901  0.826
REMARK   3   10    2.49 -    2.40    1.00     2622   138  0.2401 0.2823   0.876  0.842
REMARK   3   11    2.40 -    2.33    1.00     2570   135  0.2484 0.3414   0.863  0.759
REMARK   3   12    2.33 -    2.26    1.00     2637   139  0.2604 0.3624   0.844  0.716
REMARK   3   13    2.26 -    2.20    0.99     2599   136  0.2602 0.3009   0.841  0.740
REMARK   3
REMARK   3  벌크 용매 모델링.
REMARK   3   사용된 방법          : 플랫 벌크 용매 모델
REMARK   3   용매 반경            : 1.11
REMARK   3   수축 반경            : 0.90
REMARK   3   그리드 스텝 인자     : 4.00
REMARK   3
REMARK   3  오차 추정.
REMARK   3   좌표 오차 (최우추정 기반)      : 0.26
REMARK   3   위상 오차 (도, 최우추정 기반) : 25.94
REMARK   3
REMARK   3  구조 인자 계산 알고리즘 : FFT
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  기하학적 구조 제한 라이브러리: GEOSTD + 모노머 라이브러리 + CDL V1.2
REMARK   3  이상적인 값과의 편차.
REMARK   3    결합    :  0.007   0.066   5150
```

[2188]

```
REMARK   3    각도     :  0.897   7.044   7033
REMARK   3    키랄성   :  0.055   0.203    785
REMARK   3    평면성   :  0.006   0.064    921
REMARK   3    이면각   : 15.898 179.888   1771
REMARK   3    최소 비결합 거리 : 1.814
REMARK   3
REMARK   3  MOLPROBITY 통계값.
REMARK   3    모든 원자 충돌 점수 : 3.61
REMARK   3    라마찬드란 플롯:
REMARK   3      이상치 :  0.15 %
REMARK   3      허용   :  5.15 %
REMARK   3      선호   : 94.70 %
REMARK   3    회전 이성질체 이상치 :  1.90 %
REMARK   3    CBETA 편차          :  0.00 %
REMARK   3    펩티드 평면:
REMARK   3      CIS-프롤린      : 5.00 %
REMARK   3      CIS-전반        : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 프롤린  : 0.00 %
REMARK   3      트위스트 전반    : 0.00 %
REMARK   3
REMARK   3  RAMA-Z (라마찬드란 플롯 Z 점수):
REMARK   3  해석: 불량 |RAMA-Z| > 3; 의심 2 < |RAMA-Z| < 3; 양호 |RAMA-Z| < 2.
REMARK   3  전체/나선/시트/루프에 대한 점수는 독립적으로 스케일링됨;
REMARK   3  따라서, 값은 단순하게 관련되어 있지 않음.
REMARK   3    전체: -0.41 (0.30), 잔기: 682
REMARK   3    나선:  없음  (없음), 잔기: 0
REMARK   3    시트: -0.15 (0.29), 잔기: 286
REMARK   3    루프: -0.27 (0.29), 잔기: 396
REMARK   3
REMARK   3                 min    max    평균  <Bi,j>   iso aniso
REMARK   3     전체  :   22.52 113.38  43.48   3.52  5326     0
REMARK   3     단백질 :   22.52 113.38  43.46   3.52  5031     0
REMARK   3     물:       25.50  78.89  43.62    N/A   292     0
REMARK   3     기타:     47.81  71.08  62.20    N/A     3     0
REMARK   3     사슬  A:  22.52  94.96  37.52    N/A  1781     0
REMARK   3     사슬  C:  26.30 113.38  57.38    N/A   751     0
REMARK   3     사슬  B:  23.97  87.19  39.59    N/A  1764     0
REMARK   3     사슬  D:  24.36 111.09  52.89    N/A   735     0
REMARK   3     사슬  G:  67.71  67.71  67.71    N/A     1     0
REMARK   3     사슬  M:  47.81  47.81  47.81    N/A     1     0
REMARK   3     사슬  N:  71.08  71.08  71.08    N/A     1     0
REMARK   3     사슬  S:  25.50  78.89  43.62    N/A   292     0
REMARK   3     히스토그램:
REMARK   3            값          원자 수
REMARK   3      22.52 - 31.61       921
REMARK   3      31.61 - 40.69      2352
REMARK   3      40.69 - 49.78       964
REMARK   3      49.78 - 58.86       337
REMARK   3      58.86 - 67.95       258
REMARK   3      67.95 - 77.03       154
REMARK   3      77.03 - 86.12        91
REMARK   3      86.12 - 95.21        69
REMARK   3      95.21 - 104.29      120
REMARK   3     104.29 - 113.38       60
REMARK   3
REMARK   3
REMARK   3  비틀림 NCS 세부사항.
REMARK   3   NCS 군의 수            : 1
REMARK   3   NCS 군 : 1
REMARK   3      선택                : (사슬 'A' 및 (resid 1 내지 9
REMARK   3                          : 또는 resid 11 내지 31 또는 (resid
```

[2189]

```
REMARK   3                     : 32 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 33 내지
REMARK   3                     : 80 또는 (resid 81 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2))
REMARK   3                     : 또는 (resid 82 및 (명칭 N 또는 명칭
REMARK   3                     : CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB
REMARK   3                     : 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD )) 또는 resid
REMARK   3                     : 83 내지 96 또는 resid 98 내지
REMARK   3                     : 109 또는 (resid 110 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1))
REMARK   3                     : 또는 resid 111 내지 138 또는 (resid
REMARK   3                     : 139 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB )) 또는 resid
REMARK   3                     : 140 내지 154 또는 (resid 155 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ ))
REMARK   3                     : 또는 resid 156 내지 157 또는 (resid
REMARK   3                     : 158 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 159 내지
REMARK   3                     : 168 또는 (resid 169 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB )) 또는 resid 170 내지
REMARK   3                     : 190 또는 (resid 191 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD ))
REMARK   3                     : 또는 resid 192 내지 201 또는 (resid
REMARK   3                     : 202 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB )) 또는 resid
REMARK   3                     : 203 내지 214 또는 (resid 215 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB )) 또는 resid 216
REMARK   3                     : 내지 242 또는 (resid 243 내지
REMARK   3                     : 244 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB ))))
REMARK   3      선택           : (사슬 'B' 및 (resid 1 내지 9
REMARK   3                     : 또는 resid 11 내지 31 또는 (resid
REMARK   3                     : 32 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                     : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                     : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                     : 또는 명칭 OH )) 또는 resid 33 내지
REMARK   3                     : 80 또는 (resid 81 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD2))
REMARK   3                     : 또는 resid 82 내지 96 또는 resid 98
REMARK   3                     : 내지 105 또는 (resid 106 및
REMARK   3                     : (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭 C 또는
REMARK   3                     : 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는
REMARK   3                     : 명칭 CD )) 또는 resid 107 내지
REMARK   3                     : 109 또는 (resid 110 및 (명칭 N 또는
REMARK   3                     : 명칭 CA 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는
REMARK   3                     : 명칭 CB 또는 명칭 CG 또는 명칭 CD1))
REMARK   3                     : 또는 resid 111 내지 154 또는 (resid
```

[2190]

```
REMARK   3                      : 155 및 (명칭 N 또는 명칭 CA 또는 명칭
REMARK   3                      : C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는 명칭 CG
REMARK   3                      : 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는 명칭 CZ
REMARK   3                      : )) 또는 resid 156 내지 157 또는
REMARK   3                      : (resid 158 및 (명칭 N 또는 명칭 CA
REMARK   3                      : 또는 명칭 C 또는 명칭 O 또는 명칭 CB 또는
REMARK   3                      : 명칭 CG 또는 명칭 CD2 또는 명칭 CE2 또는
REMARK   3                      : 명칭 CZ 또는 명칭 OH )) 또는 resid 159
REMARK   3                      : 내지 244))
REMARK   3     제한된 비틀림    : 2084
REMARK   3     한계 미만 RMSD   : 1.022
REMARK   3     모든 제한 RMSD   : 8.147
REMARK   3    한계 미만 차이의 히스토그램:
REMARK   3       0.000 -    1.500: 1851
REMARK   3       1.500 -    3.000: 186
REMARK   3       3.000 -    4.500: 21
REMARK   3       4.500 -    6.000: 10
REMARK   3       6.000 -    7.500: 0
REMARK   3       7.500 -    9.000: 0
REMARK   3       9.000 -   10.500: 0
REMARK   3      10.500 -   12.000: 0
REMARK   3      12.000 -   13.500: 0
REMARK   3      13.500 -   15.000: 0
REMARK   3    한계 초과 차이의 히스토그램:
REMARK   3      15.000 -   30.200: 0
REMARK   3      30.200 -   45.400: 4
REMARK   3      45.400 -   60.600: 1
REMARK   3      60.600 -   75.800: 2
REMARK   3      75.800 -   91.000: 6
REMARK   3      91.000 -  106.200: 0
REMARK   3     106.200 -  121.400: 0
REMARK   3     121.400 -  136.600: 0
REMARK   3     136.600 -  151.800: 1
REMARK   3     151.800 -  167.000: 2
REMARK   3
CRYST1   82.430  226.380   75.350  90.00  90.00  90.00 C 2 2 21
SCALE1      0.012132  0.000000  0.000000        0.00000
SCALE2      0.000000  0.004417  0.000000        0.00000
SCALE3      0.000000  0.000000  0.013271        0.00000
ATOM      1  N   ASN A   1     -19.938 -41.996  -1.944  1.00 55.20           N
ATOM      2  CA  ASN A   1     -21.202 -42.316  -2.609  1.00 59.00           C
ATOM      3  C   ASN A   1     -21.180 -43.739  -3.175  1.00 52.61           C
ATOM      4  O   ASN A   1     -21.687 -44.674  -2.544  1.00 52.21           O
ATOM      5  CB  ASN A   1     -21.518 -41.293  -3.730  1.00 59.56           C
ATOM      6  CG  ASN A   1     -22.126 -39.971  -3.203  1.00 64.27           C
ATOM      7  OD1 ASN A   1     -23.076 -39.969  -2.413  1.00 64.64           O
ATOM      8  ND2 ASN A   1     -21.559 -38.845  -3.636  1.00 68.17           N
ATOM      9  N   PHE A   2     -20.557 -43.909  -4.341  1.00 44.40           N
ATOM     10  CA  PHE A   2     -20.496 -45.211  -4.991  1.00 39.69           C
ATOM     11  C   PHE A   2     -19.240 -45.279  -5.840  1.00 36.19           C
ATOM     12  O   PHE A   2     -18.633 -44.257  -6.157  1.00 33.39           O
ATOM     13  CB  PHE A   2     -21.733 -45.462  -5.867  1.00 34.41           C
ATOM     14  CG  PHE A   2     -21.843 -44.529  -7.063  1.00 34.06           C
ATOM     15  CD1 PHE A   2     -22.376 -43.259  -6.924  1.00 34.89           C
ATOM     16  CD2 PHE A   2     -21.438 -44.946  -8.332  1.00 34.58           C
ATOM     17  CE1 PHE A   2     -22.491 -42.411  -8.026  1.00 34.28           C
ATOM     18  CE2 PHE A   2     -21.543 -44.110  -9.437  1.00 28.22           C
ATOM     19  CZ  PHE A   2     -22.073 -42.842  -9.287  1.00 30.97           C
ATOM     20  N   MET A   3     -18.876 -46.499  -6.217  1.00 34.93           N
ATOM     21  CA  MET A   3     -17.766 -46.766  -7.118  1.00 40.24           C
ATOM     22  C   MET A   3     -18.263 -47.480  -8.369  1.00 35.30           C
ATOM     23  O   MET A   3     -19.305 -48.152  -8.357  1.00 35.66           O
ATOM     24  CB  MET A   3     -16.691 -47.669  -6.472  1.00 42.75           C
ATOM     25  CG  MET A   3     -16.198 -47.321  -5.074  1.00 50.49           C
ATOM     26  SD  MET A   3     -15.040 -48.626  -4.528  1.00 62.25           S
ATOM     27  CE  MET A   3     -16.154 -50.006  -4.280  1.00 43.93           C
```

[2191]

```
ATOM     28  N   LEU A   4     -17.479 -47.346  -9.443  1.00 34.12           N
ATOM     29  CA  LEU A   4     -17.677 -48.082 -10.688  1.00 36.98           C
ATOM     30  C   LEU A   4     -16.466 -48.977 -10.915  1.00 36.40           C
ATOM     31  O   LEU A   4     -15.326 -48.497 -10.911  1.00 33.64           O
ATOM     32  CB  LEU A   4     -17.856 -47.149 -11.892  1.00 31.54           C
ATOM     33  CG  LEU A   4     -19.123 -46.295 -11.951  1.00 38.45           C
ATOM     34  CD1 LEU A   4     -19.091 -45.418 -13.196  1.00 30.29           C
ATOM     35  CD2 LEU A   4     -20.399 -47.163 -11.890  1.00 32.39           C
ATOM     36  N   THR A   5     -16.704 -50.264 -11.129  1.00 34.02           N
ATOM     37  CA  THR A   5     -15.621 -51.230 -11.282  1.00 31.04           C
ATOM     38  C   THR A   5     -15.638 -51.782 -12.696  1.00 32.22           C
ATOM     39  O   THR A   5     -16.608 -52.433 -13.101  1.00 34.28           O
ATOM     40  CB  THR A   5     -15.734 -52.366 -10.267  1.00 33.59           C
ATOM     41  OG1 THR A   5     -15.802 -51.818  -8.946  1.00 32.67           O
ATOM     42  CG2 THR A   5     -14.495 -53.276 -10.360  1.00 38.06           C
ATOM     43  N   GLN A   6     -14.579 -51.502 -13.447  1.00 32.10           N
ATOM     44  CA  GLN A   6     -14.345 -52.092 -14.757  1.00 32.19           C
ATOM     45  C   GLN A   6     -12.945 -52.690 -14.782  1.00 31.45           C
ATOM     46  O   GLN A   6     -12.074 -52.266 -14.014  1.00 35.75           O
ATOM     47  CB  GLN A   6     -14.513 -51.046 -15.884  1.00 28.50           C
ATOM     48  CG  GLN A   6     -13.732 -49.760 -15.699  1.00 33.96           C
ATOM     49  CD  GLN A   6     -13.969 -48.743 -16.817  1.00 32.66           C
ATOM     50  OE1 GLN A   6     -14.118 -47.538 -16.559  1.00 28.32           O
ATOM     51  NE2 GLN A   6     -14.012 -49.225 -18.061  1.00 27.06           N
ATOM     52  N   PRO A   7     -12.695 -53.687 -15.628  1.00 33.24           N
ATOM     53  CA  PRO A   7     -11.385 -54.361 -15.579  1.00 32.48           C
ATOM     54  C   PRO A   7     -10.251 -53.413 -15.916  1.00 33.22           C
ATOM     55  O   PRO A   7     -10.425 -52.430 -16.635  1.00 31.83           O
ATOM     56  CB  PRO A   7     -11.497 -55.474 -16.624  1.00 30.66           C
ATOM     57  CG  PRO A   7     -12.738 -55.178 -17.419  1.00 33.52           C
ATOM     58  CD  PRO A   7     -13.629 -54.330 -16.563  1.00 31.02           C
ATOM     59  N   HIS A   8      -9.075 -53.720 -15.370  1.00 34.42           N
ATOM     60  CA  HIS A   8      -7.890 -52.943 -15.701  1.00 31.67           C
ATOM     61  C   HIS A   8      -7.568 -53.058 -17.185  1.00 31.14           C
ATOM     62  O   HIS A   8      -7.215 -52.065 -17.829  1.00 30.55           O
ATOM     63  CB  HIS A   8      -6.715 -53.418 -14.843  1.00 38.08           C
ATOM     64  CG  HIS A   8      -5.463 -52.624 -15.026  1.00 44.28           C
ATOM     65  ND1 HIS A   8      -5.291 -51.363 -14.493  1.00 49.71           N
ATOM     66  CD2 HIS A   8      -4.318 -52.913 -15.693  1.00 44.47           C
ATOM     67  CE1 HIS A   8      -4.094 -50.908 -14.823  1.00 43.11           C
ATOM     68  NE2 HIS A   8      -3.484 -51.830 -15.550  1.00 51.45           N
ATOM     69  N   SER A   9      -7.714 -54.252 -17.755  1.00 27.14           N
ATOM     70  CA  SER A   9      -7.392 -54.435 -19.162  1.00 29.91           C
ATOM     71  C   SER A   9      -8.109 -55.660 -19.715  1.00 30.03           C
ATOM     72  O   SER A   9      -8.533 -56.551 -18.968  1.00 32.14           O
ATOM     73  CB  SER A   9      -5.883 -54.592 -19.363  1.00 34.28           C
ATOM     74  OG  SER A   9      -5.474 -55.819 -18.796  1.00 35.69           O
ATOM     75  N   VAL A  10      -8.224 -55.687 -21.047  1.00 29.63           N
ATOM     76  CA  VAL A  10      -8.881 -56.754 -21.807  1.00 33.09           C
ATOM     77  C   VAL A  10      -8.170 -56.862 -23.152  1.00 31.46           C
ATOM     78  O   VAL A  10      -7.708 -55.860 -23.696  1.00 33.97           O
ATOM     79  CB  VAL A  10     -10.393 -56.461 -22.025  1.00 28.86           C
ATOM     80  CG1 VAL A  10     -11.091 -57.631 -22.729  1.00 35.38           C
ATOM     81  CG2 VAL A  10     -11.086 -56.209 -20.723  1.00 36.49           C
ATOM     82  N   SER A  11      -8.091 -58.073 -23.707  1.00 30.38           N
ATOM     83  CA  SER A  11      -7.536 -58.239 -25.046  1.00 33.39           C
ATOM     84  C   SER A  11      -8.441 -59.109 -25.912  1.00 36.97           C
ATOM     85  O   SER A  11      -9.097 -60.043 -25.433  1.00 33.87           O
ATOM     86  CB  SER A  11      -6.103 -58.836 -25.012  1.00 40.25           C
ATOM     87  OG  SER A  11      -6.084 -60.173 -24.522  1.00 37.82           O
ATOM     88  N   GLU A  12      -8.457 -58.797 -27.207  1.00 37.84           N
ATOM     89  CA  GLU A  12      -9.319 -59.488 -28.158  1.00 37.13           C
ATOM     90  C   GLU A  12      -8.741 -59.312 -29.560  1.00 40.10           C
ATOM     91  O   GLU A  12      -8.087 -58.309 -29.854  1.00 41.19           O
ATOM     92  CB  GLU A  12     -10.756 -58.957 -28.088  1.00 37.25           C
ATOM     93  CG  GLU A  12     -11.722 -59.646 -29.027  1.00 37.77           C
ATOM     94  CD  GLU A  12     -11.894 -61.115 -28.693  1.00 40.51           C
ATOM     95  OE1 GLU A  12     -12.319 -61.397 -27.558  1.00 43.38           O
```

[2192]

```
ATOM     96  OE2 GLU A  12     -11.608 -61.986 -29.546  1.00 45.33           O
ATOM     97  N   SER A  13      -9.001 -60.289 -30.422  1.00 39.86           N
ATOM     98  CA  SER A  13      -8.459 -60.300 -31.769  1.00 41.17           C
ATOM     99  C   SER A  13      -9.267 -59.399 -32.695  1.00 35.45           C
ATOM    100  O   SER A  13     -10.440 -59.133 -32.443  1.00 41.30           O
ATOM    101  CB  SER A  13      -8.449 -61.728 -32.315  1.00 41.63           C
ATOM    102  OG  SER A  13      -7.752 -62.605 -31.446  1.00 47.99           O
ATOM    103  N   PRO A  14      -8.653 -58.916 -33.779  1.00 41.19           N
ATOM    104  CA  PRO A  14      -9.392 -58.096 -34.743  1.00 35.89           C
ATOM    105  C   PRO A  14     -10.502 -58.898 -35.397  1.00 39.51           C
ATOM    106  O   PRO A  14     -10.412 -60.119 -35.545  1.00 38.16           O
ATOM    107  CB  PRO A  14      -8.323 -57.690 -35.769  1.00 41.11           C
ATOM    108  CG  PRO A  14      -7.000 -57.926 -35.086  1.00 36.99           C
ATOM    109  CD  PRO A  14      -7.238 -59.086 -34.171  1.00 41.78           C
ATOM    110  N   GLY A  15     -11.562 -58.195 -35.789  1.00 34.83           N
ATOM    111  CA  GLY A  15     -12.696 -58.831 -36.407  1.00 40.97           C
ATOM    112  C   GLY A  15     -13.660 -59.492 -35.443  1.00 43.45           C
ATOM    113  O   GLY A  15     -14.760 -59.870 -35.861  1.00 41.29           O
ATOM    114  N   LYS A  16     -13.294 -59.631 -34.170  1.00 42.17           N
ATOM    115  CA  LYS A  16     -14.140 -60.247 -33.159  1.00 40.69           C
ATOM    116  C   LYS A  16     -14.893 -59.186 -32.357  1.00 42.39           C
ATOM    117  O   LYS A  16     -14.613 -57.989 -32.435  1.00 47.24           O
ATOM    118  CB  LYS A  16     -13.294 -61.119 -32.221  1.00 38.61           C
ATOM    119  CG  LYS A  16     -12.487 -62.215 -32.917  1.00 43.93           C
ATOM    120  CD  LYS A  16     -13.213 -63.540 -32.922  1.00 44.24           C
ATOM    121  N   THR A  17     -15.830 -59.650 -31.541  1.00 41.20           N
ATOM    122  CA  THR A  17     -16.609 -58.793 -30.664  1.00 37.56           C
ATOM    123  C   THR A  17     -16.021 -58.826 -29.256  1.00 35.53           C
ATOM    124  O   THR A  17     -15.605 -59.881 -28.772  1.00 36.23           O
ATOM    125  CB  THR A  17     -18.069 -59.259 -30.625  1.00 39.12           C
ATOM    126  OG1 THR A  17     -18.616 -59.234 -31.946  1.00 46.50           O
ATOM    127  CG2 THR A  17     -18.909 -58.352 -29.736  1.00 33.98           C
ATOM    128  N   VAL A  18     -15.998 -57.675 -28.591  1.00 34.04           N
ATOM    129  CA  VAL A  18     -15.545 -57.608 -27.209  1.00 34.17           C
ATOM    130  C   VAL A  18     -16.557 -56.786 -26.417  1.00 30.89           C
ATOM    131  O   VAL A  18     -17.143 -55.832 -26.939  1.00 31.52           O
ATOM    132  CB  VAL A  18     -14.115 -57.015 -27.092  1.00 37.51           C
ATOM    133  CG1 VAL A  18     -14.068 -55.581 -27.610  1.00 34.78           C
ATOM    134  CG2 VAL A  18     -13.594 -57.093 -25.649  1.00 33.84           C
ATOM    135  N   THR A  19     -16.794 -57.192 -25.176  1.00 30.84           N
ATOM    136  CA  THR A  19     -17.678 -56.491 -24.258  1.00 33.19           C
ATOM    137  C   THR A  19     -16.868 -56.091 -23.041  1.00 31.96           C
ATOM    138  O   THR A  19     -16.106 -56.905 -22.507  1.00 35.29           O
ATOM    139  CB  THR A  19     -18.880 -57.365 -23.845  1.00 35.33           C
ATOM    140  OG1 THR A  19     -19.623 -57.737 -25.005  1.00 36.55           O
ATOM    141  CG2 THR A  19     -19.808 -56.623 -22.912  1.00 34.23           C
ATOM    142  N   ILE A  20     -17.024 -54.841 -22.618  1.00 30.72           N
ATOM    143  CA  ILE A  20     -16.417 -54.314 -21.399  1.00 32.22           C
ATOM    144  C   ILE A  20     -17.540 -53.965 -20.437  1.00 32.81           C
ATOM    145  O   ILE A  20     -18.409 -53.155 -20.775  1.00 31.94           O
ATOM    146  CB  ILE A  20     -15.559 -53.074 -21.693  1.00 33.00           C
ATOM    147  CG1 ILE A  20     -14.417 -53.432 -22.653  1.00 35.20           C
ATOM    148  CG2 ILE A  20     -15.062 -52.436 -20.375  1.00 31.47           C
ATOM    149  CD1 ILE A  20     -13.536 -52.237 -23.029  1.00 33.10           C
ATOM    150  N   SER A  21     -17.514 -54.537 -19.235  1.00 31.68           N
ATOM    151  CA  SER A  21     -18.572 -54.301 -18.261  1.00 33.83           C
ATOM    152  C   SER A  21     -18.107 -53.448 -17.084  1.00 32.13           C
ATOM    153  O   SER A  21     -16.929 -53.419 -16.715  1.00 33.28           O
ATOM    154  CB  SER A  21     -19.147 -55.621 -17.742  1.00 36.54           C
ATOM    155  OG  SER A  21     -19.833 -56.285 -18.786  1.00 38.07           O
ATOM    156  N   CYS A  22     -19.074 -52.771 -16.484  1.00 32.27           N
ATOM    157  CA  CYS A  22     -18.845 -51.783 -15.444  1.00 31.31           C
ATOM    158  C   CYS A  22     -19.921 -52.008 -14.393  1.00 35.15           C
ATOM    159  O   CYS A  22     -21.111 -51.893 -14.704  1.00 37.45           O
ATOM    160  CB  CYS A  22     -18.922 -50.371 -16.055  1.00 37.18           C
ATOM    161  SG  CYS A  22     -18.803 -48.932 -14.983  1.00 50.92           S
ATOM    162  N   THR A  23     -19.515 -52.352 -13.173  1.00 29.68           N
ATOM    163  CA  THR A  23     -20.431 -52.671 -12.088  1.00 33.51           C
```

[2193]

```
ATOM    164  C   THR A  23     -20.477 -51.519 -11.091  1.00 33.25           C
ATOM    165  O   THR A  23     -19.432 -51.003 -10.687  1.00 33.01           O
ATOM    166  CB  THR A  23     -20.014 -53.971 -11.375  1.00 38.56           C
ATOM    167  OG1 THR A  23     -20.134 -55.082 -12.273  1.00 41.05           O
ATOM    168  CG2 THR A  23     -20.895 -54.228 -10.145  1.00 30.11           C
ATOM    169  N   ARG A  24     -21.688 -51.122 -10.703  1.00 32.07           N
ATOM    170  CA  ARG A  24     -21.914 -50.034  -9.759  1.00 31.23           C
ATOM    171  C   ARG A  24     -22.112 -50.611  -8.358  1.00 34.84           C
ATOM    172  O   ARG A  24     -22.932 -51.515  -8.166  1.00 35.95           O
ATOM    173  CB  ARG A  24     -23.133 -49.203 -10.187  1.00 34.55           C
ATOM    174  CG  ARG A  24     -23.497 -48.055  -9.254  1.00 32.40           C
ATOM    175  CD  ARG A  24     -24.587 -47.152  -9.833  1.00 34.03           C
ATOM    176  NE  ARG A  24     -24.960 -46.099  -8.885  1.00 32.47           N
ATOM    177  CZ  ARG A  24     -25.359 -44.878  -9.228  1.00 28.72           C
ATOM    178  NH1 ARG A  24     -25.449 -44.529 -10.504  1.00 28.85           N
ATOM    179  NH2 ARG A  24     -25.689 -44.005  -8.288  1.00 32.99           N
ATOM    180  N   SER A  25     -21.359 -50.087  -7.384  1.00 35.36           N
ATOM    181  CA  SER A  25     -21.297 -50.680  -6.050  1.00 31.86           C
ATOM    182  C   SER A  25     -22.529 -50.384  -5.208  1.00 41.58           C
ATOM    183  O   SER A  25     -22.864 -51.172  -4.320  1.00 37.33           O
ATOM    184  CB  SER A  25     -20.076 -50.170  -5.287  1.00 35.00           C
ATOM    185  OG  SER A  25     -20.256 -48.805  -4.931  1.00 34.68           O
ATOM    186  N   SER A  26     -23.164 -49.232  -5.404  1.00 38.07           N
ATOM    187  CA  SER A  26     -24.251 -48.812  -4.535  1.00 35.97           C
ATOM    188  C   SER A  26     -25.172 -47.869  -5.303  1.00 36.91           C
ATOM    189  O   SER A  26     -24.765 -47.226  -6.273  1.00 37.32           O
ATOM    190  CB  SER A  26     -23.682 -48.126  -3.282  1.00 39.06           C
ATOM    191  OG  SER A  26     -24.708 -47.704  -2.412  1.00 54.08           O
ATOM    192  N   GLY A  27     -26.419 -47.780  -4.858  1.00 35.74           N
ATOM    193  CA  GLY A  27     -27.414 -47.124  -5.679  1.00 34.84           C
ATOM    194  C   GLY A  27     -27.816 -47.982  -6.863  1.00 35.78           C
ATOM    195  O   GLY A  27     -27.073 -48.875  -7.268  1.00 40.36           O
ATOM    196  N   SER A  28     -28.989 -47.735  -7.432  1.00 38.38           N
ATOM    197  CA  SER A  28     -29.493 -48.532  -8.543  1.00 36.03           C
ATOM    198  C   SER A  28     -28.996 -47.977  -9.875  1.00 35.65           C
ATOM    199  O   SER A  28     -29.273 -46.822 -10.212  1.00 37.85           O
ATOM    200  CB  SER A  28     -31.019 -48.564  -8.517  1.00 34.93           C
ATOM    201  OG  SER A  28     -31.479 -49.301  -9.627  1.00 42.59           O
ATOM    202  N   LEU A  29     -28.312 -48.813 -10.655  1.00 35.43           N
ATOM    203  CA  LEU A  29     -27.723 -48.338 -11.903  1.00 36.02           C
ATOM    204  C   LEU A  29     -28.785 -47.844 -12.875  1.00 35.16           C
ATOM    205  O   LEU A  29     -28.534 -46.913 -13.654  1.00 37.00           O
ATOM    206  CB  LEU A  29     -26.875 -49.439 -12.544  1.00 33.02           C
ATOM    207  CG  LEU A  29     -26.176 -48.971 -13.822  1.00 31.32           C
ATOM    208  CD1 LEU A  29     -24.663 -49.231 -13.812  1.00 31.13           C
ATOM    209  CD2 LEU A  29     -26.800 -49.630 -15.007  1.00 29.24           C
ATOM    210  N   ALA A  30     -29.966 -48.462 -12.864  1.00 32.58           N
ATOM    211  CA  ALA A  30     -30.996 -48.114 -13.826  1.00 31.80           C
ATOM    212  C   ALA A  30     -31.619 -46.750 -13.559  1.00 31.01           C
ATOM    213  O   ALA A  30     -32.395 -46.278 -14.398  1.00 32.95           O
ATOM    214  CB  ALA A  30     -32.092 -49.188 -13.829  1.00 32.87           C
ATOM    215  N   ASN A  31     -31.296 -46.106 -12.429  1.00 33.20           N
ATOM    216  CA  ASN A  31     -31.827 -44.784 -12.098  1.00 30.69           C
ATOM    217  C   ASN A  31     -31.052 -43.633 -12.713  1.00 31.82           C
ATOM    218  O   ASN A  31     -31.530 -42.491 -12.635  1.00 33.58           O
ATOM    219  CB  ASN A  31     -31.871 -44.593 -10.581  1.00 31.12           C
ATOM    220  CG  ASN A  31     -33.040 -45.328  -9.945  1.00 36.29           C
ATOM    221  OD1 ASN A  31     -33.936 -45.790 -10.647  1.00 35.62           O
ATOM    222  ND2 ASN A  31     -33.039 -45.436  -8.622  1.00 36.26           N
ATOM    223  N   TYR A  32     -29.892 -43.899 -13.320  1.00 29.77           N
ATOM    224  CA  TYR A  32     -28.984 -42.855 -13.788  1.00 30.52           C
ATOM    225  C   TYR A  32     -28.275 -43.300 -15.063  1.00 29.67           C
ATOM    226  O   TYR A  32     -27.789 -44.432 -15.138  1.00 30.66           O
ATOM    227  CB  TYR A  32     -27.960 -42.534 -12.708  1.00 28.51           C
ATOM    228  CG  TYR A  32     -28.544 -42.367 -11.328  1.00 28.99           C
ATOM    229  CD1 TYR A  32     -29.064 -41.150 -10.920  1.00 30.82           C
ATOM    230  CD2 TYR A  32     -28.549 -43.423 -10.417  1.00 28.41           C
ATOM    231  CE1 TYR A  32     -29.602 -40.990  -9.661  1.00 28.42           C
```

[2194]

```
ATOM    232  CE2 TYR A  32     -29.055 -43.265  -9.154  1.00 28.34           C
ATOM    233  CZ  TYR A  32     -29.596 -42.040  -8.788  1.00 32.12           C
ATOM    234  OH  TYR A  32     -30.117 -41.854  -7.533  1.00 38.84           O
ATOM    235  N   TYR A  33     -28.233 -42.418 -16.062  1.00 27.83           N
ATOM    236  CA  TYR A  33     -27.632 -42.739 -17.352  1.00 27.12           C
ATOM    237  C   TYR A  33     -26.145 -43.056 -17.223  1.00 32.51           C
ATOM    238  O   TYR A  33     -25.438 -42.488 -16.383  1.00 26.97           O
ATOM    239  CB  TYR A  33     -27.822 -41.580 -18.329  1.00 27.49           C
ATOM    240  CG  TYR A  33     -29.163 -41.549 -19.011  1.00 30.59           C
ATOM    241  CD1 TYR A  33     -29.723 -42.708 -19.559  1.00 30.99           C
ATOM    242  CD2 TYR A  33     -29.873 -40.365 -19.119  1.00 30.38           C
ATOM    243  CE1 TYR A  33     -30.952 -42.674 -20.212  1.00 28.45           C
ATOM    244  CE2 TYR A  33     -31.117 -40.325 -19.750  1.00 31.69           C
ATOM    245  CZ  TYR A  33     -31.643 -41.476 -20.295  1.00 32.75           C
ATOM    246  OH  TYR A  33     -32.866 -41.415 -20.918  1.00 35.00           O
ATOM    247  N   VAL A  34     -25.673 -43.973 -18.077  1.00 31.51           N
ATOM    248  CA  VAL A  34     -24.269 -44.367 -18.139  1.00 27.62           C
ATOM    249  C   VAL A  34     -23.662 -43.898 -19.454  1.00 30.03           C
ATOM    250  O   VAL A  34     -24.256 -44.092 -20.525  1.00 27.07           O
ATOM    251  CB  VAL A  34     -24.100 -45.886 -17.994  1.00 30.49           C
ATOM    252  CG1 VAL A  34     -22.620 -46.247 -18.090  1.00 27.71           C
ATOM    253  CG2 VAL A  34     -24.746 -46.376 -16.691  1.00 25.94           C
ATOM    254  N   GLN A  35     -22.471 -43.299 -19.370  1.00 26.33           N
ATOM    255  CA  GLN A  35     -21.690 -42.859 -20.513  1.00 24.48           C
ATOM    256  C   GLN A  35     -20.407 -43.678 -20.613  1.00 29.12           C
ATOM    257  O   GLN A  35     -19.927 -44.244 -19.618  1.00 27.70           O
ATOM    258  CB  GLN A  35     -21.344 -41.367 -20.392  1.00 30.98           C
ATOM    259  CG  GLN A  35     -22.525 -40.395 -20.526  1.00 26.62           C
ATOM    260  CD  GLN A  35     -23.646 -40.669 -19.547  1.00 32.83           C
ATOM    261  OE1 GLN A  35     -24.763 -41.075 -19.948  1.00 28.03           O
ATOM    262  NE2 GLN A  35     -23.369 -40.458 -18.249  1.00 25.86           N
ATOM    263  N   TRP A  36     -19.849 -43.730 -21.831  1.00 25.41           N
ATOM    264  CA  TRP A  36     -18.589 -44.403 -22.109  1.00 28.30           C
ATOM    265  C   TRP A  36     -17.692 -43.473 -22.921  1.00 30.36           C
ATOM    266  O   TRP A  36     -18.135 -42.899 -23.922  1.00 32.44           O
ATOM    267  CB  TRP A  36     -18.814 -45.727 -22.867  1.00 28.59           C
ATOM    268  CG  TRP A  36     -19.527 -46.806 -22.068  1.00 28.29           C
ATOM    269  CD1 TRP A  36     -20.871 -47.014 -22.003  1.00 28.63           C
ATOM    270  CD2 TRP A  36     -18.928 -47.820 -21.251  1.00 27.26           C
ATOM    271  NE1 TRP A  36     -21.153 -48.091 -21.189  1.00 27.32           N
ATOM    272  CE2 TRP A  36     -19.979 -48.602 -20.712  1.00 30.45           C
ATOM    273  CE3 TRP A  36     -17.607 -48.153 -20.928  1.00 28.44           C
ATOM    274  CZ2 TRP A  36     -19.749 -49.699 -19.867  1.00 29.47           C
ATOM    275  CZ3 TRP A  36     -17.380 -49.233 -20.080  1.00 29.66           C
ATOM    276  CH2 TRP A  36     -18.445 -49.997 -19.568  1.00 28.60           C
ATOM    277  N   TYR A  37     -16.431 -43.337 -22.497  1.00 29.99           N
ATOM    278  CA  TYR A  37     -15.449 -42.482 -23.155  1.00 27.45           C
ATOM    279  C   TYR A  37     -14.282 -43.304 -23.669  1.00 27.82           C
ATOM    280  O   TYR A  37     -13.795 -44.210 -22.984  1.00 31.10           O
ATOM    281  CB  TYR A  37     -14.940 -41.400 -22.202  1.00 27.48           C
ATOM    282  CG  TYR A  37     -16.106 -40.607 -21.672  1.00 32.59           C
ATOM    283  CD1 TYR A  37     -16.660 -39.582 -22.422  1.00 30.34           C
ATOM    284  CD2 TYR A  37     -16.698 -40.934 -20.455  1.00 29.80           C
ATOM    285  CE1 TYR A  37     -17.761 -38.879 -21.966  1.00 34.47           C
ATOM    286  CE2 TYR A  37     -17.785 -40.243 -19.992  1.00 31.00           C
ATOM    287  CZ  TYR A  37     -18.313 -39.216 -20.749  1.00 33.51           C
ATOM    288  OH  TYR A  37     -19.396 -38.536 -20.284  1.00 37.16           O
ATOM    289  N   GLN A  38     -13.844 -42.974 -24.878  1.00 29.52           N
ATOM    290  CA  GLN A  38     -12.615 -43.495 -25.454  1.00 31.23           C
ATOM    291  C   GLN A  38     -11.508 -42.470 -25.247  1.00 33.57           C
ATOM    292  O   GLN A  38     -11.727 -41.267 -25.411  1.00 30.25           O
ATOM    293  CB  GLN A  38     -12.773 -43.793 -26.947  1.00 26.90           C
ATOM    294  CG  GLN A  38     -11.531 -44.422 -27.601  1.00 32.00           C
ATOM    295  CD  GLN A  38     -11.622 -44.473 -29.126  1.00 37.70           C
ATOM    296  OE1 GLN A  38     -11.586 -43.438 -29.790  1.00 37.42           O
ATOM    297  NE2 GLN A  38     -11.740 -45.682 -29.683  1.00 31.81           N
ATOM    298  N   GLN A  39     -10.333 -42.937 -24.835  1.00 31.36           N
ATOM    299  CA  GLN A  39      -9.171 -42.056 -24.737  1.00 33.12           C
```

[2195]

```
ATOM    300  C   GLN A  39      -7.939 -42.787 -25.251  1.00 31.81           C
ATOM    301  O   GLN A  39      -7.515 -43.778 -24.654  1.00 33.56           O
ATOM    302  CB  GLN A  39      -8.948 -41.554 -23.313  1.00 31.21           C
ATOM    303  CG  GLN A  39      -7.779 -40.579 -23.235  1.00 35.50           C
ATOM    304  CD  GLN A  39      -7.537 -40.031 -21.837  1.00 34.74           C
ATOM    305  OE1 GLN A  39      -7.737 -40.722 -20.833  1.00 32.59           O
ATOM    306  NE2 GLN A  39      -7.097 -38.783 -21.770  1.00 35.36           N
ATOM    307  N   ARG A  40      -7.396 -42.320 -26.371  1.00 35.98           N
ATOM    308  CA  ARG A  40      -6.146 -42.811 -26.927  1.00 35.19           C
ATOM    309  C   ARG A  40      -4.959 -42.203 -26.178  1.00 37.29           C
ATOM    310  O   ARG A  40      -5.066 -41.113 -25.605  1.00 36.20           O
ATOM    311  CB  ARG A  40      -6.051 -42.458 -28.404  1.00 35.68           C
ATOM    312  CG  ARG A  40      -7.119 -43.119 -29.249  1.00 38.64           C
ATOM    313  CD  ARG A  40      -7.022 -42.667 -30.684  1.00 42.35           C
ATOM    314  NE  ARG A  40      -8.243 -42.959 -31.424  1.00 48.81           N
ATOM    315  CZ  ARG A  40      -8.619 -44.169 -31.816  1.00 51.71           C
ATOM    316  NH1 ARG A  40      -7.851 -45.217 -31.546  1.00 50.71           N
ATOM    317  NH2 ARG A  40      -9.755 -44.327 -32.493  1.00 45.74           N
ATOM    318  N   PRO A  41      -3.826 -42.904 -26.146  1.00 38.08           N
ATOM    319  CA  PRO A  41      -2.643 -42.384 -25.441  1.00 39.26           C
ATOM    320  C   PRO A  41      -2.247 -40.987 -25.882  1.00 38.41           C
ATOM    321  O   PRO A  41      -2.046 -40.746 -27.075  1.00 41.36           O
ATOM    322  CB  PRO A  41      -1.551 -43.409 -25.783  1.00 42.51           C
ATOM    323  CG  PRO A  41      -2.304 -44.681 -26.032  1.00 45.92           C
ATOM    324  CD  PRO A  41      -3.615 -44.266 -26.667  1.00 38.31           C
ATOM    325  N   GLY A  42      -2.140 -40.063 -24.929  1.00 38.47           N
ATOM    326  CA  GLY A  42      -1.735 -38.701 -25.214  1.00 37.10           C
ATOM    327  C   GLY A  42      -2.828 -37.774 -25.689  1.00 40.63           C
ATOM    328  O   GLY A  42      -2.527 -36.630 -26.051  1.00 37.28           O
ATOM    329  N   CYS A  43      -4.085 -38.223 -25.703  1.00 38.04           N
ATOM    330  CA  CYS A  43      -5.185 -37.451 -26.249  1.00 37.35           C
ATOM    331  C   CYS A  43      -6.183 -37.094 -25.154  1.00 39.01           C
ATOM    332  O   CYS A  43      -6.124 -37.600 -24.030  1.00 36.28           O
ATOM    333  CB  CYS A  43      -5.906 -38.232 -27.358  1.00 39.14           C
ATOM    334  SG  CYS A  43      -4.859 -38.897 -28.679  1.00 45.43           S
ATOM    335  N   SER A  44      -7.105 -36.197 -25.509  1.00 31.39           N
ATOM    336  CA  SER A  44      -8.307 -35.969 -24.723  1.00 39.22           C
ATOM    337  C   SER A  44      -9.268 -37.152 -24.850  1.00 32.71           C
ATOM    338  O   SER A  44      -9.235 -37.885 -25.839  1.00 32.84           O
ATOM    339  CB  SER A  44      -9.012 -34.696 -25.188  1.00 30.99           C
ATOM    340  OG  SER A  44      -8.220 -33.575 -24.904  1.00 45.47           O
ATOM    341  N   PRO A  45     -10.142 -37.348 -23.867  1.00 33.31           N
ATOM    342  CA  PRO A  45     -11.204 -38.353 -24.017  1.00 33.29           C
ATOM    343  C   PRO A  45     -12.228 -37.868 -25.020  1.00 32.07           C
ATOM    344  O   PRO A  45     -12.365 -36.670 -25.249  1.00 32.00           O
ATOM    345  CB  PRO A  45     -11.834 -38.454 -22.619  1.00 31.57           C
ATOM    346  CG  PRO A  45     -10.929 -37.662 -21.691  1.00 30.82           C
ATOM    347  CD  PRO A  45     -10.241 -36.635 -22.584  1.00 31.07           C
ATOM    348  N   THR A  46     -12.957 -38.819 -25.615  1.00 32.20           N
ATOM    349  CA  THR A  46     -14.086 -38.499 -26.479  1.00 35.85           C
ATOM    350  C   THR A  46     -15.240 -39.477 -26.236  1.00 34.81           C
ATOM    351  O   THR A  46     -15.041 -40.654 -25.909  1.00 33.28           O
ATOM    352  CB  THR A  46     -13.655 -38.491 -27.955  1.00 39.86           C
ATOM    353  OG1 THR A  46     -14.641 -37.812 -28.729  1.00 47.58           O
ATOM    354  CG2 THR A  46     -13.484 -39.914 -28.496  1.00 37.19           C
ATOM    355  N   ILE A  47     -16.456 -38.976 -26.387  1.00 33.57           N
ATOM    356  CA  ILE A  47     -17.642 -39.759 -26.051  1.00 33.98           C
ATOM    357  C   ILE A  47     -17.857 -40.802 -27.141  1.00 31.34           C
ATOM    358  O   ILE A  47     -17.736 -40.501 -28.333  1.00 38.49           O
ATOM    359  CB  ILE A  47     -18.866 -38.839 -25.900  1.00 39.24           C
ATOM    360  CG1 ILE A  47     -20.130 -39.632 -25.550  1.00 37.15           C
ATOM    361  CG2 ILE A  47     -19.125 -38.057 -27.178  1.00 36.85           C
ATOM    362  CD1 ILE A  47     -20.398 -39.700 -24.078  1.00 37.46           C
ATOM    363  N   VAL A  48     -18.119 -42.043 -26.747  1.00 30.29           N
ATOM    364  CA  VAL A  48     -18.564 -43.045 -27.703  1.00 33.21           C
ATOM    365  C   VAL A  48     -20.006 -43.498 -27.458  1.00 29.14           C
ATOM    366  O   VAL A  48     -20.700 -43.848 -28.418  1.00 32.51           O
ATOM    367  CB  VAL A  48     -17.600 -44.251 -27.760  1.00 32.84           C
```

[2196]

```
ATOM    368  CG1 VAL A  48     -16.189 -43.777 -28.270  1.00 33.03           C
ATOM    369  CG2 VAL A  48     -17.464 -44.911 -26.407  1.00 31.72           C
ATOM    370  N   ILE A  49     -20.489 -43.472 -26.219  1.00 30.20           N
ATOM    371  CA  ILE A  49     -21.867 -43.837 -25.887  1.00 27.54           C
ATOM    372  C   ILE A  49     -22.347 -42.921 -24.772  1.00 30.38           C
ATOM    373  O   ILE A  49     -21.695 -42.820 -23.729  1.00 28.18           O
ATOM    374  CB  ILE A  49     -22.003 -45.308 -25.431  1.00 30.65           C
ATOM    375  CG1 ILE A  49     -21.729 -46.295 -26.577  1.00 29.69           C
ATOM    376  CG2 ILE A  49     -23.386 -45.546 -24.771  1.00 31.17           C
ATOM    377  CD1 ILE A  49     -22.773 -46.275 -27.677  1.00 33.79           C
ATOM    378  N   PHE A  50     -23.518 -42.305 -24.949  1.00 31.66           N
ATOM    379  CA  PHE A  50     -24.123 -41.564 -23.854  1.00 29.60           C
ATOM    380  C   PHE A  50     -25.549 -42.052 -23.658  1.00 28.91           C
ATOM    381  O   PHE A  50     -26.143 -42.649 -24.547  1.00 32.74           O
ATOM    382  CB  PHE A  50     -24.072 -40.021 -24.076  1.00 29.54           C
ATOM    383  CG  PHE A  50     -24.971 -39.511 -25.184  1.00 31.85           C
ATOM    384  CD1 PHE A  50     -24.552 -39.547 -26.511  1.00 31.97           C
ATOM    385  CD2 PHE A  50     -26.224 -38.982 -24.893  1.00 34.29           C
ATOM    386  CE1 PHE A  50     -25.372 -39.082 -27.532  1.00 35.24           C
ATOM    387  CE2 PHE A  50     -27.072 -38.500 -25.909  1.00 36.80           C
ATOM    388  CZ  PHE A  50     -26.653 -38.550 -27.233  1.00 34.08           C
ATOM    389  N   ALA A  51     -26.077 -41.799 -22.465  1.00 31.83           N
ATOM    390  CA  ALA A  51     -27.432 -42.196 -22.077  1.00 32.71           C
ATOM    391  C   ALA A  51     -27.655 -43.684 -22.331  1.00 33.79           C
ATOM    392  O   ALA A  51     -28.633 -44.087 -22.974  1.00 29.27           O
ATOM    393  CB  ALA A  51     -28.495 -41.342 -22.789  1.00 24.83           C
ATOM    394  N   ASN A  52     -26.710 -44.500 -21.829  1.00 30.92           N
ATOM    395  CA  ASN A  52     -26.766 -45.966 -21.848  1.00 31.19           C
ATOM    396  C   ASN A  52     -26.479 -46.535 -23.222  1.00 32.61           C
ATOM    397  O   ASN A  52     -25.697 -47.480 -23.346  1.00 30.43           O
ATOM    398  CB  ASN A  52     -28.125 -46.492 -21.377  1.00 30.17           C
ATOM    399  CG  ASN A  52     -28.421 -46.101 -19.962  1.00 33.00           C
ATOM    400  OD1 ASN A  52     -27.512 -45.700 -19.220  1.00 33.83           O
ATOM    401  ND2 ASN A  52     -29.686 -46.197 -19.567  1.00 31.94           N
ATOM    402  N   ASN A  53     -27.135 -45.991 -24.257  1.00 38.53           N
ATOM    403  CA  ASN A  53     -27.047 -46.602 -25.580  1.00 35.48           C
ATOM    404  C   ASN A  53     -27.125 -45.620 -26.746  1.00 37.65           C
ATOM    405  O   ASN A  53     -27.374 -46.065 -27.871  1.00 40.45           O
ATOM    406  CB  ASN A  53     -28.147 -47.660 -25.741  1.00 30.53           C
ATOM    407  CG  ASN A  53     -29.571 -47.084 -25.621  1.00 38.00           C
ATOM    408  OD1 ASN A  53     -29.785 -45.870 -25.523  1.00 31.81           O
ATOM    409  ND2 ASN A  53     -30.554 -47.984 -25.605  1.00 36.86           N
ATOM    410  N   GLN A  54     -26.955 -44.319 -26.542  1.00 35.75           N
ATOM    411  CA  GLN A  54     -27.011 -43.374 -27.648  1.00 36.13           C
ATOM    412  C   GLN A  54     -25.631 -43.204 -28.269  1.00 34.87           C
ATOM    413  O   GLN A  54     -24.626 -43.129 -27.560  1.00 38.93           O
ATOM    414  CB  GLN A  54     -27.539 -42.017 -27.183  1.00 32.40           C
ATOM    415  CG  GLN A  54     -28.889 -42.084 -26.592  1.00 34.33           C
ATOM    416  CD  GLN A  54     -29.895 -42.585 -27.601  1.00 39.58           C
ATOM    417  OE1 GLN A  54     -30.223 -41.895 -28.559  1.00 41.17           O
ATOM    418  NE2 GLN A  54     -30.361 -43.811 -27.407  1.00 37.61           N
ATOM    419  N   ARG A  55     -25.587 -43.156 -29.598  1.00 38.34           N
ATOM    420  CA  ARG A  55     -24.331 -43.041 -30.326  1.00 37.59           C
ATOM    421  C   ARG A  55     -24.260 -41.680 -30.994  1.00 43.23           C
ATOM    422  O   ARG A  55     -25.105 -41.380 -31.849  1.00 47.25           O
ATOM    423  CB  ARG A  55     -24.211 -44.138 -31.375  1.00 42.90           C
ATOM    424  CG  ARG A  55     -22.828 -44.737 -31.507  1.00 48.47           C
ATOM    425  CD  ARG A  55     -22.706 -45.611 -32.762  1.00 45.69           C
ATOM    426  NE  ARG A  55     -23.897 -46.422 -33.014  1.00 51.04           N
ATOM    427  CZ  ARG A  55     -24.768 -46.180 -33.990  1.00 53.12           C
ATOM    428  NH1 ARG A  55     -25.815 -46.974 -34.148  1.00 51.69           N
ATOM    429  NH2 ARG A  55     -24.600 -45.131 -34.793  1.00 55.34           N
ATOM    430  N   PRO A  56     -23.278 -40.843 -30.670  1.00 44.36           N
ATOM    431  CA  PRO A  56     -23.164 -39.544 -31.342  1.00 40.27           C
ATOM    432  C   PRO A  56     -22.828 -39.726 -32.813  1.00 43.82           C
ATOM    433  O   PRO A  56     -22.397 -40.796 -33.255  1.00 43.99           O
ATOM    434  CB  PRO A  56     -22.018 -38.845 -30.601  1.00 44.15           C
ATOM    435  CG  PRO A  56     -21.763 -39.674 -29.360  1.00 42.83           C
```

[2197]

```
ATOM    436  CD  PRO A  56     -22.196 -41.070 -29.696  1.00 39.97           C
ATOM    437  N   SER A  57     -23.055 -38.661 -33.578  1.00 42.86           N
ATOM    438  CA  SER A  57     -22.639 -38.633 -34.975  1.00 48.45           C
ATOM    439  C   SER A  57     -21.126 -38.755 -35.070  1.00 43.83           C
ATOM    440  O   SER A  57     -20.389 -38.124 -34.309  1.00 50.84           O
ATOM    441  CB  SER A  57     -23.100 -37.335 -35.646  1.00 46.99           C
ATOM    442  N   GLY A  58     -20.657 -39.589 -35.993  1.00 41.55           N
ATOM    443  CA  GLY A  58     -19.233 -39.795 -36.166  1.00 40.52           C
ATOM    444  C   GLY A  58     -18.667 -41.000 -35.442  1.00 43.88           C
ATOM    445  O   GLY A  58     -17.520 -41.384 -35.713  1.00 52.49           O
ATOM    446  N   VAL A  59     -19.413 -41.589 -34.515  1.00 41.95           N
ATOM    447  CA  VAL A  59     -18.949 -42.793 -33.834  1.00 39.24           C
ATOM    448  C   VAL A  59     -19.392 -43.999 -34.648  1.00 39.92           C
ATOM    449  O   VAL A  59     -20.583 -44.141 -34.960  1.00 33.24           O
ATOM    450  CB  VAL A  59     -19.458 -42.852 -32.387  1.00 39.33           C
ATOM    451  CG1 VAL A  59     -19.091 -44.190 -31.731  1.00 33.89           C
ATOM    452  CG2 VAL A  59     -18.860 -41.697 -31.594  1.00 36.60           C
ATOM    453  N   PRO A  60     -18.473 -44.884 -35.024  1.00 41.00           N
ATOM    454  CA  PRO A  60     -18.856 -46.019 -35.869  1.00 42.34           C
ATOM    455  C   PRO A  60     -19.925 -46.860 -35.182  1.00 45.33           C
ATOM    456  O   PRO A  60     -19.976 -46.948 -33.954  1.00 42.00           O
ATOM    457  CB  PRO A  60     -17.544 -46.797 -36.035  1.00 42.38           C
ATOM    458  CG  PRO A  60     -16.432 -45.921 -35.419  1.00 46.05           C
ATOM    459  CD  PRO A  60     -17.027 -44.602 -35.057  1.00 41.14           C
ATOM    460  N   ASP A  61     -20.802 -47.473 -35.987  1.00 47.74           N
ATOM    461  CA  ASP A  61     -21.927 -48.216 -35.413  1.00 46.70           C
ATOM    462  C   ASP A  61     -21.536 -49.571 -34.844  1.00 39.58           C
ATOM    463  O   ASP A  61     -22.367 -50.225 -34.208  1.00 39.09           O
ATOM    464  CB  ASP A  61     -23.042 -48.405 -36.453  1.00 52.12           C
ATOM    465  CG  ASP A  61     -22.576 -49.180 -37.680  1.00 58.54           C
ATOM    466  OD1 ASP A  61     -21.348 -49.241 -37.924  1.00 59.27           O
ATOM    467  OD2 ASP A  61     -23.436 -49.747 -38.389  1.00 63.95           O
ATOM    468  N   ARG A  62     -20.283 -49.975 -34.976  1.00 39.37           N
ATOM    469  CA  ARG A  62     -19.836 -51.149 -34.245  1.00 37.15           C
ATOM    470  C   ARG A  62     -19.816 -50.926 -32.732  1.00 35.85           C
ATOM    471  O   ARG A  62     -19.683 -51.904 -31.994  1.00 37.34           O
ATOM    472  CB  ARG A  62     -18.468 -51.600 -34.768  1.00 39.44           C
ATOM    473  CG  ARG A  62     -17.327 -50.641 -34.595  1.00 40.97           C
ATOM    474  CD  ARG A  62     -16.083 -51.235 -35.253  1.00 41.63           C
ATOM    475  NE  ARG A  62     -14.884 -50.467 -34.967  1.00 43.97           N
ATOM    476  CZ  ARG A  62     -14.470 -49.446 -35.707  1.00 47.90           C
ATOM    477  NH1 ARG A  62     -15.178 -49.070 -36.766  1.00 50.67           N
ATOM    478  NH2 ARG A  62     -13.353 -48.803 -35.390  1.00 43.44           N
ATOM    479  N   PHE A  63     -19.942 -49.680 -32.251  1.00 36.23           N
ATOM    480  CA  PHE A  63     -20.031 -49.400 -30.818  1.00 34.21           C
ATOM    481  C   PHE A  63     -21.486 -49.412 -30.380  1.00 38.06           C
ATOM    482  O   PHE A  63     -22.324 -48.736 -30.992  1.00 38.43           O
ATOM    483  CB  PHE A  63     -19.421 -48.040 -30.459  1.00 30.75           C
ATOM    484  CG  PHE A  63     -17.928 -47.978 -30.636  1.00 34.38           C
ATOM    485  CD1 PHE A  63     -17.368 -47.695 -31.874  1.00 35.59           C
ATOM    486  CD2 PHE A  63     -17.086 -48.224 -29.560  1.00 29.76           C
ATOM    487  CE1 PHE A  63     -15.980 -47.671 -32.042  1.00 40.45           C
ATOM    488  CE2 PHE A  63     -15.715 -48.210 -29.721  1.00 36.18           C
ATOM    489  CZ  PHE A  63     -15.159 -47.923 -30.972  1.00 37.83           C
ATOM    490  N   SER A  64     -21.784 -50.164 -29.316  1.00 31.96           N
ATOM    491  CA  SER A  64     -23.122 -50.136 -28.729  1.00 38.00           C
ATOM    492  C   SER A  64     -23.037 -50.268 -27.211  1.00 37.46           C
ATOM    493  O   SER A  64     -22.062 -50.782 -26.660  1.00 36.01           O
ATOM    494  CB  SER A  64     -24.025 -51.240 -29.299  1.00 36.67           C
ATOM    495  OG  SER A  64     -23.506 -52.524 -29.025  1.00 39.61           O
ATOM    496  N   GLY A  65     -24.070 -49.780 -26.542  1.00 34.05           N
ATOM    497  CA  GLY A  65     -24.124 -49.819 -25.097  1.00 32.87           C
ATOM    498  C   GLY A  65     -25.416 -50.436 -24.611  1.00 32.62           C
ATOM    499  O   GLY A  65     -26.433 -50.426 -25.297  1.00 35.41           O
ATOM    500  N   SER A  66     -25.357 -51.002 -23.406  1.00 38.01           N
ATOM    501  CA  SER A  66     -26.526 -51.605 -22.783  1.00 35.68           C
ATOM    502  C   SER A  66     -26.366 -51.541 -21.273  1.00 38.12           C
ATOM    503  O   SER A  66     -25.291 -51.232 -20.750  1.00 35.38           O
```

[2198]

```
ATOM    504  CB  SER A  66     -26.710 -53.066 -23.213  1.00 42.88           C
ATOM    505  OG  SER A  66     -25.573 -53.837 -22.834  1.00 43.15           O
ATOM    506  N   ILE A  67     -27.458 -51.830 -20.569  1.00 37.39           N
ATOM    507  CA  ILE A  67     -27.421 -51.926 -19.118  1.00 37.51           C
ATOM    508  C   ILE A  67     -28.097 -53.230 -18.704  1.00 36.55           C
ATOM    509  O   ILE A  67     -28.916 -53.791 -19.436  1.00 35.58           O
ATOM    510  CB  ILE A  67     -28.076 -50.706 -18.434  1.00 35.67           C
ATOM    511  CG1 ILE A  67     -29.583 -50.717 -18.621  1.00 35.57           C
ATOM    512  CG2 ILE A  67     -27.491 -49.395 -18.987  1.00 32.90           C
ATOM    513  CD1 ILE A  67     -30.264 -49.603 -17.888  1.00 35.79           C
ATOM    514  N   ASP A  68     -27.678 -53.760 -17.564  1.00 38.23           N
ATOM    515  CA  ASP A  68     -28.289 -54.951 -16.979  1.00 43.47           C
ATOM    516  C   ASP A  68     -28.638 -54.580 -15.540  1.00 42.89           C
ATOM    517  O   ASP A  68     -27.773 -54.586 -14.657  1.00 40.25           O
ATOM    518  CB  ASP A  68     -27.359 -56.160 -17.059  1.00 42.27           C
ATOM    519  CG  ASP A  68     -27.943 -57.401 -16.372  1.00 48.44           C
ATOM    520  OD1 ASP A  68     -29.087 -57.336 -15.867  1.00 45.49           O
ATOM    521  OD2 ASP A  68     -27.259 -58.449 -16.352  1.00 49.27           O
ATOM    522  N   SER A  69     -29.908 -54.241 -15.316  1.00 39.69           N
ATOM    523  CA  SER A  69     -30.327 -53.742 -14.010  1.00 41.76           C
ATOM    524  C   SER A  69     -30.138 -54.774 -12.905  1.00 42.29           C
ATOM    525  O   SER A  69     -29.849 -54.406 -11.761  1.00 41.15           O
ATOM    526  CB  SER A  69     -31.790 -53.305 -14.066  1.00 42.18           C
ATOM    527  OG  SER A  69     -32.229 -52.855 -12.798  1.00 47.14           O
ATOM    528  N   SER A  70     -30.296 -56.064 -13.218  1.00 40.39           N
ATOM    529  CA  SER A  70     -30.271 -57.066 -12.156  1.00 45.26           C
ATOM    530  C   SER A  70     -28.857 -57.289 -11.640  1.00 42.28           C
ATOM    531  O   SER A  70     -28.669 -57.584 -10.456  1.00 42.56           O
ATOM    532  CB  SER A  70     -30.915 -58.387 -12.618  1.00 45.47           C
ATOM    533  OG  SER A  70     -30.774 -58.596 -14.015  1.00 53.90           O
ATOM    534  N   SER A  71     -27.855 -57.131 -12.487  1.00 40.25           N
ATOM    535  CA  SER A  71     -26.481 -57.215 -12.018  1.00 43.58           C
ATOM    536  C   SER A  71     -25.896 -55.843 -11.712  1.00 37.70           C
ATOM    537  O   SER A  71     -24.732 -55.756 -11.314  1.00 38.01           O
ATOM    538  CB  SER A  71     -25.615 -57.948 -13.052  1.00 43.77           C
ATOM    539  OG  SER A  71     -25.729 -57.351 -14.334  1.00 47.80           O
ATOM    540  N   ASN A  72     -26.700 -54.781 -11.842  1.00 38.68           N
ATOM    541  CA  ASN A  72     -26.284 -53.406 -11.570  1.00 33.59           C
ATOM    542  C   ASN A  72     -25.063 -53.012 -12.410  1.00 32.33           C
ATOM    543  O   ASN A  72     -24.096 -52.420 -11.922  1.00 31.89           O
ATOM    544  CB  ASN A  72     -26.020 -53.207 -10.072  1.00 31.58           C
ATOM    545  CG  ASN A  72     -26.587 -51.898  -9.549  1.00 37.43           C
ATOM    546  OD1 ASN A  72     -27.669 -51.472  -9.964  1.00 35.08           O
ATOM    547  ND2 ASN A  72     -25.869 -51.256  -8.638  1.00 34.79           N
ATOM    548  N   SER A  73     -25.116 -53.329 -13.694  1.00 28.40           N
ATOM    549  CA  SER A  73     -23.940 -53.171 -14.533  1.00 35.06           C
ATOM    550  C   SER A  73     -24.329 -52.621 -15.899  1.00 34.79           C
ATOM    551  O   SER A  73     -25.460 -52.774 -16.362  1.00 36.31           O
ATOM    552  CB  SER A  73     -23.196 -54.504 -14.690  1.00 36.20           C
ATOM    553  OG  SER A  73     -23.950 -55.393 -15.499  1.00 38.82           O
ATOM    554  N   ALA A  74     -23.357 -51.990 -16.542  1.00 30.29           N
ATOM    555  CA  ALA A  74     -23.488 -51.489 -17.894  1.00 33.46           C
ATOM    556  C   ALA A  74     -22.375 -52.090 -18.729  1.00 30.95           C
ATOM    557  O   ALA A  74     -21.356 -52.532 -18.198  1.00 29.93           O
ATOM    558  CB  ALA A  74     -23.412 -49.961 -17.943  1.00 32.22           C
ATOM    559  N   SER A  75     -22.580 -52.109 -20.046  1.00 30.75           N
ATOM    560  CA  SER A  75     -21.625 -52.752 -20.939  1.00 32.93           C
ATOM    561  C   SER A  75     -21.441 -51.956 -22.217  1.00 34.41           C
ATOM    562  O   SER A  75     -22.408 -51.484 -22.823  1.00 30.88           O
ATOM    563  CB  SER A  75     -22.046 -54.184 -21.321  1.00 30.08           C
ATOM    564  OG  SER A  75     -22.157 -54.992 -20.169  1.00 35.98           O
ATOM    565  N   LEU A  76     -20.187 -51.872 -22.641  1.00 29.60           N
ATOM    566  CA  LEU A  76     -19.825 -51.362 -23.949  1.00 31.98           C
ATOM    567  C   LEU A  76     -19.452 -52.558 -24.807  1.00 28.71           C
ATOM    568  O   LEU A  76     -18.646 -53.399 -24.391  1.00 28.43           O
ATOM    569  CB  LEU A  76     -18.658 -50.372 -23.844  1.00 29.50           C
ATOM    570  CG  LEU A  76     -18.101 -49.885 -25.177  1.00 34.18           C
ATOM    571  CD1 LEU A  76     -19.125 -48.998 -25.865  1.00 23.26           C
```

[2199]

```
ATOM    572  CD2 LEU A  76     -16.772 -49.150 -24.993  1.00 29.38           C
ATOM    573  N   THR A  77     -20.047 -52.649 -25.990  1.00 29.65           N
ATOM    574  CA  THR A  77     -19.763 -53.749 -26.904  1.00 30.15           C
ATOM    575  C   THR A  77     -19.197 -53.201 -28.200  1.00 31.17           C
ATOM    576  O   THR A  77     -19.773 -52.288 -28.794  1.00 36.80           O
ATOM    577  CB  THR A  77     -21.012 -54.584 -27.180  1.00 34.83           C
ATOM    578  OG1 THR A  77     -21.518 -55.090 -25.938  1.00 35.54           O
ATOM    579  CG2 THR A  77     -20.666 -55.773 -28.081  1.00 32.11           C
ATOM    580  N   ILE A  78     -18.067 -53.752 -28.624  1.00 32.44           N
ATOM    581  CA  ILE A  78     -17.430 -53.387 -29.879  1.00 35.57           C
ATOM    582  C   ILE A  78     -17.432 -54.625 -30.761  1.00 35.25           C
ATOM    583  O   ILE A  78     -16.728 -55.601 -30.472  1.00 38.10           O
ATOM    584  CB  ILE A  78     -15.998 -52.868 -29.674  1.00 35.15           C
ATOM    585  CG1 ILE A  78     -15.976 -51.785 -28.585  1.00 29.32           C
ATOM    586  CG2 ILE A  78     -15.450 -52.353 -30.995  1.00 36.16           C
ATOM    587  CD1 ILE A  78     -14.578 -51.298 -28.216  1.00 33.82           C
ATOM    588  N   SER A  79     -18.222 -54.595 -31.825  1.00 39.10           N
ATOM    589  CA  SER A  79     -18.187 -55.653 -32.826  1.00 43.27           C
ATOM    590  C   SER A  79     -17.140 -55.318 -33.883  1.00 40.65           C
ATOM    591  O   SER A  79     -16.765 -54.161 -34.063  1.00 42.73           O
ATOM    592  CB  SER A  79     -19.553 -55.806 -33.493  1.00 40.45           C
ATOM    593  OG  SER A  79     -19.734 -54.761 -34.445  1.00 45.10           O
ATOM    594  N   GLY A  80     -16.677 -56.341 -34.594  1.00 45.03           N
ATOM    595  CA  GLY A  80     -15.764 -56.118 -35.707  1.00 44.09           C
ATOM    596  C   GLY A  80     -14.541 -55.295 -35.358  1.00 44.87           C
ATOM    597  O   GLY A  80     -14.239 -54.293 -36.013  1.00 46.29           O
ATOM    598  N   LEU A  81     -13.845 -55.704 -34.304  1.00 42.89           N
ATOM    599  CA  LEU A  81     -12.758 -54.915 -33.747  1.00 40.63           C
ATOM    600  C   LEU A  81     -11.749 -54.522 -34.815  1.00 44.93           C
ATOM    601  O   LEU A  81     -11.325 -55.349 -35.627  1.00 43.46           O
ATOM    602  CB  LEU A  81     -12.047 -55.704 -32.646  1.00 40.01           C
ATOM    603  CG  LEU A  81     -12.370 -55.439 -31.187  1.00 41.30           C
ATOM    604  CD1 LEU A  81     -11.412 -56.226 -30.344  1.00 43.14           C
ATOM    605  CD2 LEU A  81     -12.244 -53.951 -30.883  1.00 39.06           C
ATOM    606  N   LYS A  82     -11.383 -53.247 -34.820  1.00 42.64           N
ATOM    607  CA  LYS A  82     -10.302 -52.752 -35.653  1.00 44.81           C
ATOM    608  C   LYS A  82      -9.151 -52.310 -34.761  1.00 41.06           C
ATOM    609  O   LYS A  82      -9.335 -51.987 -33.585  1.00 40.06           O
ATOM    610  CB  LYS A  82     -10.778 -51.596 -36.538  1.00 45.59           C
ATOM    611  CG  LYS A  82     -12.016 -51.953 -37.334  1.00 48.14           C
ATOM    612  CD  LYS A  82     -12.282 -50.987 -38.469  1.00 54.35           C
ATOM    613  CE  LYS A  82     -13.417 -51.522 -39.344  1.00 59.77           C
ATOM    614  NZ  LYS A  82     -13.562 -50.789 -40.635  1.00 73.20           N
ATOM    615  N   THR A  83      -7.947 -52.316 -35.325  1.00 42.50           N
ATOM    616  CA  THR A  83      -6.788 -51.908 -34.541  1.00 43.41           C
ATOM    617  C   THR A  83      -6.945 -50.488 -34.002  1.00 41.31           C
ATOM    618  O   THR A  83      -6.451 -50.184 -32.911  1.00 36.95           O
ATOM    619  CB  THR A  83      -5.511 -52.026 -35.382  1.00 53.14           C
ATOM    620  OG1 THR A  83      -5.682 -51.323 -36.619  1.00 56.16           O
ATOM    621  CG2 THR A  83      -5.210 -53.486 -35.685  1.00 49.82           C
ATOM    622  N   GLU A  84      -7.657 -49.614 -34.719  1.00 41.89           N
ATOM    623  CA  GLU A  84      -7.831 -48.259 -34.204  1.00 48.38           C
ATOM    624  C   GLU A  84      -8.698 -48.219 -32.952  1.00 43.78           C
ATOM    625  O   GLU A  84      -8.747 -47.179 -32.286  1.00 41.72           O
ATOM    626  CB  GLU A  84      -8.446 -47.331 -35.264  1.00 50.69           C
ATOM    627  CG  GLU A  84      -9.774 -47.812 -35.863  1.00 55.03           C
ATOM    628  CD  GLU A  84     -10.414 -46.795 -36.826  1.00 65.21           C
ATOM    629  OE1 GLU A  84      -9.711 -45.858 -37.267  1.00 72.23           O
ATOM    630  OE2 GLU A  84     -11.625 -46.929 -37.144  1.00 65.66           O
ATOM    631  N   ASP A  85      -9.366 -49.316 -32.601  1.00 39.04           N
ATOM    632  CA  ASP A  85     -10.145 -49.338 -31.369  1.00 37.92           C
ATOM    633  C   ASP A  85      -9.287 -49.516 -30.124  1.00 35.29           C
ATOM    634  O   ASP A  85      -9.791 -49.331 -29.010  1.00 33.17           O
ATOM    635  CB  ASP A  85     -11.197 -50.447 -31.453  1.00 32.42           C
ATOM    636  CG  ASP A  85     -12.090 -50.290 -32.669  1.00 41.17           C
ATOM    637  OD1 ASP A  85     -12.270 -49.128 -33.113  1.00 40.18           O
ATOM    638  OD2 ASP A  85     -12.601 -51.312 -33.180  1.00 42.28           O
ATOM    639  N   GLU A  86      -8.016 -49.868 -30.282  1.00 33.25           N
```

[2200]

```
ATOM    640  CA  GLU A  86      -7.121 -49.981 -29.140  1.00 35.92           C
ATOM    641  C   GLU A  86      -7.017 -48.641 -28.424  1.00 32.62           C
ATOM    642  O   GLU A  86      -6.618 -47.639 -29.015  1.00 37.12           O
ATOM    643  CB  GLU A  86      -5.737 -50.463 -29.593  1.00 35.44           C
ATOM    644  CG  GLU A  86      -4.738 -50.593 -28.444  1.00 33.93           C
ATOM    645  CD  GLU A  86      -3.603 -51.587 -28.715  1.00 44.01           C
ATOM    646  OE1 GLU A  86      -3.826 -52.621 -29.395  1.00 42.22           O
ATOM    647  OE2 GLU A  86      -2.464 -51.296 -28.268  1.00 43.16           O
ATOM    648  N   ALA A  87      -7.401 -48.624 -27.155  1.00 33.29           N
ATOM    649  CA  ALA A  87      -7.505 -47.387 -26.401  1.00 32.43           C
ATOM    650  C   ALA A  87      -7.934 -47.722 -24.987  1.00 33.49           C
ATOM    651  O   ALA A  87      -8.194 -48.890 -24.678  1.00 32.57           O
ATOM    652  CB  ALA A  87      -8.513 -46.425 -27.048  1.00 31.79           C
ATOM    653  N   ASP A  88      -8.049 -46.701 -24.141  1.00 31.91           N
ATOM    654  CA  ASP A  88      -8.598 -46.834 -22.800  1.00 29.72           C
ATOM    655  C   ASP A  88     -10.063 -46.386 -22.803  1.00 33.30           C
ATOM    656  O   ASP A  88     -10.370 -45.269 -23.232  1.00 33.17           O
ATOM    657  CB  ASP A  88      -7.781 -45.985 -21.827  1.00 32.13           C
ATOM    658  CG  ASP A  88      -7.923 -46.432 -20.395  1.00 41.05           C
ATOM    659  OD1 ASP A  88      -8.893 -47.162 -20.102  1.00 40.71           O
ATOM    660  OD2 ASP A  88      -7.095 -46.021 -19.543  1.00 44.13           O
ATOM    661  N   TYR A  89     -10.964 -47.240 -22.324  1.00 27.27           N
ATOM    662  CA  TYR A  89     -12.397 -46.924 -22.285  1.00 34.11           C
ATOM    663  C   TYR A  89     -12.855 -46.726 -20.844  1.00 31.50           C
ATOM    664  O   TYR A  89     -12.595 -47.577 -19.988  1.00 33.33           O
ATOM    665  CB  TYR A  89     -13.221 -48.027 -22.967  1.00 28.71           C
ATOM    666  CG  TYR A  89     -12.916 -48.105 -24.446  1.00 30.27           C
ATOM    667  CD1 TYR A  89     -11.806 -48.823 -24.909  1.00 28.65           C
ATOM    668  CD2 TYR A  89     -13.703 -47.428 -25.380  1.00 28.60           C
ATOM    669  CE1 TYR A  89     -11.506 -48.878 -26.254  1.00 28.68           C
ATOM    670  CE2 TYR A  89     -13.406 -47.481 -26.730  1.00 28.53           C
ATOM    671  CZ  TYR A  89     -12.296 -48.199 -27.158  1.00 30.68           C
ATOM    672  OH  TYR A  89     -11.980 -48.257 -28.500  1.00 30.05           O
ATOM    673  N   TYR A  90     -13.513 -45.593 -20.577  1.00 27.70           N
ATOM    674  CA  TYR A  90     -13.991 -45.227 -19.245  1.00 27.37           C
ATOM    675  C   TYR A  90     -15.515 -45.228 -19.203  1.00 29.16           C
ATOM    676  O   TYR A  90     -16.157 -44.599 -20.051  1.00 30.29           O
ATOM    677  CB  TYR A  90     -13.496 -43.832 -18.825  1.00 27.36           C
ATOM    678  CG  TYR A  90     -12.003 -43.706 -18.599  1.00 27.21           C
ATOM    679  CD1 TYR A  90     -11.134 -43.427 -19.655  1.00 31.02           C
ATOM    680  CD2 TYR A  90     -11.466 -43.846 -17.333  1.00 28.26           C
ATOM    681  CE1 TYR A  90      -9.765 -43.321 -19.441  1.00 33.04           C
ATOM    682  CE2 TYR A  90     -10.098 -43.728 -17.106  1.00 26.47           C
ATOM    683  CZ  TYR A  90      -9.257 -43.476 -18.160  1.00 30.75           C
ATOM    684  OH  TYR A  90      -7.892 -43.364 -17.933  1.00 34.77           O
ATOM    685  N   CYS A  91     -16.092 -45.911 -18.216  1.00 28.27           N
ATOM    686  CA  CYS A  91     -17.508 -45.741 -17.917  1.00 32.03           C
ATOM    687  C   CYS A  91     -17.699 -44.596 -16.932  1.00 29.84           C
ATOM    688  O   CYS A  91     -16.803 -44.245 -16.165  1.00 33.18           O
ATOM    689  CB  CYS A  91     -18.141 -47.016 -17.341  1.00 32.93           C
ATOM    690  SG  CYS A  91     -17.359 -47.671 -15.826  1.00 41.09           S
ATOM    691  N   GLN A  92     -18.894 -44.021 -16.952  1.00 28.69           N
ATOM    692  CA  GLN A  92     -19.190 -42.914 -16.069  1.00 29.06           C
ATOM    693  C   GLN A  92     -20.693 -42.852 -15.811  1.00 30.73           C
ATOM    694  O   GLN A  92     -21.500 -43.054 -16.726  1.00 30.01           O
ATOM    695  CB  GLN A  92     -18.646 -41.610 -16.671  1.00 30.04           C
ATOM    696  CG  GLN A  92     -18.963 -40.331 -15.906  1.00 28.76           C
ATOM    697  CD  GLN A  92     -19.997 -39.474 -16.626  1.00 32.91           C
ATOM    698  OE1 GLN A  92     -20.939 -39.987 -17.179  1.00 39.94           O
ATOM    699  NE2 GLN A  92     -19.760 -38.160 -16.685  1.00 38.41           N
ATOM    700  N   THR A  93     -21.061 -42.604 -14.560  1.00 26.78           N
ATOM    701  CA  THR A  93     -22.454 -42.290 -14.256  1.00 28.08           C
ATOM    702  C   THR A  93     -22.477 -41.363 -13.040  1.00 27.68           C
ATOM    703  O   THR A  93     -21.445 -40.804 -12.645  1.00 25.23           O
ATOM    704  CB  THR A  93     -23.269 -43.587 -14.091  1.00 26.04           C
ATOM    705  OG1 THR A  93     -24.654 -43.262 -13.922  1.00 28.60           O
ATOM    706  CG2 THR A  93     -22.778 -44.401 -12.906  1.00 26.30           C
[2201]
ATOM    707  N   TYR A  94     -23.640 -41.231 -12.408  1.00 25.64           N
```

```
ATOM    708  CA  TYR A  94     -23.826 -40.180 -11.417  1.00 25.10           C
ATOM    709  C   TYR A  94     -24.905 -40.600 -10.425  1.00 30.13           C
ATOM    710  O   TYR A  94     -25.513 -41.667 -10.552  1.00 30.72           O
ATOM    711  CB  TYR A  94     -24.197 -38.861 -12.113  1.00 26.52           C
ATOM    712  CG  TYR A  94     -25.430 -38.986 -13.011  1.00 28.23           C
ATOM    713  CD1 TYR A  94     -25.322 -39.428 -14.326  1.00 26.72           C
ATOM    714  CD2 TYR A  94     -26.701 -38.689 -12.526  1.00 29.68           C
ATOM    715  CE1 TYR A  94     -26.447 -39.556 -15.146  1.00 26.65           C
ATOM    716  CE2 TYR A  94     -27.831 -38.810 -13.329  1.00 28.89           C
ATOM    717  CZ  TYR A  94     -27.695 -39.249 -14.637  1.00 29.17           C
ATOM    718  OH  TYR A  94     -28.804 -39.367 -15.434  1.00 27.61           O
ATOM    719  N   ASP A  95     -25.108 -39.758  -9.397  1.00 33.48           N
ATOM    720  CA  ASP A  95     -26.263 -39.807  -8.499  1.00 34.08           C
ATOM    721  C   ASP A  95     -26.713 -38.349  -8.307  1.00 33.89           C
ATOM    722  O   ASP A  95     -26.180 -37.482  -9.012  1.00 30.71           O
ATOM    723  CB  ASP A  95     -25.918 -40.564  -7.206  1.00 33.56           C
ATOM    724  CG  ASP A  95     -24.986 -39.799  -6.266  1.00 39.50           C
ATOM    725  OD1 ASP A  95     -24.761 -38.572  -6.417  1.00 40.87           O
ATOM    726  OD2 ASP A  95     -24.503 -40.452  -5.314  1.00 45.53           O
ATOM    727  N   PRO A  96     -27.669 -38.010  -7.422  1.00 33.87           N
ATOM    728  CA  PRO A  96     -28.100 -36.597  -7.347  1.00 37.69           C
ATOM    729  C   PRO A  96     -26.991 -35.620  -6.980  1.00 37.14           C
ATOM    730  O   PRO A  96     -27.125 -34.421  -7.265  1.00 35.67           O
ATOM    731  CB  PRO A  96     -29.196 -36.615  -6.270  1.00 36.26           C
ATOM    732  CG  PRO A  96     -29.764 -37.992  -6.336  1.00 36.05           C
ATOM    733  CD  PRO A  96     -28.546 -38.861  -6.579  1.00 36.25           C
ATOM    734  N   TYR A  97     -25.914 -36.071  -6.339  1.00 36.74           N
ATOM    735  CA  TYR A  97     -24.921 -35.134  -5.837  1.00 40.21           C
ATOM    736  C   TYR A  97     -23.521 -35.294  -6.408  1.00 39.94           C
ATOM    737  O   TYR A  97     -22.710 -34.387  -6.225  1.00 44.93           O
ATOM    738  CB  TYR A  97     -24.845 -35.209  -4.305  1.00 40.84           C
ATOM    739  CG  TYR A  97     -26.106 -34.666  -3.668  1.00 41.73           C
ATOM    740  CD1 TYR A  97     -26.551 -33.376  -3.958  1.00 42.03           C
ATOM    741  CD2 TYR A  97     -26.855 -35.440  -2.796  1.00 45.93           C
ATOM    742  CE1 TYR A  97     -27.717 -32.870  -3.387  1.00 43.23           C
ATOM    743  CE2 TYR A  97     -28.020 -34.957  -2.230  1.00 42.85           C
ATOM    744  CZ  TYR A  97     -28.443 -33.675  -2.523  1.00 45.85           C
ATOM    745  OH  TYR A  97     -29.599 -33.198  -1.944  1.00 55.10           O
ATOM    746  N   SER A  98     -23.209 -36.389  -7.095  1.00 39.86           N
ATOM    747  CA  SER A  98     -21.832 -36.647  -7.493  1.00 38.09           C
ATOM    748  C   SER A  98     -21.801 -37.346  -8.841  1.00 36.08           C
ATOM    749  O   SER A  98     -22.791 -37.940  -9.283  1.00 33.23           O
ATOM    750  CB  SER A  98     -21.092 -37.502  -6.466  1.00 41.59           C
ATOM    751  OG  SER A  98     -21.702 -38.776  -6.378  1.00 45.34           O
ATOM    752  N   VAL A  99     -20.643 -37.247  -9.488  1.00 28.70           N
ATOM    753  CA  VAL A  99     -20.353 -37.900 -10.757  1.00 29.13           C
ATOM    754  C   VAL A  99     -19.169 -38.828 -10.532  1.00 31.17           C
ATOM    755  O   VAL A  99     -18.226 -38.462  -9.821  1.00 32.91           O
ATOM    756  CB  VAL A  99     -20.036 -36.866 -11.865  1.00 29.20           C
ATOM    757  CG1 VAL A  99     -19.642 -37.553 -13.146  1.00 27.83           C
ATOM    758  CG2 VAL A  99     -21.232 -35.937 -12.104  1.00 29.19           C
ATOM    759  N   VAL A 100     -19.203 -40.025 -11.126  1.00 29.64           N
ATOM    760  CA  VAL A 100     -18.143 -41.005 -10.907  1.00 29.43           C
ATOM    761  C   VAL A 100     -17.693 -41.590 -12.236  1.00 28.67           C
ATOM    762  O   VAL A 100     -18.521 -41.891 -13.102  1.00 31.39           O
ATOM    763  CB  VAL A 100     -18.584 -42.116  -9.936  1.00 31.35           C
ATOM    764  CG1 VAL A 100     -17.465 -43.159  -9.751  1.00 28.61           C
ATOM    765  CG2 VAL A 100     -18.958 -41.501  -8.600  1.00 27.27           C
ATOM    766  N   PHE A 101     -16.375 -41.685 -12.418  1.00 30.94           N
ATOM    767  CA  PHE A 101     -15.755 -42.420 -13.514  1.00 27.90           C
ATOM    768  C   PHE A 101     -15.232 -43.763 -13.005  1.00 30.96           C
ATOM    769  O   PHE A 101     -14.776 -43.876 -11.867  1.00 31.09           O
ATOM    770  CB  PHE A 101     -14.596 -41.631 -14.147  1.00 25.48           C
ATOM    771  CG  PHE A 101     -15.037 -40.413 -14.945  1.00 29.54           C
ATOM    772  CD1 PHE A 101     -15.320 -39.216 -14.314  1.00 27.78           C
ATOM    773  CD2 PHE A 101     -15.181 -40.484 -16.321  1.00 28.45           C
ATOM    774  CE1 PHE A 101     -15.728 -38.103 -15.043  1.00 31.34           C
ATOM    775  CE2 PHE A 101     -15.584 -39.388 -17.048  1.00 32.51           C
```

[2202]

```
ATOM    776  CZ  PHE A 101     -15.870 -38.192 -16.407  1.00 32.38           C
ATOM    777  N   GLY A 102     -15.310 -44.789 -13.854  1.00 28.36           N
ATOM    778  CA  GLY A 102     -14.568 -46.009 -13.597  1.00 29.08           C
ATOM    779  C   GLY A 102     -13.058 -45.811 -13.731  1.00 26.27           C
ATOM    780  O   GLY A 102     -12.550 -44.774 -14.169  1.00 26.21           O
ATOM    781  N   GLY A 103     -12.318 -46.847 -13.350  1.00 27.25           N
ATOM    782  CA  GLY A 103     -10.866 -46.759 -13.424  1.00 29.20           C
ATOM    783  C   GLY A 103     -10.301 -46.778 -14.833  1.00 33.54           C
ATOM    784  O   GLY A 103      -9.118 -46.466 -15.006  1.00 31.65           O
ATOM    785  N   GLY A 104     -11.117 -47.095 -15.844  1.00 33.49           N
ATOM    786  CA  GLY A 104     -10.622 -47.213 -17.208  1.00 28.26           C
ATOM    787  C   GLY A 104     -10.198 -48.630 -17.531  1.00 30.75           C
ATOM    788  O   GLY A 104      -9.546 -49.284 -16.715  1.00 31.67           O
ATOM    789  N   THR A 105     -10.621 -49.135 -18.687  1.00 29.98           N
ATOM    790  CA  THR A 105     -10.232 -50.451 -19.173  1.00 31.47           C
ATOM    791  C   THR A 105      -9.403 -50.252 -20.434  1.00 34.11           C
ATOM    792  O   THR A 105      -9.899 -49.682 -21.416  1.00 30.08           O
ATOM    793  CB  THR A 105     -11.445 -51.333 -19.487  1.00 33.75           C
ATOM    794  OG1 THR A 105     -12.252 -51.523 -18.315  1.00 29.50           O
ATOM    795  CG2 THR A 105     -10.969 -52.692 -20.006  1.00 29.18           C
ATOM    796  N   LYS A 106      -8.151 -50.717 -20.399  1.00 28.90           N
ATOM    797  CA  LYS A 106      -7.262 -50.652 -21.552  1.00 31.25           C
ATOM    798  C   LYS A 106      -7.503 -51.852 -22.454  1.00 30.49           C
ATOM    799  O   LYS A 106      -7.272 -52.995 -22.057  1.00 32.95           O
ATOM    800  CB  LYS A 106      -5.800 -50.593 -21.102  1.00 36.36           C
ATOM    801  CG  LYS A 106      -5.429 -49.250 -20.427  1.00 39.97           C
ATOM    802  CD  LYS A 106      -3.899 -49.063 -20.269  1.00 42.42           C
ATOM    803  N   LEU A 107      -7.957 -51.590 -23.665  1.00 30.36           N
ATOM    804  CA  LEU A 107      -8.275 -52.629 -24.625  1.00 32.26           C
ATOM    805  C   LEU A 107      -7.084 -52.827 -25.549  1.00 32.83           C
ATOM    806  O   LEU A 107      -6.618 -51.872 -26.174  1.00 32.12           O
ATOM    807  CB  LEU A 107      -9.520 -52.256 -25.428  1.00 30.84           C
ATOM    808  CG  LEU A 107      -9.880 -53.152 -26.612  1.00 35.48           C
ATOM    809  CD1 LEU A 107     -10.137 -54.597 -26.159  1.00 35.30           C
ATOM    810  CD2 LEU A 107     -11.104 -52.577 -27.264  1.00 37.12           C
ATOM    811  N   THR A 108      -6.583 -54.056 -25.611  1.00 31.79           N
ATOM    812  CA  THR A 108      -5.544 -54.430 -26.559  1.00 34.88           C
ATOM    813  C   THR A 108      -6.183 -55.197 -27.713  1.00 36.79           C
ATOM    814  O   THR A 108      -6.887 -56.183 -27.493  1.00 33.54           O
ATOM    815  CB  THR A 108      -4.470 -55.290 -25.876  1.00 36.95           C
ATOM    816  OG1 THR A 108      -3.801 -54.518 -24.877  1.00 35.87           O
ATOM    817  CG2 THR A 108      -3.454 -55.818 -26.872  1.00 29.98           C
ATOM    818  N   VAL A 109      -5.947 -54.731 -28.935  1.00 38.07           N
ATOM    819  CA  VAL A 109      -6.346 -55.443 -30.145  1.00 39.58           C
ATOM    820  C   VAL A 109      -5.148 -56.277 -30.605  1.00 44.72           C
ATOM    821  O   VAL A 109      -4.150 -55.735 -31.080  1.00 48.06           O
ATOM    822  CB  VAL A 109      -6.810 -54.470 -31.236  1.00 37.14           C
ATOM    823  CG1 VAL A 109      -7.172 -55.217 -32.486  1.00 40.56           C
ATOM    824  CG2 VAL A 109      -8.025 -53.638 -30.747  1.00 37.62           C
ATOM    825  N   LEU A 110      -5.229 -57.590 -30.402  1.00 44.84           N
ATOM    826  CA  LEU A 110      -4.136 -58.512 -30.701  1.00 51.28           C
ATOM    827  C   LEU A 110      -3.774 -58.510 -32.184  1.00 52.92           C
ATOM    828  O   LEU A 110      -4.604 -58.243 -33.049  1.00 53.17           O
ATOM    829  CB  LEU A 110      -4.511 -59.929 -30.260  1.00 51.18           C
ATOM    830  CG  LEU A 110      -4.755 -60.060 -28.757  1.00 48.98           C
ATOM    831  CD1 LEU A 110      -5.420 -61.387 -28.436  1.00 44.62           C
ATOM    832  CD2 LEU A 110      -3.450 -59.893 -27.977  1.00 48.55           C
ATOM    833  N   GLY A 111      -2.519 -58.841 -32.478  1.00 62.43           N
ATOM    834  CA  GLY A 111      -1.974 -58.691 -33.811  1.00 67.01           C
ATOM    835  C   GLY A 111      -1.043 -57.510 -33.990  1.00 75.49           C
ATOM    836  O   GLY A 111      -0.432 -57.381 -35.060  1.00 78.98           O
ATOM    837  N   GLY A 112      -0.925 -56.647 -32.979  1.00 77.90           N
ATOM    838  CA  GLY A 112       0.076 -55.594 -32.928  1.00 79.81           C
ATOM    839  C   GLY A 112      -0.271 -54.287 -33.616  1.00 86.31           C
ATOM    840  O   GLY A 112      -0.520 -53.280 -32.941  1.00 87.50           O
ATOM    841  N   SER A 113      -0.269 -54.268 -34.948  1.00 86.29           N
ATOM    842  CA  SER A 113      -0.476 -53.030 -35.689  1.00 89.36           C
ATOM    843  C   SER A 113      -1.307 -53.318 -36.937  1.00 88.65           C
```

[2203]

```
ATOM    844  O   SER A 113      -1.732 -54.453 -37.185  1.00 86.28           O
ATOM    845  CB  SER A 113       0.861 -52.350 -36.028  1.00 92.58           C
ATOM    846  OG  SER A 113       1.768 -53.241 -36.660  1.00 94.96           O
ATOM    847  N   GLY A 114      -1.540 -52.266 -37.722  1.00 87.43           N
ATOM    848  CA  GLY A 114      -2.404 -52.331 -38.885  1.00 86.60           C
ATOM    849  C   GLY A 114      -3.456 -51.240 -38.848  1.00 85.72           C
ATOM    850  O   GLY A 114      -4.602 -51.445 -39.265  1.00 81.48           O
ATOM    851  N   GLY A 115      -3.072 -50.080 -38.334  1.00 82.25           N
ATOM    852  CA  GLY A 115      -3.999 -48.989 -38.122  1.00 83.55           C
ATOM    853  C   GLY A 115      -3.417 -48.016 -37.114  1.00 87.49           C
ATOM    854  O   GLY A 115      -2.265 -48.146 -36.694  1.00 86.68           O
ATOM    855  N   SER A 116      -4.243 -47.039 -36.729  1.00 82.24           N
ATOM    856  CA  SER A 116      -3.794 -46.052 -35.752  1.00 81.90           C
ATOM    857  C   SER A 116      -4.938 -45.403 -34.968  1.00 77.45           C
ATOM    858  O   SER A 116      -5.300 -45.875 -33.884  1.00 70.72           O
ATOM    859  CB  SER A 116      -2.943 -44.984 -36.453  1.00 82.30           C
ATOM    860  OG  SER A 116      -3.703 -44.237 -37.387  1.00 80.33           O
ATOM    861  N   GLY A 117      -5.508 -44.319 -35.499  1.00 75.45           N
ATOM    862  CA  GLY A 117      -6.491 -43.556 -34.751  1.00 68.49           C
ATOM    863  C   GLY A 117      -6.356 -42.049 -34.894  1.00 73.67           C
ATOM    864  O   GLY A 117      -7.078 -41.432 -35.688  1.00 75.18           O
ATOM    865  N   GLY A 118      -5.459 -41.445 -34.111  1.00 69.03           N
ATOM    866  CA  GLY A 118      -5.290 -40.007 -34.065  1.00 61.62           C
ATOM    867  C   GLY A 118      -6.080 -39.369 -32.930  1.00 64.05           C
ATOM    868  O   GLY A 118      -7.025 -39.942 -32.385  1.00 61.22           O
ATOM    869  N   CYS A 119      -5.660 -38.091 -32.542  1.00 60.00           N
ATOM    870  CA  CYS A 119      -6.410 -37.530 -31.424  1.00 56.53           C
ATOM    871  C   CYS A 119      -7.647 -36.773 -31.908  1.00 55.11           C
ATOM    872  O   CYS A 119      -7.680 -36.280 -33.035  1.00 57.15           O
ATOM    873  CB  CYS A 119      -5.527 -36.570 -30.603  1.00 56.02           C
ATOM    874  SG  CYS A 119      -4.104 -37.295 -29.706  1.00 58.55           S
ATOM    875  N   PRO A 120      -8.665 -36.661 -31.055  1.00 57.41           N
ATOM    876  CA  PRO A 120      -9.829 -35.814 -31.360  1.00 57.06           C
ATOM    877  C   PRO A 120      -9.466 -34.343 -31.285  1.00 59.04           C
ATOM    878  O   PRO A 120      -8.354 -33.992 -30.866  1.00 62.27           O
ATOM    879  CB  PRO A 120     -10.833 -36.176 -30.252  1.00 54.12           C
ATOM    880  CG  PRO A 120     -10.290 -37.398 -29.588  1.00 50.91           C
ATOM    881  CD  PRO A 120      -8.817 -37.352 -29.763  1.00 52.80           C
ATOM    882  N   PRO A 121     -10.369 -33.449 -31.678  1.00 61.45           N
ATOM    883  CA  PRO A 121     -10.150 -32.018 -31.457  1.00 57.31           C
ATOM    884  C   PRO A 121     -10.595 -31.556 -30.071  1.00 62.45           C
ATOM    885  O   PRO A 121     -11.363 -32.223 -29.377  1.00 63.77           O
ATOM    886  CB  PRO A 121     -11.022 -31.369 -32.539  1.00 64.05           C
ATOM    887  CG  PRO A 121     -12.146 -32.359 -32.742  1.00 65.72           C
ATOM    888  CD  PRO A 121     -11.516 -33.715 -32.572  1.00 58.27           C
ATOM    889  N   CYS A 122     -10.123 -30.362 -29.701  1.00 62.74           N
ATOM    890  CA  CYS A 122     -10.524 -29.742 -28.443  1.00 56.95           C
ATOM    891  C   CYS A 122     -11.950 -29.215 -28.550  1.00 65.68           C
ATOM    892  O   CYS A 122     -12.274 -28.449 -29.463  1.00 70.91           O
ATOM    893  CB  CYS A 122      -9.585 -28.593 -28.085  1.00 58.77           C
ATOM    894  SG  CYS A 122      -7.811 -28.983 -28.169  1.00 72.13           S
ATOM    895  N   GLY A 123     -12.803 -29.612 -27.608  1.00 62.96           N
ATOM    896  CA  GLY A 123     -14.226 -29.343 -27.692  1.00 59.27           C
ATOM    897  C   GLY A 123     -15.062 -30.493 -28.221  1.00 58.64           C
ATOM    898  O   GLY A 123     -16.289 -30.351 -28.320  1.00 61.23           O
ATOM    899  N   SER A 124     -14.440 -31.621 -28.571  1.00 59.85           N
ATOM    900  CA  SER A 124     -15.114 -32.841 -29.012  1.00 61.09           C
ATOM    901  C   SER A 124     -15.829 -32.697 -30.351  1.00 63.81           C
ATOM    902  O   SER A 124     -16.627 -33.577 -30.706  1.00 68.39           O
ATOM    903  CB  SER A 124     -16.099 -33.368 -27.958  1.00 50.10           C
ATOM    904  OG  SER A 124     -15.437 -33.643 -26.733  1.00 44.47           O
ATOM    905  N   GLY A 125     -15.602 -31.617 -31.089  1.00 66.43           N
ATOM    906  CA  GLY A 125     -16.072 -31.512 -32.457  1.00 70.97           C
ATOM    907  C   GLY A 125     -17.182 -30.484 -32.634  1.00 74.21           C
ATOM    908  O   GLY A 125     -17.712 -29.905 -31.683  1.00 66.79           O
ATOM    909  N   GLY A 126     -17.529 -30.284 -33.909  1.00 74.69           N
ATOM    910  CA  GLY A 126     -18.564 -29.328 -34.273  1.00 71.28           C
ATOM    911  C   GLY A 126     -18.124 -27.894 -34.043  1.00 70.64           C
```

[2204]

```
ATOM    912  O   GLY A 126     -16.976 -27.509 -34.298  1.00 66.78           O
ATOM    913  N   GLU A 127     -19.067 -27.078 -33.588  1.00 65.87           N
ATOM    914  CA  GLU A 127     -18.809 -25.681 -33.278  1.00 62.96           C
ATOM    915  C   GLU A 127     -18.530 -25.468 -31.794  1.00 57.16           C
ATOM    916  O   GLU A 127     -18.266 -24.333 -31.379  1.00 56.12           O
ATOM    917  CB  GLU A 127     -19.990 -24.808 -33.729  1.00 64.12           C
ATOM    918  N   VAL A 128     -18.607 -26.525 -30.985  1.00 53.26           N
ATOM    919  CA  VAL A 128     -18.417 -26.397 -29.546  1.00 48.11           C
ATOM    920  C   VAL A 128     -16.939 -26.185 -29.251  1.00 50.64           C
ATOM    921  O   VAL A 128     -16.090 -27.013 -29.603  1.00 52.72           O
ATOM    922  CB  VAL A 128     -18.955 -27.630 -28.813  1.00 48.70           C
ATOM    923  CG1 VAL A 128     -18.619 -27.549 -27.342  1.00 45.08           C
ATOM    924  CG2 VAL A 128     -20.453 -27.749 -29.017  1.00 40.83           C
ATOM    925  N   GLN A 129     -16.624 -25.076 -28.589  1.00 42.29           N
ATOM    926  CA  GLN A 129     -15.252 -24.774 -28.238  1.00 41.18           C
ATOM    927  C   GLN A 129     -15.179 -24.539 -26.742  1.00 39.65           C
ATOM    928  O   GLN A 129     -16.008 -23.813 -26.178  1.00 39.25           O
ATOM    929  CB  GLN A 129     -14.726 -23.560 -29.031  1.00 39.51           C
ATOM    930  N   LEU A 130     -14.210 -25.194 -26.105  1.00 40.45           N
ATOM    931  CA  LEU A 130     -13.943 -25.075 -24.675  1.00 37.62           C
ATOM    932  C   LEU A 130     -12.439 -24.916 -24.527  1.00 39.70           C
ATOM    933  O   LEU A 130     -11.693 -25.867 -24.782  1.00 45.26           O
ATOM    934  CB  LEU A 130     -14.435 -26.310 -23.919  1.00 34.94           C
ATOM    935  CG  LEU A 130     -15.928 -26.637 -24.011  1.00 39.68           C
ATOM    936  CD1 LEU A 130     -16.202 -28.014 -23.399  1.00 32.37           C
ATOM    937  CD2 LEU A 130     -16.744 -25.557 -23.291  1.00 33.53           C
ATOM    938  N   LEU A 131     -11.989 -23.731 -24.108  1.00 39.85           N
ATOM    939  CA  LEU A 131     -10.562 -23.424 -24.034  1.00 36.29           C
ATOM    940  C   LEU A 131     -10.209 -23.117 -22.586  1.00 34.08           C
ATOM    941  O   LEU A 131     -10.595 -22.067 -22.058  1.00 35.70           O
ATOM    942  CB  LEU A 131     -10.218 -22.253 -24.948  1.00 41.88           C
ATOM    943  CG  LEU A 131     -10.879 -22.360 -26.329  1.00 49.45           C
ATOM    944  CD1 LEU A 131     -10.782 -21.046 -27.109  1.00 50.99           C
ATOM    945  CD2 LEU A 131     -10.274 -23.511 -27.127  1.00 48.98           C
ATOM    946  N   GLU A 132      -9.495 -24.041 -21.949  1.00 33.83           N
ATOM    947  CA  GLU A 132      -9.065 -23.887 -20.568  1.00 36.62           C
ATOM    948  C   GLU A 132      -7.808 -23.038 -20.491  1.00 38.59           C
ATOM    949  O   GLU A 132      -7.011 -22.995 -21.427  1.00 39.64           O
ATOM    950  CB  GLU A 132      -8.761 -25.241 -19.922  1.00 35.13           C
ATOM    951  CG  GLU A 132      -9.936 -26.197 -19.818  1.00 38.08           C
ATOM    952  CD  GLU A 132      -9.998 -27.193 -20.965  1.00 37.37           C
ATOM    953  OE1 GLU A 132      -9.425 -26.925 -22.046  1.00 37.65           O
ATOM    954  OE2 GLU A 132     -10.631 -28.249 -20.778  1.00 36.74           O
ATOM    955  N   SER A 133      -7.625 -22.376 -19.352  1.00 36.81           N
ATOM    956  CA  SER A 133      -6.379 -21.681 -19.075  1.00 37.85           C
ATOM    957  C   SER A 133      -6.297 -21.410 -17.581  1.00 35.69           C
ATOM    958  O   SER A 133      -7.277 -21.561 -16.839  1.00 36.18           O
ATOM    959  CB  SER A 133      -6.268 -20.376 -19.865  1.00 43.87           C
ATOM    960  OG  SER A 133      -7.175 -19.425 -19.352  1.00 46.85           O
ATOM    961  N   GLY A 134      -5.114 -20.971 -17.162  1.00 33.07           N
ATOM    962  CA  GLY A 134      -4.820 -20.664 -15.779  1.00 35.50           C
ATOM    963  C   GLY A 134      -3.905 -21.653 -15.098  1.00 31.92           C
ATOM    964  O   GLY A 134      -3.424 -21.364 -13.997  1.00 36.69           O
ATOM    965  N   GLY A 135      -3.617 -22.791 -15.721  1.00 36.88           N
ATOM    966  CA  GLY A 135      -2.750 -23.771 -15.088  1.00 39.38           C
ATOM    967  C   GLY A 135      -1.332 -23.256 -14.935  1.00 35.92           C
ATOM    968  O   GLY A 135      -0.882 -22.386 -15.675  1.00 38.94           O
ATOM    969  N   GLY A 136      -0.638 -23.792 -13.935  1.00 37.35           N
ATOM    970  CA  GLY A 136       0.739 -23.421 -13.661  1.00 40.94           C
ATOM    971  C   GLY A 136       1.267 -24.204 -12.477  1.00 40.88           C
ATOM    972  O   GLY A 136       0.589 -25.083 -11.931  1.00 38.19           O
ATOM    973  N   LEU A 137       2.497 -23.860 -12.081  1.00 40.65           N
ATOM    974  CA  LEU A 137       3.178 -24.466 -10.936  1.00 36.08           C
ATOM    975  C   LEU A 137       2.930 -23.663  -9.670  1.00 35.99           C
ATOM    976  O   LEU A 137       2.997 -22.436  -9.673  1.00 38.32           O
ATOM    977  CB  LEU A 137       4.688 -24.549 -11.166  1.00 36.15           C
ATOM    978  CG  LEU A 137       5.493 -25.161 -10.007  1.00 40.05           C
ATOM    979  CD1 LEU A 137       5.232 -26.659  -9.828  1.00 35.37           C
```

[2205]

```
ATOM    980  CD2 LEU A 137       6.996 -24.909 -10.163  1.00 47.36           C
ATOM    981  N   VAL A 138       2.656 -24.361  -8.579  1.00 37.87           N
ATOM    982  CA  VAL A 138       2.272 -23.705  -7.340  1.00 38.53           C
ATOM    983  C   VAL A 138       2.824 -24.507  -6.172  1.00 40.10           C
ATOM    984  O   VAL A 138       3.103 -25.705  -6.282  1.00 37.23           O
ATOM    985  CB  VAL A 138       0.733 -23.541  -7.246  1.00 38.82           C
ATOM    986  CG1 VAL A 138       0.133 -24.541  -6.270  1.00 40.75           C
ATOM    987  CG2 VAL A 138       0.375 -22.121  -6.869  1.00 43.83           C
ATOM    988  N   GLN A 139       3.005 -23.827  -5.055  1.00 41.83           N
ATOM    989  CA  GLN A 139       3.499 -24.471  -3.856  1.00 44.56           C
ATOM    990  C   GLN A 139       2.322 -25.047  -3.080  1.00 43.76           C
ATOM    991  O   GLN A 139       1.195 -24.555  -3.197  1.00 44.38           O
ATOM    992  CB  GLN A 139       4.244 -23.464  -2.979  1.00 50.87           C
ATOM    993  CG  GLN A 139       5.553 -22.942  -3.558  1.00 59.03           C
ATOM    994  CD  GLN A 139       6.737 -23.839  -3.217  1.00 67.84           C
ATOM    995  OE1 GLN A 139       7.176 -24.657  -4.037  1.00 63.00           O
ATOM    996  NE2 GLN A 139       7.260 -23.690  -1.997  1.00 70.73           N
ATOM    997  N   PRO A 140       2.551 -26.093  -2.290  1.00 44.32           N
ATOM    998  CA  PRO A 140       1.483 -26.605  -1.427  1.00 40.72           C
ATOM    999  C   PRO A 140       0.957 -25.507  -0.516  1.00 41.74           C
ATOM   1000  O   PRO A 140       1.714 -24.673  -0.017  1.00 39.65           O
ATOM   1001  CB  PRO A 140       2.171 -27.724  -0.637  1.00 41.28           C
ATOM   1002  CG  PRO A 140       3.329 -28.138  -1.507  1.00 44.93           C
ATOM   1003  CD  PRO A 140       3.792 -26.877  -2.169  1.00 47.18           C
ATOM   1004  N   GLY A 141      -0.365 -25.485  -0.345  1.00 37.41           N
ATOM   1005  CA  GLY A 141      -1.022 -24.387   0.318  1.00 34.43           C
ATOM   1006  C   GLY A 141      -1.306 -23.203  -0.574  1.00 37.74           C
ATOM   1007  O   GLY A 141      -1.977 -22.263  -0.135  1.00 46.99           O
ATOM   1008  N   GLY A 142      -0.827 -23.208  -1.810  1.00 34.37           N
ATOM   1009  CA  GLY A 142      -1.074 -22.106  -2.703  1.00 34.62           C
ATOM   1010  C   GLY A 142      -2.462 -22.144  -3.331  1.00 40.42           C
ATOM   1011  O   GLY A 142      -3.311 -22.989  -3.034  1.00 36.67           O
ATOM   1012  N   SER A 143      -2.673 -21.186  -4.235  1.00 39.11           N
ATOM   1013  CA  SER A 143      -3.943 -20.953  -4.893  1.00 34.82           C
ATOM   1014  C   SER A 143      -3.727 -20.768  -6.383  1.00 40.93           C
ATOM   1015  O   SER A 143      -2.695 -20.247  -6.820  1.00 41.76           O
ATOM   1016  CB  SER A 143      -4.650 -19.705  -4.340  1.00 34.76           C
ATOM   1017  OG  SER A 143      -5.246 -19.979  -3.086  1.00 44.85           O
ATOM   1018  N   LEU A 144      -4.751 -21.141  -7.147  1.00 37.12           N
ATOM   1019  CA  LEU A 144      -4.773 -21.003  -8.592  1.00 38.82           C
ATOM   1020  C   LEU A 144      -6.236 -20.868  -9.008  1.00 37.68           C
ATOM   1021  O   LEU A 144      -7.113 -21.447  -8.370  1.00 39.39           O
ATOM   1022  CB  LEU A 144      -4.110 -22.221  -9.241  1.00 41.30           C
ATOM   1023  CG  LEU A 144      -3.282 -22.133 -10.525  1.00 45.46           C
ATOM   1024  CD1 LEU A 144      -2.172 -21.121 -10.384  1.00 44.69           C
ATOM   1025  CD2 LEU A 144      -2.691 -23.491 -10.819  1.00 42.12           C
ATOM   1026  N   ARG A 145      -6.512 -20.055 -10.023  1.00 38.09           N
ATOM   1027  CA  ARG A 145      -7.855 -19.970 -10.583  1.00 37.03           C
ATOM   1028  C   ARG A 145      -7.798 -20.373 -12.047  1.00 37.36           C
ATOM   1029  O   ARG A 145      -7.101 -19.733 -12.841  1.00 38.62           O
ATOM   1030  CB  ARG A 145      -8.479 -18.574 -10.441  1.00 40.90           C
ATOM   1031  CG  ARG A 145     -10.028 -18.639 -10.604  1.00 42.98           C
ATOM   1032  CD  ARG A 145     -10.735 -17.286 -10.570  1.00 41.86           C
ATOM   1033  NE  ARG A 145     -10.369 -16.491 -11.733  1.00 52.20           N
ATOM   1034  CZ  ARG A 145     -10.969 -15.370 -12.107  1.00 61.51           C
ATOM   1035  NH1 ARG A 145     -12.014 -14.914 -11.423  1.00 66.21           N
ATOM   1036  NH2 ARG A 145     -10.537 -14.721 -13.185  1.00 54.49           N
ATOM   1037  N   LEU A 146      -8.531 -21.425 -12.395  1.00 32.19           N
ATOM   1038  CA  LEU A 146      -8.678 -21.860 -13.778  1.00 33.54           C
ATOM   1039  C   LEU A 146      -9.907 -21.214 -14.399  1.00 33.82           C
ATOM   1040  O   LEU A 146     -10.907 -20.948 -13.727  1.00 33.69           O
ATOM   1041  CB  LEU A 146      -8.827 -23.384 -13.868  1.00 29.73           C
ATOM   1042  CG  LEU A 146      -7.770 -24.248 -13.179  1.00 33.73           C
ATOM   1043  CD1 LEU A 146      -8.008 -25.727 -13.486  1.00 31.49           C
ATOM   1044  CD2 LEU A 146      -6.347 -23.842 -13.541  1.00 24.98           C
ATOM   1045  N   SER A 147      -9.841 -20.994 -15.697  1.00 31.69           N
ATOM   1046  CA  SER A 147     -10.984 -20.479 -16.422  1.00 35.89           C
ATOM   1047  C   SER A 147     -11.205 -21.334 -17.661  1.00 32.40           C
```

[2206]

```
ATOM   1048  O   SER A 147     -10.282 -21.958 -18.182  1.00 32.69           O
ATOM   1049  CB  SER A 147     -10.796 -18.982 -16.789  1.00 28.54           C
ATOM   1050  OG  SER A 147      -9.860 -18.843 -17.827  1.00 42.64           O
ATOM   1051  N   CYS A 148     -12.455 -21.402 -18.098  1.00 33.09           N
ATOM   1052  CA  CYS A 148     -12.814 -22.091 -19.329  1.00 32.59           C
ATOM   1053  C   CYS A 148     -13.695 -21.160 -20.151  1.00 36.84           C
ATOM   1054  O   CYS A 148     -14.781 -20.772 -19.700  1.00 33.91           O
ATOM   1055  CB  CYS A 148     -13.535 -23.407 -19.031  1.00 35.44           C
ATOM   1056  SG  CYS A 148     -14.234 -24.270 -20.485  1.00 41.20           S
ATOM   1057  N   ALA A 149     -13.218 -20.806 -21.341  1.00 33.88           N
ATOM   1058  CA  ALA A 149     -13.924 -19.940 -22.272  1.00 33.70           C
ATOM   1059  C   ALA A 149     -14.673 -20.812 -23.272  1.00 35.87           C
ATOM   1060  O   ALA A 149     -14.066 -21.635 -23.969  1.00 34.47           O
ATOM   1061  CB  ALA A 149     -12.954 -19.006 -22.999  1.00 30.88           C
ATOM   1062  N   ALA A 150     -15.989 -20.641 -23.328  1.00 39.30           N
ATOM   1063  CA  ALA A 150     -16.861 -21.473 -24.145  1.00 39.06           C
ATOM   1064  C   ALA A 150     -17.393 -20.688 -25.337  1.00 38.36           C
ATOM   1065  O   ALA A 150     -17.696 -19.492 -25.227  1.00 38.47           O
ATOM   1066  CB  ALA A 150     -18.022 -22.005 -23.313  1.00 30.62           C
ATOM   1067  N   SER A 151     -17.501 -21.360 -26.479  1.00 36.26           N
ATOM   1068  CA  SER A 151     -18.158 -20.742 -27.623  1.00 40.55           C
ATOM   1069  C   SER A 151     -18.823 -21.818 -28.470  1.00 39.07           C
ATOM   1070  O   SER A 151     -18.470 -22.999 -28.407  1.00 38.21           O
ATOM   1071  CB  SER A 151     -17.168 -19.911 -28.453  1.00 42.64           C
ATOM   1072  OG  SER A 151     -16.172 -20.742 -29.005  1.00 41.26           O
ATOM   1073  N   GLY A 152     -19.804 -21.398 -29.258  1.00 37.62           N
ATOM   1074  CA  GLY A 152     -20.493 -22.308 -30.144  1.00 40.21           C
ATOM   1075  C   GLY A 152     -21.767 -22.913 -29.590  1.00 39.85           C
ATOM   1076  O   GLY A 152     -22.281 -23.870 -30.182  1.00 42.87           O
ATOM   1077  N   PHE A 153     -22.289 -22.403 -28.475  1.00 37.83           N
ATOM   1078  CA  PHE A 153     -23.529 -22.933 -27.919  1.00 39.95           C
ATOM   1079  C   PHE A 153     -24.075 -21.942 -26.906  1.00 38.45           C
ATOM   1080  O   PHE A 153     -23.356 -21.072 -26.411  1.00 42.81           O
ATOM   1081  CB  PHE A 153     -23.326 -24.330 -27.284  1.00 36.70           C
ATOM   1082  CG  PHE A 153     -22.341 -24.356 -26.133  1.00 40.20           C
ATOM   1083  CD1 PHE A 153     -20.963 -24.457 -26.376  1.00 38.24           C
ATOM   1084  CD2 PHE A 153     -22.782 -24.293 -24.813  1.00 30.67           C
ATOM   1085  CE1 PHE A 153     -20.040 -24.482 -25.325  1.00 34.26           C
ATOM   1086  CE2 PHE A 153     -21.870 -24.319 -23.764  1.00 36.36           C
ATOM   1087  CZ  PHE A 153     -20.486 -24.419 -24.025  1.00 31.70           C
ATOM   1088  N   GLY A 154     -25.355 -22.102 -26.585  1.00 37.21           N
ATOM   1089  CA  GLY A 154     -25.965 -21.286 -25.561  1.00 39.99           C
ATOM   1090  C   GLY A 154     -25.463 -21.674 -24.185  1.00 37.58           C
ATOM   1091  O   GLY A 154     -25.981 -22.605 -23.571  1.00 37.42           O
ATOM   1092  N   PHE A 155     -24.451 -20.939 -23.701  1.00 41.56           N
ATOM   1093  CA  PHE A 155     -23.674 -21.340 -22.527  1.00 35.40           C
ATOM   1094  C   PHE A 155     -24.531 -21.451 -21.269  1.00 34.35           C
ATOM   1095  O   PHE A 155     -24.359 -22.383 -20.480  1.00 34.90           O
ATOM   1096  CB  PHE A 155     -22.537 -20.347 -22.335  1.00 36.04           C
ATOM   1097  CG  PHE A 155     -21.661 -20.616 -21.150  1.00 36.12           C
ATOM   1098  CD1 PHE A 155     -20.745 -21.657 -21.170  1.00 36.22           C
ATOM   1099  CD2 PHE A 155     -21.698 -19.780 -20.041  1.00 34.40           C
ATOM   1100  CE1 PHE A 155     -19.888 -21.868 -20.100  1.00 34.51           C
ATOM   1101  CE2 PHE A 155     -20.853 -19.985 -18.960  1.00 36.51           C
ATOM   1102  CZ  PHE A 155     -19.939 -21.029 -18.986  1.00 34.83           C
ATOM   1103  N   SER A 156     -25.452 -20.512 -21.048  1.00 33.56           N
ATOM   1104  CA  SER A 156     -26.246 -20.562 -19.828  1.00 33.54           C
ATOM   1105  C   SER A 156     -27.271 -21.694 -19.823  1.00 31.11           C
ATOM   1106  O   SER A 156     -27.867 -21.959 -18.777  1.00 30.03           O
ATOM   1107  CB  SER A 156     -26.947 -19.222 -19.610  1.00 37.56           C
ATOM   1108  OG  SER A 156     -27.821 -18.941 -20.689  1.00 46.42           O
ATOM   1109  N   SER A 157     -27.464 -22.388 -20.936  1.00 33.22           N
ATOM   1110  CA  SER A 157     -28.351 -23.546 -20.999  1.00 36.82           C
ATOM   1111  C   SER A 157     -27.656 -24.870 -20.682  1.00 34.14           C
ATOM   1112  O   SER A 157     -28.255 -25.926 -20.898  1.00 29.70           O
ATOM   1113  CB  SER A 157     -28.978 -23.660 -22.383  1.00 34.73           C
ATOM   1114  OG  SER A 157     -29.841 -22.584 -22.584  1.00 47.60           O
ATOM   1115  N   TYR A 158     -26.396 -24.857 -20.262  1.00 29.76           N
```

[2207]

```
ATOM   1116  CA  TYR A 158     -25.662 -26.108 -20.111  1.00 30.58           C
ATOM   1117  C   TYR A 158     -24.997 -26.201 -18.749  1.00 30.80           C
ATOM   1118  O   TYR A 158     -24.198 -25.332 -18.373  1.00 34.69           O
ATOM   1119  CB  TYR A 158     -24.623 -26.276 -21.217  1.00 27.94           C
ATOM   1120  CG  TYR A 158     -25.246 -26.719 -22.516  1.00 31.59           C
ATOM   1121  CD1 TYR A 158     -25.426 -28.073 -22.804  1.00 31.74           C
ATOM   1122  CD2 TYR A 158     -25.673 -25.787 -23.447  1.00 29.19           C
ATOM   1123  CE1 TYR A 158     -26.012 -28.480 -23.993  1.00 32.24           C
ATOM   1124  CE2 TYR A 158     -26.251 -26.174 -24.630  1.00 29.65           C
ATOM   1125  CZ  TYR A 158     -26.427 -27.515 -24.903  1.00 35.93           C
ATOM   1126  OH  TYR A 158     -27.006 -27.891 -26.092  1.00 34.40           O
ATOM   1127  N   ALA A 159     -25.312 -27.265 -18.025  1.00 29.67           N
ATOM   1128  CA  ALA A 159     -24.480 -27.653 -16.899  1.00 32.29           C
ATOM   1129  C   ALA A 159     -23.061 -27.896 -17.400  1.00 31.80           C
ATOM   1130  O   ALA A 159     -22.849 -28.281 -18.557  1.00 29.60           O
ATOM   1131  CB  ALA A 159     -25.037 -28.904 -16.225  1.00 28.83           C
ATOM   1132  N   MET A 160     -22.086 -27.570 -16.547  1.00 29.52           N
ATOM   1133  CA  MET A 160     -20.669 -27.679 -16.870  1.00 31.83           C
ATOM   1134  C   MET A 160     -19.953 -28.392 -15.727  1.00 33.23           C
ATOM   1135  O   MET A 160     -20.441 -28.429 -14.596  1.00 33.52           O
ATOM   1136  CB  MET A 160     -20.031 -26.300 -17.086  1.00 32.56           C
ATOM   1137  CG  MET A 160     -20.703 -25.392 -18.124  1.00 29.52           C
ATOM   1138  SD  MET A 160     -20.455 -25.913 -19.829  1.00 33.25           S
ATOM   1139  CE  MET A 160     -18.653 -25.877 -19.955  1.00 33.06           C
ATOM   1140  N   SER A 161     -18.765 -28.921 -16.012  1.00 27.53           N
ATOM   1141  CA  SER A 161     -18.041 -29.634 -14.975  1.00 32.71           C
ATOM   1142  C   SER A 161     -16.535 -29.530 -15.203  1.00 31.42           C
ATOM   1143  O   SER A 161     -16.060 -29.139 -16.274  1.00 29.87           O
ATOM   1144  CB  SER A 161     -18.490 -31.102 -14.894  1.00 31.25           C
ATOM   1145  OG  SER A 161     -18.164 -31.784 -16.085  1.00 38.48           O
ATOM   1146  N   TRP A 162     -15.792 -29.853 -14.154  1.00 27.11           N
ATOM   1147  CA  TRP A 162     -14.342 -29.966 -14.211  1.00 28.95           C
ATOM   1148  C   TRP A 162     -13.982 -31.405 -13.899  1.00 25.97           C
ATOM   1149  O   TRP A 162     -14.524 -31.987 -12.956  1.00 28.28           O
ATOM   1150  CB  TRP A 162     -13.673 -29.028 -13.212  1.00 27.30           C
ATOM   1151  CG  TRP A 162     -13.750 -27.581 -13.568  1.00 28.59           C
ATOM   1152  CD1 TRP A 162     -14.626 -26.651 -13.072  1.00 30.18           C
ATOM   1153  CD2 TRP A 162     -12.887 -26.880 -14.463  1.00 28.53           C
ATOM   1154  NE1 TRP A 162     -14.364 -25.414 -13.614  1.00 28.36           N
ATOM   1155  CE2 TRP A 162     -13.303 -25.530 -14.476  1.00 32.72           C
ATOM   1156  CE3 TRP A 162     -11.798 -27.263 -15.262  1.00 28.86           C
ATOM   1157  CZ2 TRP A 162     -12.674 -24.568 -15.256  1.00 30.67           C
ATOM   1158  CZ3 TRP A 162     -11.187 -26.311 -16.037  1.00 30.68           C
ATOM   1159  CH2 TRP A 162     -11.620 -24.975 -16.028  1.00 29.38           C
ATOM   1160  N   VAL A 163     -13.123 -31.987 -14.728  1.00 25.27           N
ATOM   1161  CA  VAL A 163     -12.610 -33.338 -14.555  1.00 27.01           C
ATOM   1162  C   VAL A 163     -11.100 -33.242 -14.697  1.00 28.66           C
ATOM   1163  O   VAL A 163     -10.604 -32.446 -15.501  1.00 30.98           O
ATOM   1164  CB  VAL A 163     -13.190 -34.323 -15.596  1.00 28.95           C
ATOM   1165  CG1 VAL A 163     -12.608 -35.746 -15.406  1.00 25.62           C
ATOM   1166  CG2 VAL A 163     -14.756 -34.323 -15.555  1.00 25.01           C
ATOM   1167  N   ARG A 164     -10.365 -34.019 -13.906  1.00 27.57           N
ATOM   1168  CA  ARG A 164      -8.904 -33.945 -13.933  1.00 28.24           C
ATOM   1169  C   ARG A 164      -8.303 -35.330 -14.150  1.00 32.03           C
ATOM   1170  O   ARG A 164      -8.939 -36.359 -13.900  1.00 28.95           O
ATOM   1171  CB  ARG A 164      -8.358 -33.339 -12.646  1.00 22.52           C
ATOM   1172  CG  ARG A 164      -8.480 -34.265 -11.443  1.00 30.57           C
ATOM   1173  CD  ARG A 164      -7.975 -33.568 -10.183  1.00 30.85           C
ATOM   1174  NE  ARG A 164      -8.194 -34.366  -8.982  1.00 33.72           N
ATOM   1175  CZ  ARG A 164      -8.006 -33.927  -7.741  1.00 30.29           C
ATOM   1176  NH1 ARG A 164      -7.603 -32.686  -7.520  1.00 27.87           N
ATOM   1177  NH2 ARG A 164      -8.230 -34.736  -6.721  1.00 32.67           N
ATOM   1178  N   GLN A 165      -7.069 -35.338 -14.658  1.00 32.10           N
ATOM   1179  CA  GLN A 165      -6.356 -36.582 -14.942  1.00 31.03           C
ATOM   1180  C   GLN A 165      -4.863 -36.364 -14.734  1.00 31.39           C
ATOM   1181  O   GLN A 165      -4.250 -35.592 -15.478  1.00 29.26           O
ATOM   1182  CB  GLN A 165      -6.628 -37.060 -16.359  1.00 31.90           C
ATOM   1183  CG  GLN A 165      -5.991 -38.408 -16.691  1.00 32.27           C
```

[2208]

```
ATOM   1184  CD  GLN A 165      -6.486 -38.961 -18.025  1.00 33.06           C
ATOM   1185  OE1 GLN A 165      -6.672 -38.211 -18.977  1.00 31.94           O
ATOM   1186  NE2 GLN A 165      -6.707 -40.272 -18.091  1.00 29.42           N
ATOM   1187  N   ALA A 166      -4.281 -36.999 -13.720  1.00 34.36           N
ATOM   1188  CA  ALA A 166      -2.824 -36.973 -13.622  1.00 37.04           C
ATOM   1189  C   ALA A 166      -2.220 -37.815 -14.744  1.00 36.83           C
ATOM   1190  O   ALA A 166      -2.688 -38.927 -15.000  1.00 35.99           O
ATOM   1191  CB  ALA A 166      -2.345 -37.508 -12.274  1.00 36.61           C
ATOM   1192  N   PRO A 167      -1.160 -37.331 -15.390  1.00 39.36           N
ATOM   1193  CA  PRO A 167      -0.527 -38.082 -16.483  1.00 38.31           C
ATOM   1194  C   PRO A 167      -0.264 -39.531 -16.114  1.00 37.98           C
ATOM   1195  O   PRO A 167       0.340 -39.832 -15.084  1.00 41.47           O
ATOM   1196  CB  PRO A 167       0.772 -37.309 -16.724  1.00 41.84           C
ATOM   1197  CG  PRO A 167       0.393 -35.910 -16.409  1.00 41.61           C
ATOM   1198  CD  PRO A 167      -0.582 -35.985 -15.244  1.00 35.80           C
ATOM   1199  N   GLY A 168      -0.741 -40.437 -16.962  1.00 38.17           N
ATOM   1200  CA  GLY A 168      -0.626 -41.852 -16.690  1.00 34.94           C
ATOM   1201  C   GLY A 168      -1.646 -42.426 -15.722  1.00 40.25           C
ATOM   1202  O   GLY A 168      -1.541 -43.612 -15.379  1.00 43.17           O
ATOM   1203  N   LYS A 169      -2.610 -41.638 -15.247  1.00 29.62           N
ATOM   1204  CA  LYS A 169      -3.612 -42.148 -14.314  1.00 35.21           C
ATOM   1205  C   LYS A 169      -5.016 -41.981 -14.920  1.00 33.16           C
ATOM   1206  O   LYS A 169      -5.173 -41.645 -16.104  1.00 34.21           O
ATOM   1207  CB  LYS A 169      -3.433 -41.491 -12.947  1.00 37.16           C
ATOM   1208  CG  LYS A 169      -2.172 -41.996 -12.259  1.00 43.05           C
ATOM   1209  CD  LYS A 169      -1.782 -41.206 -11.016  1.00 36.94           C
ATOM   1210  CE  LYS A 169      -2.583 -41.634  -9.806  1.00 44.42           C
ATOM   1211  NZ  LYS A 169      -1.868 -41.218  -8.558  1.00 50.38           N
ATOM   1212  N   GLY A 170      -6.050 -42.256 -14.114  1.00 32.61           N
ATOM   1213  CA  GLY A 170      -7.410 -42.256 -14.622  1.00 30.69           C
ATOM   1214  C   GLY A 170      -8.125 -40.902 -14.556  1.00 32.62           C
ATOM   1215  O   GLY A 170      -7.619 -39.919 -14.034  1.00 32.24           O
ATOM   1216  N   LEU A 171      -9.326 -40.866 -15.140  1.00 30.34           N
ATOM   1217  CA  LEU A 171     -10.206 -39.709 -14.995  1.00 30.48           C
ATOM   1218  C   LEU A 171     -10.779 -39.626 -13.584  1.00 29.13           C
ATOM   1219  O   LEU A 171     -11.175 -40.638 -13.002  1.00 27.13           O
ATOM   1220  CB  LEU A 171     -11.351 -39.773 -16.012  1.00 26.75           C
ATOM   1221  CG  LEU A 171     -10.878 -39.694 -17.464  1.00 31.59           C
ATOM   1222  CD1 LEU A 171     -12.035 -39.926 -18.446  1.00 29.06           C
ATOM   1223  CD2 LEU A 171     -10.210 -38.344 -17.706  1.00 29.12           C
ATOM   1224  N   GLU A 172     -10.811 -38.410 -13.033  1.00 29.33           N
ATOM   1225  CA  GLU A 172     -11.392 -38.159 -11.717  1.00 29.42           C
ATOM   1226  C   GLU A 172     -12.254 -36.911 -11.788  1.00 30.06           C
ATOM   1227  O   GLU A 172     -11.743 -35.813 -12.028  1.00 29.98           O
ATOM   1228  CB  GLU A 172     -10.318 -38.003 -10.630  1.00 30.18           C
ATOM   1229  CG  GLU A 172     -10.891 -37.673  -9.244  1.00 35.20           C
ATOM   1230  CD  GLU A 172      -9.817 -37.459  -8.148  1.00 39.17           C
ATOM   1231  OE1 GLU A 172      -8.730 -36.923  -8.435  1.00 39.02           O
ATOM   1232  OE2 GLU A 172     -10.064 -37.840  -6.987  1.00 40.40           O
ATOM   1233  N   TRP A 173     -13.555 -37.079 -11.561  1.00 27.72           N
ATOM   1234  CA  TRP A 173     -14.467 -35.940 -11.510  1.00 28.15           C
ATOM   1235  C   TRP A 173     -14.133 -35.009 -10.352  1.00 26.40           C
ATOM   1236  O   TRP A 173     -13.889 -35.454  -9.229  1.00 27.17           O
ATOM   1237  CB  TRP A 173     -15.901 -36.436 -11.367  1.00 31.92           C
ATOM   1238  CG  TRP A 173     -16.921 -35.351 -11.258  1.00 28.49           C
ATOM   1239  CD1 TRP A 173     -17.368 -34.543 -12.249  1.00 29.82           C
ATOM   1240  CD2 TRP A 173     -17.608 -34.961 -10.074  1.00 27.31           C
ATOM   1241  NE1 TRP A 173     -18.321 -33.678 -11.766  1.00 30.97           N
ATOM   1242  CE2 TRP A 173     -18.494 -33.924 -10.430  1.00 31.74           C
ATOM   1243  CE3 TRP A 173     -17.595 -35.421  -8.750  1.00 28.75           C
ATOM   1244  CZ2 TRP A 173     -19.346 -33.323  -9.512  1.00 29.67           C
ATOM   1245  CZ3 TRP A 173     -18.427 -34.825  -7.839  1.00 29.73           C
ATOM   1246  CH2 TRP A 173     -19.301 -33.782  -8.225  1.00 31.37           C
ATOM   1247  N   VAL A 174     -14.147 -33.703 -10.632  1.00 26.25           N
ATOM   1248  CA  VAL A 174     -13.816 -32.668  -9.650  1.00 27.31           C
ATOM   1249  C   VAL A 174     -15.061 -31.928  -9.164  1.00 29.54           C
ATOM   1250  O   VAL A 174     -15.327 -31.862  -7.963  1.00 27.00           O
ATOM   1251  CB  VAL A 174     -12.786 -31.672 -10.227  1.00 27.12           C
```

[2209]

```
ATOM   1252  CG1 VAL A 174     -12.472 -30.595  -9.183  1.00 30.49           C
ATOM   1253  CG2 VAL A 174     -11.538 -32.382 -10.652  1.00 26.34           C
ATOM   1254  N   SER A 175     -15.823 -31.343 -10.082  1.00 30.94           N
ATOM   1255  CA  SER A 175     -16.824 -30.368  -9.686  1.00 30.88           C
ATOM   1256  C   SER A 175     -17.809 -30.178 -10.830  1.00 29.70           C
ATOM   1257  O   SER A 175     -17.487 -30.434 -11.990  1.00 29.35           O
ATOM   1258  CB  SER A 175     -16.146 -29.041  -9.301  1.00 27.77           C
ATOM   1259  OG  SER A 175     -17.047 -28.203  -8.591  1.00 37.92           O
ATOM   1260  N   ALA A 176     -19.003 -29.692 -10.494  1.00 29.75           N
ATOM   1261  CA  ALA A 176     -20.044 -29.450 -11.489  1.00 27.92           C
ATOM   1262  C   ALA A 176     -20.903 -28.281 -11.038  1.00 30.66           C
ATOM   1263  O   ALA A 176     -20.964 -27.956  -9.849  1.00 33.16           O
ATOM   1264  CB  ALA A 176     -20.925 -30.686 -11.727  1.00 25.02           C
ATOM   1265  N   ILE A 177     -21.545 -27.631 -12.010  1.00 29.45           N
ATOM   1266  CA  ILE A 177     -22.402 -26.472 -11.748  1.00 29.07           C
ATOM   1267  C   ILE A 177     -23.518 -26.445 -12.788  1.00 29.45           C
ATOM   1268  O   ILE A 177     -23.294 -26.737 -13.969  1.00 28.96           O
ATOM   1269  CB  ILE A 177     -21.585 -25.158 -11.757  1.00 30.08           C
ATOM   1270  CG1 ILE A 177     -22.468 -23.961 -11.409  1.00 31.46           C
ATOM   1271  CG2 ILE A 177     -20.883 -24.937 -13.120  1.00 26.60           C
ATOM   1272  CD1 ILE A 177     -21.671 -22.686 -11.098  1.00 32.17           C
ATOM   1273  N   SER A 178     -24.721 -26.079 -12.345  1.00 31.07           N
ATOM   1274  CA  SER A 178     -25.875 -25.986 -13.232  1.00 32.04           C
ATOM   1275  C   SER A 178     -25.753 -24.795 -14.177  1.00 31.32           C
ATOM   1276  O   SER A 178     -24.933 -23.894 -13.992  1.00 33.51           O
ATOM   1277  CB  SER A 178     -27.165 -25.867 -12.427  1.00 33.58           C
ATOM   1278  OG  SER A 178     -27.197 -24.641 -11.723  1.00 32.45           O
ATOM   1279  N   GLY A 179     -26.593 -24.802 -15.214  1.00 30.49           N
ATOM   1280  CA  GLY A 179     -26.545 -23.733 -16.204  1.00 34.14           C
ATOM   1281  C   GLY A 179     -26.699 -22.347 -15.593  1.00 36.93           C
ATOM   1282  O   GLY A 179     -25.980 -21.412 -15.961  1.00 33.56           O
ATOM   1283  N   SER A 180     -27.611 -22.204 -14.627  1.00 29.02           N
ATOM   1284  CA  SER A 180     -27.833 -20.912 -13.987  1.00 32.79           C
ATOM   1285  C   SER A 180     -26.798 -20.584 -12.922  1.00 31.48           C
ATOM   1286  O   SER A 180     -26.731 -19.435 -12.483  1.00 37.89           O
ATOM   1287  CB  SER A 180     -29.225 -20.869 -13.342  1.00 34.51           C
ATOM   1288  OG  SER A 180     -29.318 -21.838 -12.302  1.00 40.23           O
ATOM   1289  N   GLY A 181     -25.999 -21.552 -12.483  1.00 35.92           N
ATOM   1290  CA  GLY A 181     -25.072 -21.315 -11.400  1.00 30.44           C
ATOM   1291  C   GLY A 181     -25.646 -21.479 -10.016  1.00 34.23           C
ATOM   1292  O   GLY A 181     -24.914 -21.287  -9.041  1.00 38.83           O
ATOM   1293  N   GLY A 182     -26.928 -21.846  -9.893  1.00 34.09           N
ATOM   1294  CA  GLY A 182     -27.552 -21.976  -8.587  1.00 32.17           C
ATOM   1295  C   GLY A 182     -27.242 -23.262  -7.847  1.00 34.82           C
ATOM   1296  O   GLY A 182     -27.471 -23.340  -6.636  1.00 37.89           O
ATOM   1297  N   SER A 183     -26.734 -24.276  -8.534  1.00 38.67           N
ATOM   1298  CA  SER A 183     -26.428 -25.559  -7.913  1.00 32.11           C
ATOM   1299  C   SER A 183     -24.990 -25.924  -8.227  1.00 32.40           C
ATOM   1300  O   SER A 183     -24.570 -25.844  -9.384  1.00 32.95           O
ATOM   1301  CB  SER A 183     -27.362 -26.660  -8.408  1.00 31.97           C
ATOM   1302  OG  SER A 183     -28.698 -26.414  -8.003  1.00 38.08           O
ATOM   1303  N   THR A 184     -24.241 -26.319  -7.199  1.00 32.21           N
ATOM   1304  CA  THR A 184     -22.855 -26.732  -7.356  1.00 32.73           C
ATOM   1305  C   THR A 184     -22.653 -28.078  -6.684  1.00 34.19           C
ATOM   1306  O   THR A 184     -23.363 -28.426  -5.737  1.00 34.28           O
ATOM   1307  CB  THR A 184     -21.900 -25.688  -6.769  1.00 33.33           C
ATOM   1308  OG1 THR A 184     -22.222 -25.482  -5.388  1.00 37.32           O
ATOM   1309  CG2 THR A 184     -22.048 -24.363  -7.516  1.00 29.19           C
ATOM   1310  N   TYR A 185     -21.702 -28.848  -7.208  1.00 28.38           N
ATOM   1311  CA  TYR A 185     -21.431 -30.195  -6.726  1.00 30.78           C
ATOM   1312  C   TYR A 185     -19.921 -30.388  -6.692  1.00 30.81           C
ATOM   1313  O   TYR A 185     -19.205 -29.858  -7.544  1.00 29.49           O
ATOM   1314  CB  TYR A 185     -22.073 -31.277  -7.618  1.00 33.29           C
ATOM   1315  CG  TYR A 185     -23.483 -30.954  -8.067  1.00 32.50           C
ATOM   1316  CD1 TYR A 185     -23.704 -30.069  -9.114  1.00 30.77           C
ATOM   1317  CD2 TYR A 185     -24.587 -31.530  -7.444  1.00 33.43           C
ATOM   1318  CE1 TYR A 185     -24.964 -29.744  -9.522  1.00 33.84           C
ATOM   1319  CE2 TYR A 185     -25.869 -31.225  -7.862  1.00 36.42           C
```

[2210]

```
ATOM   1320  CZ  TYR A 185     -26.050 -30.325  -8.902  1.00 34.91           C
ATOM   1321  OH  TYR A 185     -27.309 -29.983  -9.339  1.00 40.84           O
ATOM   1322  N   TYR A 186     -19.446 -31.162  -5.713  1.00 28.84           N
ATOM   1323  CA  TYR A 186     -18.020 -31.295  -5.441  1.00 30.12           C
ATOM   1324  C   TYR A 186     -17.651 -32.725  -5.086  1.00 30.42           C
ATOM   1325  O   TYR A 186     -18.359 -33.385  -4.321  1.00 29.99           O
ATOM   1326  CB  TYR A 186     -17.591 -30.388  -4.281  1.00 29.18           C
ATOM   1327  CG  TYR A 186     -17.701 -28.933  -4.600  1.00 31.21           C
ATOM   1328  CD1 TYR A 186     -16.705 -28.286  -5.324  1.00 29.35           C
ATOM   1329  CD2 TYR A 186     -18.815 -28.196  -4.196  1.00 32.06           C
ATOM   1330  CE1 TYR A 186     -16.815 -26.934  -5.637  1.00 31.66           C
ATOM   1331  CE2 TYR A 186     -18.928 -26.849  -4.503  1.00 31.31           C
ATOM   1332  CZ  TYR A 186     -17.926 -26.229  -5.219  1.00 31.41           C
ATOM   1333  OH  TYR A 186     -18.047 -24.904  -5.515  1.00 33.10           O
ATOM   1334  N   ALA A 187     -16.531 -33.196  -5.632  1.00 28.22           N
ATOM   1335  CA  ALA A 187     -15.930 -34.417  -5.112  1.00 31.24           C
ATOM   1336  C   ALA A 187     -15.478 -34.187  -3.671  1.00 31.83           C
ATOM   1337  O   ALA A 187     -15.007 -33.100  -3.313  1.00 30.23           O
ATOM   1338  CB  ALA A 187     -14.751 -34.846  -5.989  1.00 27.82           C
ATOM   1339  N   ASP A 188     -15.579 -35.238  -2.853  1.00 31.06           N
ATOM   1340  CA  ASP A 188     -15.280 -35.119  -1.423  1.00 36.56           C
ATOM   1341  C   ASP A 188     -13.883 -34.556  -1.138  1.00 35.15           C
ATOM   1342  O   ASP A 188     -13.713 -33.735  -0.230  1.00 35.99           O
ATOM   1343  CB  ASP A 188     -15.448 -36.481  -0.747  1.00 40.58           C
ATOM   1344  CG  ASP A 188     -16.913 -36.898  -0.605  1.00 47.32           C
ATOM   1345  OD1 ASP A 188     -17.808 -36.035  -0.735  1.00 45.51           O
ATOM   1346  OD2 ASP A 188     -17.169 -38.099  -0.352  1.00 49.41           O
ATOM   1347  N   SER A 189     -12.878 -34.962  -1.908  1.00 30.45           N
ATOM   1348  CA  SER A 189     -11.511 -34.558  -1.579  1.00 39.84           C
ATOM   1349  C   SER A 189     -11.227 -33.106  -1.912  1.00 40.55           C
ATOM   1350  O   SER A 189     -10.123 -32.630  -1.627  1.00 41.28           O
ATOM   1351  CB  SER A 189     -10.476 -35.420  -2.299  1.00 39.84           C
ATOM   1352  OG  SER A 189     -10.658 -35.350  -3.699  1.00 45.05           O
ATOM   1353  N   VAL A 190     -12.156 -32.402  -2.549  1.00 34.12           N
ATOM   1354  CA  VAL A 190     -11.926 -31.002  -2.884  1.00 28.28           C
ATOM   1355  C   VAL A 190     -12.884 -30.076  -2.162  1.00 33.56           C
ATOM   1356  O   VAL A 190     -12.745 -28.851  -2.305  1.00 30.21           O
ATOM   1357  CB  VAL A 190     -11.975 -30.756  -4.409  1.00 31.47           C
ATOM   1358  CG1 VAL A 190     -11.010 -31.693  -5.122  1.00 33.48           C
ATOM   1359  CG2 VAL A 190     -13.429 -30.873  -4.999  1.00 31.44           C
ATOM   1360  N   LYS A 191     -13.853 -30.614  -1.405  1.00 28.98           N
ATOM   1361  CA  LYS A 191     -14.813 -29.775  -0.692  1.00 33.17           C
ATOM   1362  C   LYS A 191     -14.083 -28.891   0.297  1.00 36.48           C
ATOM   1363  O   LYS A 191     -13.225 -29.362   1.040  1.00 39.14           O
ATOM   1364  CB  LYS A 191     -15.855 -30.614   0.048  1.00 35.02           C
ATOM   1365  CG  LYS A 191     -16.953 -31.160  -0.824  1.00 35.57           C
ATOM   1366  CD  LYS A 191     -17.969 -31.949  -0.033  1.00 34.77           C
ATOM   1367  CE  LYS A 191     -19.124 -32.367  -0.942  1.00 36.71           C
ATOM   1368  NZ  LYS A 191     -19.922 -33.484  -0.377  1.00 43.62           N
ATOM   1369  N   GLY A 192     -14.421 -27.606   0.310  1.00 38.01           N
ATOM   1370  CA  GLY A 192     -13.790 -26.686   1.216  1.00 37.54           C
ATOM   1371  C   GLY A 192     -12.500 -26.105   0.699  1.00 39.63           C
ATOM   1372  O   GLY A 192     -11.969 -25.172   1.314  1.00 43.10           O
ATOM   1373  N   ARG A 193     -11.981 -26.625  -0.406  1.00 34.25           N
ATOM   1374  CA  ARG A 193     -10.786 -26.082  -1.033  1.00 34.40           C
ATOM   1375  C   ARG A 193     -11.051 -25.487  -2.405  1.00 33.43           C
ATOM   1376  O   ARG A 193     -10.536 -24.411  -2.701  1.00 35.20           O
ATOM   1377  CB  ARG A 193      -9.709 -27.173  -1.138  1.00 30.66           C
ATOM   1378  CG  ARG A 193      -9.476 -27.891   0.198  1.00 34.98           C
ATOM   1379  CD  ARG A 193      -8.222 -28.774   0.205  1.00 34.66           C
ATOM   1380  NE  ARG A 193      -8.341 -29.908  -0.698  1.00 33.98           N
ATOM   1381  CZ  ARG A 193      -7.647 -30.039  -1.821  1.00 37.70           C
ATOM   1382  NH1 ARG A 193      -6.776 -29.095  -2.171  1.00 33.85           N
ATOM   1383  NH2 ARG A 193      -7.824 -31.114  -2.589  1.00 35.36           N
ATOM   1384  N   PHE A 194     -11.883 -26.130  -3.232  1.00 33.45           N
ATOM   1385  CA  PHE A 194     -12.202 -25.661  -4.575  1.00 31.35           C
ATOM   1386  C   PHE A 194     -13.594 -25.031  -4.596  1.00 33.57           C
ATOM   1387  O   PHE A 194     -14.504 -25.465  -3.884  1.00 32.32           O
```

[2211]

```
ATOM   1388  CB  PHE A 194     -12.174 -26.798  -5.607  1.00 30.17           C
ATOM   1389  CG  PHE A 194     -10.816 -27.446  -5.818  1.00 34.42           C
ATOM   1390  CD1 PHE A 194      -9.706 -27.103  -5.050  1.00 32.38           C
ATOM   1391  CD2 PHE A 194     -10.666 -28.426  -6.794  1.00 31.73           C
ATOM   1392  CE1 PHE A 194      -8.484 -27.714  -5.261  1.00 34.63           C
ATOM   1393  CE2 PHE A 194      -9.445 -29.051  -7.012  1.00 34.16           C
ATOM   1394  CZ  PHE A 194      -8.350 -28.697  -6.247  1.00 33.55           C
ATOM   1395  N   THR A 195     -13.760 -24.017  -5.447  1.00 32.41           N
ATOM   1396  CA  THR A 195     -15.047 -23.363  -5.670  1.00 33.42           C
ATOM   1397  C   THR A 195     -15.269 -23.264  -7.172  1.00 35.08           C
ATOM   1398  O   THR A 195     -14.422 -22.725  -7.896  1.00 32.50           O
ATOM   1399  CB  THR A 195     -15.101 -21.969  -5.025  1.00 34.86           C
ATOM   1400  OG1 THR A 195     -14.971 -22.085  -3.605  1.00 30.46           O
ATOM   1401  CG2 THR A 195     -16.435 -21.271  -5.347  1.00 32.66           C
ATOM   1402  N   ILE A 196     -16.385 -23.801  -7.643  1.00 33.46           N
ATOM   1403  CA  ILE A 196     -16.758 -23.697  -9.048  1.00 34.62           C
ATOM   1404  C   ILE A 196     -17.723 -22.529  -9.185  1.00 33.31           C
ATOM   1405  O   ILE A 196     -18.556 -22.289  -8.305  1.00 34.86           O
ATOM   1406  CB  ILE A 196     -17.366 -25.022  -9.569  1.00 35.29           C
ATOM   1407  CG1 ILE A 196     -17.391 -25.065 -11.113  1.00 31.68           C
ATOM   1408  CG2 ILE A 196     -18.747 -25.294  -8.955  1.00 31.16           C
ATOM   1409  CD1 ILE A 196     -17.908 -26.427 -11.719  1.00 24.76           C
ATOM   1410  N   SER A 197     -17.584 -21.765 -10.260  1.00 32.40           N
ATOM   1411  CA  SER A 197     -18.502 -20.665 -10.507  1.00 30.16           C
ATOM   1412  C   SER A 197     -18.535 -20.410 -11.999  1.00 34.54           C
ATOM   1413  O   SER A 197     -17.706 -20.926 -12.750  1.00 34.53           O
ATOM   1414  CB  SER A 197     -18.082 -19.395  -9.752  1.00 36.90           C
ATOM   1415  OG  SER A 197     -16.811 -18.926 -10.208  1.00 37.70           O
ATOM   1416  N   ARG A 198     -19.479 -19.571 -12.424  1.00 29.76           N
ATOM   1417  CA  ARG A 198     -19.557 -19.244 -13.835  1.00 32.91           C
ATOM   1418  C   ARG A 198     -20.011 -17.804 -14.000  1.00 35.35           C
ATOM   1419  O   ARG A 198     -20.652 -17.230 -13.114  1.00 33.44           O
ATOM   1420  CB  ARG A 198     -20.495 -20.193 -14.587  1.00 33.61           C
ATOM   1421  CG  ARG A 198     -21.943 -20.119 -14.144  1.00 28.52           C
ATOM   1422  CD  ARG A 198     -22.693 -21.332 -14.628  1.00 27.24           C
ATOM   1423  NE  ARG A 198     -22.777 -21.421 -16.085  1.00 30.20           N
ATOM   1424  CZ  ARG A 198     -23.000 -22.554 -16.746  1.00 30.57           C
ATOM   1425  NH1 ARG A 198     -23.152 -23.696 -16.085  1.00 27.84           N
ATOM   1426  NH2 ARG A 198     -23.053 -22.550 -18.067  1.00 31.29           N
ATOM   1427  N   ASP A 199     -19.625 -17.216 -15.131  1.00 38.39           N
ATOM   1428  CA  ASP A 199     -20.073 -15.883 -15.533  1.00 42.08           C
ATOM   1429  C   ASP A 199     -20.776 -16.043 -16.872  1.00 37.71           C
ATOM   1430  O   ASP A 199     -20.118 -16.102 -17.916  1.00 38.99           O
ATOM   1431  CB  ASP A 199     -18.890 -14.909 -15.629  1.00 44.33           C
ATOM   1432  CG  ASP A 199     -19.335 -13.456 -15.769  1.00 49.17           C
ATOM   1433  OD1 ASP A 199     -20.460 -13.218 -16.265  1.00 43.64           O
ATOM   1434  OD2 ASP A 199     -18.560 -12.555 -15.361  1.00 55.87           O
ATOM   1435  N   ASN A 200     -22.109 -16.099 -16.853  1.00 36.66           N
ATOM   1436  CA  ASN A 200     -22.828 -16.437 -18.078  1.00 35.42           C
ATOM   1437  C   ASN A 200     -22.794 -15.308 -19.102  1.00 40.07           C
ATOM   1438  O   ASN A 200     -22.803 -15.576 -20.313  1.00 42.21           O
ATOM   1439  CB  ASN A 200     -24.268 -16.837 -17.746  1.00 37.09           C
ATOM   1440  CG  ASN A 200     -24.353 -18.269 -17.210  1.00 34.80           C
ATOM   1441  OD1 ASN A 200     -23.450 -19.075 -17.444  1.00 36.71           O
ATOM   1442  ND2 ASN A 200     -25.432 -18.591 -16.510  1.00 31.49           N
ATOM   1443  N   SER A 201     -22.672 -14.052 -18.660  1.00 39.12           N
ATOM   1444  CA  SER A 201     -22.584 -12.973 -19.639  1.00 42.54           C
ATOM   1445  C   SER A 201     -21.243 -12.961 -20.353  1.00 40.89           C
ATOM   1446  O   SER A 201     -21.145 -12.395 -21.444  1.00 49.28           O
ATOM   1447  CB  SER A 201     -22.864 -11.614 -18.990  1.00 42.19           C
ATOM   1448  OG  SER A 201     -21.826 -11.213 -18.118  1.00 47.70           O
ATOM   1449  N   LYS A 202     -20.217 -13.591 -19.781  1.00 45.92           N
ATOM   1450  CA  LYS A 202     -18.903 -13.711 -20.409  1.00 42.60           C
ATOM   1451  C   LYS A 202     -18.608 -15.114 -20.932  1.00 43.64           C
ATOM   1452  O   LYS A 202     -17.470 -15.381 -21.335  1.00 39.83           O
ATOM   1453  CB  LYS A 202     -17.800 -13.317 -19.427  1.00 41.90           C
ATOM   1454  CG  LYS A 202     -17.779 -11.859 -19.032  1.00 45.63           C
ATOM   1455  CD  LYS A 202     -16.693 -11.609 -17.991  1.00 43.62           C
```

[2212]

```
ATOM   1456  N   ASN A 203     -19.583 -16.026 -20.908  1.00 41.26           N
ATOM   1457  CA  ASN A 203     -19.388 -17.384 -21.432  1.00 39.20           C
ATOM   1458  C   ASN A 203     -18.182 -18.070 -20.797  1.00 35.05           C
ATOM   1459  O   ASN A 203     -17.387 -18.725 -21.470  1.00 37.17           O
ATOM   1460  CB  ASN A 203     -19.244 -17.378 -22.951  1.00 37.78           C
ATOM   1461  CG  ASN A 203     -20.576 -17.444 -23.659  1.00 43.12           C
ATOM   1462  OD1 ASN A 203     -21.621 -17.161 -23.081  1.00 46.22           O
ATOM   1463  ND2 ASN A 203     -20.543 -17.831 -24.921  1.00 50.18           N
ATOM   1464  N   THR A 204     -18.042 -17.933 -19.490  1.00 35.91           N
ATOM   1465  CA  THR A 204     -16.842 -18.408 -18.826  1.00 34.44           C
ATOM   1466  C   THR A 204     -17.174 -19.251 -17.604  1.00 33.51           C
ATOM   1467  O   THR A 204     -18.084 -18.921 -16.834  1.00 33.84           O
ATOM   1468  CB  THR A 204     -15.952 -17.216 -18.446  1.00 37.34           C
ATOM   1469  OG1 THR A 204     -15.588 -16.531 -19.646  1.00 36.73           O
ATOM   1470  CG2 THR A 204     -14.684 -17.681 -17.746  1.00 38.68           C
ATOM   1471  N   LEU A 205     -16.430 -20.348 -17.451  1.00 33.03           N
ATOM   1472  CA  LEU A 205     -16.491 -21.228 -16.291  1.00 34.57           C
ATOM   1473  C   LEU A 205     -15.204 -21.094 -15.480  1.00 32.08           C
ATOM   1474  O   LEU A 205     -14.112 -21.018 -16.047  1.00 34.16           O
ATOM   1475  CB  LEU A 205     -16.688 -22.681 -16.733  1.00 32.97           C
ATOM   1476  CG  LEU A 205     -16.671 -23.752 -15.637  1.00 35.02           C
ATOM   1477  CD1 LEU A 205     -17.979 -23.751 -14.862  1.00 35.64           C
ATOM   1478  CD2 LEU A 205     -16.420 -25.125 -16.251  1.00 34.98           C
ATOM   1479  N   TYR A 206     -15.325 -21.087 -14.156  1.00 32.18           N
ATOM   1480  CA  TYR A 206     -14.183 -20.895 -13.277  1.00 33.29           C
ATOM   1481  C   TYR A 206     -14.024 -22.057 -12.310  1.00 34.29           C
ATOM   1482  O   TYR A 206     -14.992 -22.728 -11.949  1.00 35.00           O
ATOM   1483  CB  TYR A 206     -14.303 -19.606 -12.450  1.00 37.59           C
ATOM   1484  CG  TYR A 206     -14.385 -18.351 -13.265  1.00 38.89           C
ATOM   1485  CD1 TYR A 206     -13.247 -17.804 -13.857  1.00 39.40           C
ATOM   1486  CD2 TYR A 206     -15.602 -17.719 -13.465  1.00 38.52           C
ATOM   1487  CE1 TYR A 206     -13.327 -16.662 -14.611  1.00 41.93           C
ATOM   1488  CE2 TYR A 206     -15.692 -16.572 -14.211  1.00 41.15           C
ATOM   1489  CZ  TYR A 206     -14.555 -16.044 -14.779  1.00 42.17           C
ATOM   1490  OH  TYR A 206     -14.650 -14.904 -15.530  1.00 44.76           O
ATOM   1491  N   LEU A 207     -12.785 -22.274 -11.879  1.00 31.90           N
ATOM   1492  CA  LEU A 207     -12.510 -23.166 -10.760  1.00 31.13           C
ATOM   1493  C   LEU A 207     -11.467 -22.482  -9.883  1.00 32.37           C
ATOM   1494  O   LEU A 207     -10.307 -22.338 -10.284  1.00 32.55           O
ATOM   1495  CB  LEU A 207     -12.024 -24.539 -11.232  1.00 29.44           C
ATOM   1496  CG  LEU A 207     -11.751 -25.523 -10.100  1.00 31.45           C
ATOM   1497  CD1 LEU A 207     -13.080 -25.887  -9.444  1.00 27.71           C
ATOM   1498  CD2 LEU A 207     -11.035 -26.756 -10.595  1.00 27.15           C
ATOM   1499  N   GLN A 208     -11.876 -22.062  -8.692  1.00 30.99           N
ATOM   1500  CA  GLN A 208     -10.971 -21.459  -7.725  1.00 36.96           C
ATOM   1501  C   GLN A 208     -10.394 -22.584  -6.876  1.00 37.41           C
ATOM   1502  O   GLN A 208     -11.149 -23.347  -6.271  1.00 33.78           O
ATOM   1503  CB  GLN A 208     -11.711 -20.420  -6.870  1.00 36.58           C
ATOM   1504  CG  GLN A 208     -10.863 -19.683  -5.816  1.00 35.33           C
ATOM   1505  CD  GLN A 208      -9.722 -18.850  -6.400  1.00 38.02           C
ATOM   1506  OE1 GLN A 208      -9.917 -18.034  -7.301  1.00 39.14           O
ATOM   1507  NE2 GLN A 208      -8.524 -19.053  -5.877  1.00 36.92           N
ATOM   1508  N   MET A 209      -9.069 -22.746  -6.900  1.00 34.07           N
ATOM   1509  CA  MET A 209      -8.400 -23.828  -6.174  1.00 33.33           C
ATOM   1510  C   MET A 209      -7.582 -23.233  -5.029  1.00 39.83           C
ATOM   1511  O   MET A 209      -6.531 -22.628  -5.265  1.00 34.80           O
ATOM   1512  CB  MET A 209      -7.514 -24.653  -7.106  1.00 33.35           C
ATOM   1513  CG  MET A 209      -8.248 -25.326  -8.268  1.00 36.06           C
ATOM   1514  SD  MET A 209      -7.053 -25.869  -9.505  1.00 39.61           S
ATOM   1515  CE  MET A 209      -6.448 -27.376  -8.793  1.00 35.81           C
ATOM   1516  N   ASN A 210      -8.071 -23.375  -3.799  1.00 35.88           N
ATOM   1517  CA  ASN A 210      -7.326 -22.952  -2.621  1.00 36.97           C
ATOM   1518  C   ASN A 210      -6.750 -24.172  -1.906  1.00 37.43           C
ATOM   1519  O   ASN A 210      -7.094 -25.308  -2.218  1.00 35.93           O
ATOM   1520  CB  ASN A 210      -8.231 -22.133  -1.690  1.00 34.96           C
ATOM   1521  CG  ASN A 210      -8.794 -20.886  -2.374  1.00 41.56           C
ATOM   1522  OD1 ASN A 210      -8.164 -20.295  -3.262  1.00 40.40           O
ATOM   1523  ND2 ASN A 210      -9.993 -20.495  -1.976  1.00 46.10           N
```

[2213]

```
ATOM   1524  N   SER A 211      -5.843 -23.925  -0.954  1.00 36.17           N
ATOM   1525  CA  SER A 211      -5.208 -24.985  -0.155  1.00 34.47           C
ATOM   1526  C   SER A 211      -4.703 -26.130  -1.030  1.00 37.82           C
ATOM   1527  O   SER A 211      -4.976 -27.302  -0.766  1.00 36.60           O
ATOM   1528  CB  SER A 211      -6.169 -25.539   0.902  1.00 36.94           C
ATOM   1529  OG  SER A 211      -6.691 -24.528   1.742  1.00 45.65           O
ATOM   1530  N   LEU A 212      -3.956 -25.792  -2.078  1.00 37.33           N
ATOM   1531  CA  LEU A 212      -3.574 -26.807  -3.051  1.00 38.18           C
ATOM   1532  C   LEU A 212      -2.695 -27.884  -2.415  1.00 41.15           C
ATOM   1533  O   LEU A 212      -1.891 -27.613  -1.517  1.00 43.48           O
ATOM   1534  CB  LEU A 212      -2.895 -26.142  -4.255  1.00 34.54           C
ATOM   1535  CG  LEU A 212      -3.970 -25.627  -5.229  1.00 38.53           C
ATOM   1536  CD1 LEU A 212      -3.437 -24.770  -6.359  1.00 37.52           C
ATOM   1537  CD2 LEU A 212      -4.701 -26.829  -5.823  1.00 33.52           C
ATOM   1538  N   ARG A 213      -2.866 -29.126  -2.884  1.00 39.04           N
ATOM   1539  CA  ARG A 213      -2.098 -30.270  -2.406  1.00 38.83           C
ATOM   1540  C   ARG A 213      -1.333 -30.917  -3.548  1.00 38.18           C
ATOM   1541  O   ARG A 213      -1.681 -30.762  -4.720  1.00 37.38           O
ATOM   1542  CB  ARG A 213      -2.981 -31.345  -1.777  1.00 39.11           C
ATOM   1543  CG  ARG A 213      -3.833 -30.902  -0.631  1.00 41.78           C
ATOM   1544  CD  ARG A 213      -4.806 -32.023  -0.252  1.00 41.32           C
ATOM   1545  NE  ARG A 213      -5.644 -31.615   0.864  1.00 44.33           N
ATOM   1546  CZ  ARG A 213      -6.791 -32.193   1.202  1.00 43.74           C
ATOM   1547  NH1 ARG A 213      -7.260 -33.226   0.508  1.00 38.17           N
ATOM   1548  NH2 ARG A 213      -7.463 -31.727   2.244  1.00 44.64           N
ATOM   1549  N   ALA A 214      -0.259 -31.626  -3.184  1.00 38.13           N
ATOM   1550  CA  ALA A 214       0.528 -32.355  -4.174  1.00 37.14           C
ATOM   1551  C   ALA A 214      -0.347 -33.287  -5.000  1.00 36.67           C
ATOM   1552  O   ALA A 214      -0.181 -33.379  -6.221  1.00 36.26           O
ATOM   1553  CB  ALA A 214       1.645 -33.148  -3.486  1.00 38.98           C
ATOM   1554  N   GLU A 215      -1.304 -33.965  -4.350  1.00 36.78           N
ATOM   1555  CA  GLU A 215      -2.229 -34.884  -5.013  1.00 36.92           C
ATOM   1556  C   GLU A 215      -3.189 -34.182  -5.966  1.00 36.04           C
ATOM   1557  O   GLU A 215      -3.892 -34.866  -6.715  1.00 37.24           O
ATOM   1558  CB  GLU A 215      -3.045 -35.655  -3.967  1.00 38.70           C
ATOM   1559  CG  GLU A 215      -4.088 -34.747  -3.275  1.00 45.49           C
ATOM   1560  CD  GLU A 215      -4.935 -35.439  -2.207  1.00 52.45           C
ATOM   1561  OE1 GLU A 215      -6.188 -35.281  -2.230  1.00 56.13           O
ATOM   1562  OE2 GLU A 215      -4.355 -36.116  -1.333  1.00 55.19           O
ATOM   1563  N   ASP A 216      -3.230 -32.848  -5.967  1.00 32.40           N
ATOM   1564  CA  ASP A 216      -4.066 -32.092  -6.891  1.00 30.80           C
ATOM   1565  C   ASP A 216      -3.422 -31.925  -8.259  1.00 34.41           C
ATOM   1566  O   ASP A 216      -4.049 -31.326  -9.145  1.00 30.79           O
ATOM   1567  CB  ASP A 216      -4.378 -30.700  -6.332  1.00 31.94           C
ATOM   1568  CG  ASP A 216      -5.341 -30.732  -5.150  1.00 36.00           C
ATOM   1569  OD1 ASP A 216      -6.231 -31.608  -5.093  1.00 35.42           O
ATOM   1570  OD2 ASP A 216      -5.235 -29.848  -4.286  1.00 38.61           O
ATOM   1571  N   THR A 217      -2.195 -32.431  -8.436  1.00 28.71           N
ATOM   1572  CA  THR A 217      -1.472 -32.332  -9.701  1.00 29.23           C
ATOM   1573  C   THR A 217      -2.125 -33.192 -10.772  1.00 31.20           C
ATOM   1574  O   THR A 217      -2.356 -34.386 -10.561  1.00 32.44           O
ATOM   1575  CB  THR A 217      -0.007 -32.744  -9.495  1.00 34.62           C
ATOM   1576  OG1 THR A 217       0.639 -31.801  -8.617  1.00 34.36           O
ATOM   1577  CG2 THR A 217       0.762 -32.851 -10.840  1.00 30.50           C
ATOM   1578  N   ALA A 218      -2.402 -32.587 -11.931  1.00 32.77           N
ATOM   1579  CA  ALA A 218      -3.269 -33.168 -12.953  1.00 29.43           C
ATOM   1580  C   ALA A 218      -3.440 -32.196 -14.116  1.00 33.79           C
ATOM   1581  O   ALA A 218      -3.256 -30.980 -13.973  1.00 32.35           O
ATOM   1582  CB  ALA A 218      -4.665 -33.503 -12.397  1.00 26.06           C
ATOM   1583  N   VAL A 219      -3.811 -32.760 -15.268  1.00 29.46           N
ATOM   1584  CA  VAL A 219      -4.457 -32.011 -16.340  1.00 29.56           C
ATOM   1585  C   VAL A 219      -5.942 -31.851 -16.000  1.00 31.38           C
ATOM   1586  O   VAL A 219      -6.638 -32.846 -15.749  1.00 29.06           O
ATOM   1587  CB  VAL A 219      -4.284 -32.743 -17.679  1.00 32.34           C
ATOM   1588  CG1 VAL A 219      -5.125 -32.065 -18.775  1.00 34.57           C
ATOM   1589  CG2 VAL A 219      -2.817 -32.806 -18.063  1.00 35.55           C
ATOM   1590  N   TYR A 220      -6.430 -30.602 -16.006  1.00 28.08           N
ATOM   1591  CA  TYR A 220      -7.799 -30.261 -15.624  1.00 29.89           C
```

[2214]

```
ATOM   1592  C   TYR A 220      -8.590 -29.946 -16.878  1.00 32.58           C
ATOM   1593  O   TYR A 220      -8.190 -29.076 -17.658  1.00 34.44           O
ATOM   1594  CB  TYR A 220      -7.843 -29.066 -14.668  1.00 25.61           C
ATOM   1595  CG  TYR A 220      -7.504 -29.444 -13.272  1.00 25.50           C
ATOM   1596  CD1 TYR A 220      -6.175 -29.752 -12.912  1.00 26.57           C
ATOM   1597  CD2 TYR A 220      -8.495 -29.515 -12.301  1.00 25.54           C
ATOM   1598  CE1 TYR A 220      -5.856 -30.133 -11.630  1.00 24.58           C
ATOM   1599  CE2 TYR A 220      -8.184 -29.889 -10.997  1.00 31.77           C
ATOM   1600  CZ  TYR A 220      -6.852 -30.192 -10.671  1.00 28.82           C
ATOM   1601  OH  TYR A 220      -6.539 -30.560  -9.383  1.00 31.21           O
ATOM   1602  N   TYR A 221      -9.702 -30.650 -17.068  1.00 29.79           N
ATOM   1603  CA  TYR A 221     -10.541 -30.497 -18.248  1.00 31.30           C
ATOM   1604  C   TYR A 221     -11.848 -29.803 -17.919  1.00 30.86           C
ATOM   1605  O   TYR A 221     -12.499 -30.098 -16.910  1.00 30.06           O
ATOM   1606  CB  TYR A 221     -10.898 -31.837 -18.886  1.00 31.86           C
ATOM   1607  CG  TYR A 221      -9.752 -32.629 -19.443  1.00 33.12           C
ATOM   1608  CD1 TYR A 221      -9.277 -32.389 -20.725  1.00 32.18           C
ATOM   1609  CD2 TYR A 221      -9.180 -33.664 -18.708  1.00 33.13           C
ATOM   1610  CE1 TYR A 221      -8.242 -33.129 -21.244  1.00 33.75           C
ATOM   1611  CE2 TYR A 221      -8.149 -34.417 -19.226  1.00 32.67           C
ATOM   1612  CZ  TYR A 221      -7.682 -34.135 -20.491  1.00 33.53           C
ATOM   1613  OH  TYR A 221      -6.670 -34.886 -21.022  1.00 44.18           O
ATOM   1614  N   CYS A 222     -12.233 -28.919 -18.814  1.00 31.68           N
ATOM   1615  CA  CYS A 222     -13.560 -28.332 -18.862  1.00 32.57           C
ATOM   1616  C   CYS A 222     -14.474 -29.265 -19.664  1.00 32.73           C
ATOM   1617  O   CYS A 222     -14.034 -29.900 -20.627  1.00 32.60           O
ATOM   1618  CB  CYS A 222     -13.448 -26.956 -19.525  1.00 30.76           C
ATOM   1619  SG  CYS A 222     -14.925 -26.026 -19.688  1.00 51.77           S
ATOM   1620  N   ALA A 223     -15.740 -29.354 -19.269  1.00 30.28           N
ATOM   1621  CA  ALA A 223     -16.647 -30.313 -19.895  1.00 32.05           C
ATOM   1622  C   ALA A 223     -18.057 -29.748 -19.951  1.00 30.22           C
ATOM   1623  O   ALA A 223     -18.539 -29.182 -18.968  1.00 31.18           O
ATOM   1624  CB  ALA A 223     -16.671 -31.641 -19.132  1.00 26.32           C
ATOM   1625  N   ARG A 224     -18.718 -29.918 -21.094  1.00 29.02           N
ATOM   1626  CA  ARG A 224     -20.116 -29.533 -21.242  1.00 32.03           C
ATOM   1627  C   ARG A 224     -21.020 -30.753 -21.083  1.00 32.62           C
ATOM   1628  O   ARG A 224     -20.837 -31.756 -21.779  1.00 30.74           O
ATOM   1629  CB  ARG A 224     -20.354 -28.884 -22.600  1.00 33.79           C
ATOM   1630  CG  ARG A 224     -21.761 -28.377 -22.743  1.00 28.31           C
ATOM   1631  CD  ARG A 224     -22.065 -27.917 -24.163  1.00 32.97           C
ATOM   1632  NE  ARG A 224     -22.136 -29.017 -25.123  1.00 34.29           N
ATOM   1633  CZ  ARG A 224     -22.804 -28.937 -26.267  1.00 36.00           C
ATOM   1634  NH1 ARG A 224     -23.463 -27.820 -26.559  1.00 36.67           N
ATOM   1635  NH2 ARG A 224     -22.835 -29.963 -27.102  1.00 32.44           N
ATOM   1636  N   ASP A 225     -22.012 -30.639 -20.200  1.00 29.12           N
ATOM   1637  CA  ASP A 225     -22.919 -31.720 -19.840  1.00 31.72           C
ATOM   1638  C   ASP A 225     -24.338 -31.450 -20.366  1.00 33.56           C
ATOM   1639  O   ASP A 225     -24.844 -30.323 -20.271  1.00 30.01           O
ATOM   1640  CB  ASP A 225     -22.941 -31.888 -18.316  1.00 28.43           C
ATOM   1641  CG  ASP A 225     -21.540 -32.132 -17.726  1.00 41.55           C
ATOM   1642  OD1 ASP A 225     -20.696 -32.817 -18.363  1.00 44.00           O
ATOM   1643  OD2 ASP A 225     -21.261 -31.609 -16.625  1.00 45.05           O
ATOM   1644  N   LEU A 226     -24.989 -32.489 -20.913  1.00 31.58           N
ATOM   1645  CA  LEU A 226     -26.368 -32.325 -21.405  1.00 32.70           C
ATOM   1646  C   LEU A 226     -27.371 -32.227 -20.264  1.00 30.06           C
ATOM   1647  O   LEU A 226     -28.355 -31.487 -20.353  1.00 35.30           O
ATOM   1648  CB  LEU A 226     -26.756 -33.476 -22.326  1.00 30.70           C
ATOM   1649  CG  LEU A 226     -25.845 -33.781 -23.501  1.00 33.38           C
ATOM   1650  CD1 LEU A 226     -26.345 -35.031 -24.203  1.00 35.14           C
ATOM   1651  CD2 LEU A 226     -25.764 -32.598 -24.449  1.00 34.55           C
ATOM   1652  N   ILE A 227     -27.185 -33.035 -19.231  1.00 27.61           N
ATOM   1653  CA  ILE A 227     -27.810 -32.879 -17.926  1.00 27.11           C
ATOM   1654  C   ILE A 227     -26.709 -33.178 -16.921  1.00 28.45           C
ATOM   1655  O   ILE A 227     -25.606 -33.586 -17.289  1.00 33.96           O
ATOM   1656  CB  ILE A 227     -29.025 -33.830 -17.703  1.00 30.81           C
ATOM   1657  CG1 ILE A 227     -28.597 -35.303 -17.844  1.00 29.19           C
ATOM   1658  CG2 ILE A 227     -30.163 -33.528 -18.677  1.00 25.56           C
[2215] ATOM   1659  CD1 ILE A 227     -29.718 -36.310 -17.532  1.00 30.63           C
```

```
ATOM   1660  N   HIS A 228     -27.011 -32.971 -15.651  1.00 30.28           N
ATOM   1661  CA  HIS A 228     -26.085 -33.336 -14.588  1.00 31.85           C
ATOM   1662  C   HIS A 228     -25.609 -34.776 -14.753  1.00 33.11           C
ATOM   1663  O   HIS A 228     -26.417 -35.714 -14.794  1.00 33.57           O
ATOM   1664  CB  HIS A 228     -26.789 -33.158 -13.241  1.00 29.05           C
ATOM   1665  CG  HIS A 228     -26.077 -33.807 -12.098  1.00 32.61           C
ATOM   1666  ND1 HIS A 228     -24.996 -33.231 -11.464  1.00 29.44           N
ATOM   1667  CD2 HIS A 228     -26.294 -34.992 -11.476  1.00 31.97           C
ATOM   1668  CE1 HIS A 228     -24.585 -34.031 -10.497  1.00 30.93           C
ATOM   1669  NE2 HIS A 228     -25.350 -35.111 -10.489  1.00 31.72           N
ATOM   1670  N   GLY A 229     -24.297 -34.952 -14.882  1.00 30.43           N
ATOM   1671  CA  GLY A 229     -23.729 -36.277 -14.950  1.00 30.37           C
ATOM   1672  C   GLY A 229     -23.568 -36.876 -16.331  1.00 32.52           C
ATOM   1673  O   GLY A 229     -23.061 -37.997 -16.436  1.00 35.72           O
ATOM   1674  N   VAL A 230     -23.967 -36.185 -17.390  1.00 32.43           N
ATOM   1675  CA  VAL A 230     -23.921 -36.739 -18.743  1.00 33.75           C
ATOM   1676  C   VAL A 230     -23.057 -35.802 -19.582  1.00 32.68           C
ATOM   1677  O   VAL A 230     -23.560 -34.863 -20.200  1.00 34.49           O
ATOM   1678  CB  VAL A 230     -25.316 -36.923 -19.352  1.00 33.00           C
ATOM   1679  CG1 VAL A 230     -25.212 -37.544 -20.750  1.00 32.60           C
ATOM   1680  CG2 VAL A 230     -26.164 -37.800 -18.460  1.00 27.32           C
ATOM   1681  N   THR A 231     -21.750 -36.085 -19.636  1.00 30.51           N
ATOM   1682  CA  THR A 231     -20.777 -35.247 -20.334  1.00 33.45           C
ATOM   1683  C   THR A 231     -20.804 -35.499 -21.833  1.00 32.25           C
ATOM   1684  O   THR A 231     -20.685 -36.643 -22.285  1.00 34.93           O
ATOM   1685  CB  THR A 231     -19.359 -35.516 -19.796  1.00 32.73           C
ATOM   1686  OG1 THR A 231     -19.272 -35.091 -18.439  1.00 37.76           O
ATOM   1687  CG2 THR A 231     -18.317 -34.754 -20.593  1.00 33.34           C
ATOM   1688  N   ARG A 232     -20.927 -34.429 -22.608  1.00 29.67           N
ATOM   1689  CA  ARG A 232     -20.965 -34.546 -24.061  1.00 32.50           C
ATOM   1690  C   ARG A 232     -19.707 -34.035 -24.758  1.00 31.91           C
ATOM   1691  O   ARG A 232     -19.349 -34.560 -25.814  1.00 33.90           O
ATOM   1692  CB  ARG A 232     -22.190 -33.790 -24.613  1.00 33.82           C
ATOM   1693  CG  ARG A 232     -22.403 -33.901 -26.125  1.00 35.75           C
ATOM   1694  CD  ARG A 232     -22.692 -35.340 -26.563  1.00 35.43           C
ATOM   1695  NE  ARG A 232     -22.825 -35.438 -28.014  1.00 35.43           N
ATOM   1696  CZ  ARG A 232     -21.799 -35.387 -28.864  1.00 40.04           C
ATOM   1697  NH1 ARG A 232     -20.562 -35.241 -28.407  1.00 39.38           N
ATOM   1698  NH2 ARG A 232     -22.001 -35.472 -30.176  1.00 41.16           N
ATOM   1699  N   ASN A 233     -19.023 -33.028 -24.208  1.00 31.57           N
ATOM   1700  CA  ASN A 233     -17.876 -32.410 -24.877  1.00 35.05           C
ATOM   1701  C   ASN A 233     -16.789 -32.102 -23.864  1.00 31.94           C
ATOM   1702  O   ASN A 233     -17.082 -31.738 -22.726  1.00 28.76           O
ATOM   1703  CB  ASN A 233     -18.242 -31.111 -25.602  1.00 36.15           C
ATOM   1704  CG  ASN A 233     -19.403 -31.283 -26.533  1.00 34.41           C
ATOM   1705  OD1 ASN A 233     -20.565 -31.245 -26.106  1.00 37.23           O
ATOM   1706  ND2 ASN A 233     -19.109 -31.478 -27.812  1.00 36.15           N
ATOM   1707  N   TRP A 234     -15.531 -32.225 -24.311  1.00 32.83           N
ATOM   1708  CA  TRP A 234     -14.334 -32.074 -23.491  1.00 32.73           C
ATOM   1709  C   TRP A 234     -13.434 -30.987 -24.061  1.00 38.17           C
ATOM   1710  O   TRP A 234     -13.267 -30.896 -25.276  1.00 36.65           O
ATOM   1711  CB  TRP A 234     -13.516 -33.382 -23.440  1.00 28.73           C
ATOM   1712  CG  TRP A 234     -14.186 -34.501 -22.736  1.00 34.37           C
ATOM   1713  CD1 TRP A 234     -15.218 -35.265 -23.203  1.00 34.69           C
ATOM   1714  CD2 TRP A 234     -13.871 -35.004 -21.431  1.00 32.83           C
ATOM   1715  NE1 TRP A 234     -15.568 -36.210 -22.268  1.00 35.91           N
ATOM   1716  CE2 TRP A 234     -14.758 -36.074 -21.171  1.00 34.79           C
ATOM   1717  CE3 TRP A 234     -12.932 -34.654 -20.457  1.00 32.71           C
ATOM   1718  CZ2 TRP A 234     -14.734 -36.793 -19.977  1.00 33.44           C
ATOM   1719  CZ3 TRP A 234     -12.897 -35.377 -19.278  1.00 30.09           C
ATOM   1720  CH2 TRP A 234     -13.801 -36.430 -19.046  1.00 33.41           C
ATOM   1721  N   GLY A 235     -12.843 -30.172 -23.185  1.00 38.00           N
ATOM   1722  CA  GLY A 235     -11.739 -29.310 -23.567  1.00 37.09           C
ATOM   1723  C   GLY A 235     -10.438 -30.084 -23.730  1.00 37.77           C
ATOM   1724  O   GLY A 235     -10.391 -31.313 -23.661  1.00 38.93           O
ATOM   1725  N   CYS A 236      -9.357 -29.344 -23.961  1.00 40.63           N
ATOM   1726  CA  CYS A 236      -8.057 -29.992 -24.111  1.00 39.08           C
ATOM   1727  C   CYS A 236      -7.196 -29.941 -22.855  1.00 37.05           C
```

[2216]

```
ATOM   1728  O   CYS A 236      -6.127 -30.554 -22.840  1.00 39.61           O
ATOM   1729  CB  CYS A 236      -7.293 -29.414 -25.299  1.00 41.92           C
ATOM   1730  SG  CYS A 236      -7.547 -30.424 -26.793  1.00 59.96           S
ATOM   1731  N   GLY A 237      -7.608 -29.215 -21.829  1.00 34.48           N
ATOM   1732  CA  GLY A 237      -6.959 -29.341 -20.543  1.00 36.04           C
ATOM   1733  C   GLY A 237      -5.877 -28.302 -20.294  1.00 36.52           C
ATOM   1734  O   GLY A 237      -5.217 -27.804 -21.211  1.00 38.24           O
ATOM   1735  N   THR A 238      -5.707 -27.958 -19.030  1.00 32.39           N
ATOM   1736  CA  THR A 238      -4.630 -27.099 -18.577  1.00 35.05           C
ATOM   1737  C   THR A 238      -3.953 -27.812 -17.412  1.00 36.08           C
ATOM   1738  O   THR A 238      -4.604 -28.538 -16.650  1.00 31.70           O
ATOM   1739  CB  THR A 238      -5.155 -25.693 -18.203  1.00 32.71           C
ATOM   1740  OG1 THR A 238      -4.063 -24.843 -17.862  1.00 38.60           O
ATOM   1741  CG2 THR A 238      -6.133 -25.738 -17.052  1.00 30.19           C
ATOM   1742  N   LEU A 239      -2.636 -27.673 -17.320  1.00 35.96           N
ATOM   1743  CA  LEU A 239      -1.849 -28.475 -16.389  1.00 33.17           C
ATOM   1744  C   LEU A 239      -1.644 -27.729 -15.077  1.00 37.03           C
ATOM   1745  O   LEU A 239      -1.204 -26.576 -15.070  1.00 31.90           O
ATOM   1746  CB  LEU A 239      -0.491 -28.829 -16.994  1.00 29.11           C
ATOM   1747  CG  LEU A 239       0.512 -29.552 -16.083  1.00 31.06           C
ATOM   1748  CD1 LEU A 239       0.040 -30.968 -15.738  1.00 28.82           C
ATOM   1749  CD2 LEU A 239       1.883 -29.610 -16.752  1.00 30.94           C
ATOM   1750  N   VAL A 240      -1.951 -28.392 -13.966  1.00 35.43           N
ATOM   1751  CA  VAL A 240      -1.718 -27.834 -12.644  1.00 32.65           C
ATOM   1752  C   VAL A 240      -0.713 -28.721 -11.924  1.00 34.08           C
ATOM   1753  O   VAL A 240      -0.957 -29.920 -11.734  1.00 34.56           O
ATOM   1754  CB  VAL A 240      -3.018 -27.711 -11.836  1.00 35.18           C
ATOM   1755  CG1 VAL A 240      -2.698 -27.198 -10.432  1.00 33.67           C
ATOM   1756  CG2 VAL A 240      -3.982 -26.794 -12.548  1.00 29.05           C
ATOM   1757  N   THR A 241       0.428 -28.145 -11.552  1.00 32.80           N
ATOM   1758  CA  THR A 241       1.433 -28.849 -10.768  1.00 35.43           C
ATOM   1759  C   THR A 241       1.578 -28.198  -9.397  1.00 39.28           C
ATOM   1760  O   THR A 241       1.733 -26.976  -9.289  1.00 36.94           O
ATOM   1761  CB  THR A 241       2.781 -28.891 -11.485  1.00 36.74           C
ATOM   1762  OG1 THR A 241       2.570 -29.295 -12.839  1.00 38.98           O
ATOM   1763  CG2 THR A 241       3.681 -29.936 -10.810  1.00 42.36           C
ATOM   1764  N   VAL A 242       1.478 -29.018  -8.358  1.00 38.85           N
ATOM   1765  CA  VAL A 242       1.643 -28.596  -6.978  1.00 36.97           C
ATOM   1766  C   VAL A 242       2.861 -29.315  -6.415  1.00 43.86           C
ATOM   1767  O   VAL A 242       2.865 -30.548  -6.300  1.00 42.43           O
ATOM   1768  CB  VAL A 242       0.397 -28.905  -6.134  1.00 37.78           C
ATOM   1769  CG1 VAL A 242       0.559 -28.321  -4.734  1.00 42.87           C
ATOM   1770  CG2 VAL A 242      -0.896 -28.380  -6.811  1.00 36.54           C
ATOM   1771  N   SER A 243       3.880 -28.552  -6.043  1.00 42.86           N
ATOM   1772  CA  SER A 243       5.121 -29.135  -5.565  1.00 50.52           C
ATOM   1773  C   SER A 243       5.794 -28.186  -4.590  1.00 53.71           C
ATOM   1774  O   SER A 243       5.716 -26.962  -4.737  1.00 51.21           O
ATOM   1775  CB  SER A 243       6.079 -29.422  -6.711  1.00 53.27           C
ATOM   1776  OG  SER A 243       7.359 -29.764  -6.210  1.00 62.73           O
ATOM   1777  N   ALA A 244       6.489 -28.775  -3.620  1.00 60.07           N
ATOM   1778  CA  ALA A 244       7.237 -28.031  -2.617  1.00 61.69           C
ATOM   1779  C   ALA A 244       8.598 -27.581  -3.159  1.00 61.80           C
ATOM   1780  O   ALA A 244       9.055 -28.062  -4.194  1.00 63.91           O
ATOM   1781  CB  ALA A 244       7.424 -28.883  -1.353  1.00 53.72           C
TER
ATOM   1782  N   ARG D  20     -32.280  10.413 -23.369  1.00 92.38           N
ATOM   1783  CA  ARG D  20     -33.538  10.924 -23.896  1.00 86.66           C
ATOM   1784  C   ARG D  20     -34.677  10.613 -22.933  1.00 93.62           C
ATOM   1785  O   ARG D  20     -35.086   9.462 -22.802  1.00 95.55           O
ATOM   1786  CB  ARG D  20     -33.825  10.327 -25.277  1.00 78.45           C
ATOM   1787  N   THR D  21     -35.185  11.644 -22.262  1.00 93.46           N
ATOM   1788  CA  THR D  21     -36.257  11.487 -21.285  1.00100.28           C
ATOM   1789  C   THR D  21     -37.608  11.706 -21.961  1.00103.15           C
ATOM   1790  O   THR D  21     -37.836  12.754 -22.578  1.00103.60           O
ATOM   1791  CB  THR D  21     -36.079  12.462 -20.117  1.00104.64           C
ATOM   1792  OG1 THR D  21     -36.561  13.763 -20.487  1.00105.07           O
ATOM   1793  CG2 THR D  21     -34.605  12.557 -19.713  1.00 96.37           C
ATOM   1794  N   VAL D  22     -38.502  10.721 -21.842  1.00100.10           N
```

[2217]

```
ATOM   1795  CA  VAL D  22     -39.847  10.812 -22.397  1.00100.53           C
ATOM   1796  C   VAL D  22     -40.858  10.498 -21.303  1.00101.37           C
ATOM   1797  O   VAL D  22     -40.558   9.790 -20.336  1.00100.33           O
ATOM   1798  CB  VAL D  22     -40.041   9.872 -23.606  1.00101.34           C
ATOM   1799  CG1 VAL D  22     -39.215  10.354 -24.795  1.00 99.06           C
ATOM   1800  CG2 VAL D  22     -39.664   8.448 -23.228  1.00 99.90           C
ATOM   1801  N   MET D  23     -42.066  11.031 -21.465  1.00 99.96           N
ATOM   1802  CA  MET D  23     -43.108  10.930 -20.451  1.00105.22           C
ATOM   1803  C   MET D  23     -43.887   9.616 -20.582  1.00102.66           C
ATOM   1804  O   MET D  23     -43.906   8.978 -21.638  1.00 98.76           O
ATOM   1805  CB  MET D  23     -44.071  12.121 -20.548  1.00107.98           C
ATOM   1806  CG  MET D  23     -43.451  13.500 -20.270  1.00107.47           C
ATOM   1807  SD  MET D  23     -43.100  13.827 -18.526  1.00111.09           S
ATOM   1808  CE  MET D  23     -43.008  15.620 -18.526  1.00106.45           C
ATOM   1809  N   VAL D  24     -44.535   9.222 -19.478  1.00101.55           N
ATOM   1810  CA  VAL D  24     -45.357   8.013 -19.410  1.00 98.92           C
ATOM   1811  C   VAL D  24     -46.230   8.043 -18.157  1.00 98.54           C
ATOM   1812  O   VAL D  24     -45.770   8.431 -17.077  1.00100.33           O
ATOM   1813  CB  VAL D  24     -44.492   6.740 -19.439  1.00 93.28           C
ATOM   1814  N   ASN D  25     -47.479   7.588 -18.288  1.00 95.20           N
ATOM   1815  CA  ASN D  25     -48.535   7.682 -17.281  1.00 94.40           C
ATOM   1816  C   ASN D  25     -48.717   6.333 -16.551  1.00 92.18           C
ATOM   1817  O   ASN D  25     -47.796   5.505 -16.502  1.00 89.81           O
ATOM   1818  CB  ASN D  25     -49.817   8.170 -17.966  1.00 95.79           C
ATOM   1819  CG  ASN D  25     -50.000   7.578 -19.354  1.00 97.11           C
ATOM   1820  OD1 ASN D  25     -49.139   7.717 -20.223  1.00 94.78           O
ATOM   1821  ND2 ASN D  25     -51.131   6.904 -19.563  1.00 94.46           N
ATOM   1822  N   LEU D  26     -49.909   6.095 -15.992  1.00 90.80           N
ATOM   1823  CA  LEU D  26     -50.144   4.883 -15.227  1.00 86.78           C
ATOM   1824  C   LEU D  26     -50.116   3.656 -16.165  1.00 89.14           C
ATOM   1825  O   LEU D  26     -49.243   2.781 -16.021  1.00 83.33           O
ATOM   1826  CB  LEU D  26     -51.471   4.957 -14.431  1.00 87.62           C
ATOM   1827  CG  LEU D  26     -52.057   3.690 -13.816  1.00 82.80           C
ATOM   1828  CD1 LEU D  26     -50.988   3.029 -12.955  1.00 80.21           C
ATOM   1829  CD2 LEU D  26     -53.336   3.926 -13.015  1.00 73.09           C
ATOM   1830  N   ASN D  36     -49.859 -12.980  -7.086  1.00 67.71           N
ATOM   1831  CA  ASN D  36     -49.019 -14.142  -7.375  1.00 65.14           C
ATOM   1832  C   ASN D  36     -49.499 -14.831  -8.648  1.00 68.09           C
ATOM   1833  O   ASN D  36     -50.689 -14.774  -8.972  1.00 70.73           O
ATOM   1834  CB  ASN D  36     -49.027 -15.130  -6.199  1.00 60.12           C
ATOM   1835  N   PRO D  37     -48.579 -15.471  -9.378  1.00 66.81           N
ATOM   1836  CA  PRO D  37     -49.009 -16.260 -10.542  1.00 67.80           C
ATOM   1837  C   PRO D  37     -49.933 -17.400 -10.156  1.00 67.30           C
ATOM   1838  O   PRO D  37     -50.811 -17.776 -10.948  1.00 61.21           O
ATOM   1839  CB  PRO D  37     -47.684 -16.772 -11.130  1.00 68.66           C
ATOM   1840  CG  PRO D  37     -46.628 -15.869 -10.570  1.00 62.74           C
ATOM   1841  CD  PRO D  37     -47.119 -15.514  -9.199  1.00 62.11           C
ATOM   1842  N   LYS D  38     -49.778 -17.935  -8.937  1.00 64.19           N
ATOM   1843  CA  LYS D  38     -50.653 -18.993  -8.449  1.00 60.51           C
ATOM   1844  C   LYS D  38     -52.122 -18.609  -8.534  1.00 65.58           C
ATOM   1845  O   LYS D  38     -52.982 -19.497  -8.534  1.00 68.56           O
ATOM   1846  CB  LYS D  38     -50.289 -19.353  -7.004  1.00 58.18           C
ATOM   1847  N   ARG D  39     -52.424 -17.312  -8.616  1.00 65.83           N
ATOM   1848  CA  ARG D  39     -53.807 -16.867  -8.731  1.00 66.88           C
ATOM   1849  C   ARG D  39     -54.505 -17.546  -9.903  1.00 61.08           C
ATOM   1850  O   ARG D  39     -55.535 -18.209  -9.730  1.00 59.35           O
ATOM   1851  CB  ARG D  39     -53.853 -15.344  -8.876  1.00 69.91           C
ATOM   1852  N   SER D  40     -53.945 -17.413 -11.105  1.00 57.61           N
ATOM   1853  CA  SER D  40     -54.582 -17.940 -12.305  1.00 55.70           C
ATOM   1854  C   SER D  40     -53.866 -19.143 -12.914  1.00 56.49           C
ATOM   1855  O   SER D  40     -54.348 -19.685 -13.924  1.00 47.14           O
ATOM   1856  CB  SER D  40     -54.712 -16.835 -13.359  1.00 56.61           C
ATOM   1857  OG  SER D  40     -53.453 -16.527 -13.927  1.00 58.92           O
ATOM   1858  N   SER D  41     -52.742 -19.583 -12.341  1.00 53.29           N
ATOM   1859  CA  SER D  41     -52.002 -20.688 -12.937  1.00 43.54           C
ATOM   1860  C   SER D  41     -51.387 -21.569 -11.869  1.00 44.01           C
ATOM   1861  O   SER D  41     -50.637 -21.081 -11.025  1.00 44.77           O
ATOM   1862  CB  SER D  41     -50.894 -20.193 -13.862  1.00 45.56           C
```

[2218]

```
ATOM   1863  OG  SER D  41     -50.183 -21.305 -14.398  1.00 43.08           O
ATOM   1864  N   ASP D  42     -51.661 -22.870 -11.937  1.00 41.00           N
ATOM   1865  CA  ASP D  42     -50.988 -23.834 -11.078  1.00 38.04           C
ATOM   1866  C   ASP D  42     -50.035 -24.752 -11.857  1.00 32.74           C
ATOM   1867  O   ASP D  42     -49.787 -25.884 -11.448  1.00 33.74           O
ATOM   1868  CB  ASP D  42     -52.021 -24.635 -10.290  1.00 34.36           C
ATOM   1869  CG  ASP D  42     -52.922 -25.499 -11.181  1.00 35.59           C
ATOM   1870  OD1 ASP D  42     -52.819 -25.440 -12.430  1.00 31.72           O
ATOM   1871  OD2 ASP D  42     -53.726 -26.262 -10.609  1.00 33.41           O
ATOM   1872  N   TYR D  43     -49.488 -24.283 -12.980  1.00 33.54           N
ATOM   1873  CA  TYR D  43     -48.462 -25.069 -13.662  1.00 34.98           C
ATOM   1874  C   TYR D  43     -47.268 -25.334 -12.745  1.00 36.50           C
ATOM   1875  O   TYR D  43     -46.641 -26.398 -12.837  1.00 33.59           O
ATOM   1876  CB  TYR D  43     -48.011 -24.370 -14.953  1.00 32.14           C
ATOM   1877  CG  TYR D  43     -49.013 -24.424 -16.113  1.00 33.42           C
ATOM   1878  CD1 TYR D  43     -49.997 -25.416 -16.174  1.00 34.93           C
ATOM   1879  CD2 TYR D  43     -48.962 -23.492 -17.151  1.00 32.45           C
ATOM   1880  CE1 TYR D  43     -50.899 -25.474 -17.232  1.00 34.49           C
ATOM   1881  CE2 TYR D  43     -49.863 -23.535 -18.215  1.00 35.67           C
ATOM   1882  CZ  TYR D  43     -50.833 -24.531 -18.248  1.00 36.76           C
ATOM   1883  OH  TYR D  43     -51.738 -24.587 -19.286  1.00 32.54           O
ATOM   1884  N   TYR D  44     -46.972 -24.408 -11.823  1.00 34.30           N
ATOM   1885  CA  TYR D  44     -45.878 -24.608 -10.876  1.00 31.05           C
ATOM   1886  C   TYR D  44     -46.049 -25.877 -10.060  1.00 33.97           C
ATOM   1887  O   TYR D  44     -45.060 -26.398  -9.545  1.00 31.26           O
ATOM   1888  CB  TYR D  44     -45.746 -23.406  -9.929  1.00 31.85           C
ATOM   1889  CG  TYR D  44     -46.835 -23.313  -8.876  1.00 36.23           C
ATOM   1890  CD1 TYR D  44     -48.071 -22.739  -9.172  1.00 37.74           C
ATOM   1891  CD2 TYR D  44     -46.627 -23.795  -7.585  1.00 33.98           C
ATOM   1892  CE1 TYR D  44     -49.069 -22.660  -8.225  1.00 34.60           C
ATOM   1893  CE2 TYR D  44     -47.623 -23.733  -6.630  1.00 37.51           C
ATOM   1894  CZ  TYR D  44     -48.849 -23.166  -6.964  1.00 40.44           C
ATOM   1895  OH  TYR D  44     -49.842 -23.082  -6.026  1.00 40.94           O
ATOM   1896  N   ASN D  45     -47.280 -26.380  -9.933  1.00 37.50           N
ATOM   1897  CA  ASN D  45     -47.594 -27.590  -9.176  1.00 36.15           C
ATOM   1898  C   ASN D  45     -47.683 -28.837 -10.038  1.00 36.10           C
ATOM   1899  O   ASN D  45     -47.387 -29.936  -9.553  1.00 36.48           O
ATOM   1900  CB  ASN D  45     -48.943 -27.445  -8.463  1.00 40.99           C
ATOM   1901  CG  ASN D  45     -48.811 -27.038  -7.023  1.00 47.00           C
ATOM   1902  OD1 ASN D  45     -47.847 -27.400  -6.344  1.00 45.29           O
ATOM   1903  ND2 ASN D  45     -49.803 -26.289  -6.531  1.00 48.22           N
ATOM   1904  N   ARG D  46     -48.129 -28.690 -11.285  1.00 34.97           N
ATOM   1905  CA  ARG D  46     -48.472 -29.810 -12.150  1.00 33.59           C
ATOM   1906  C   ARG D  46     -47.420 -30.078 -13.221  1.00 29.73           C
ATOM   1907  O   ARG D  46     -47.517 -31.085 -13.925  1.00 28.62           O
ATOM   1908  CB  ARG D  46     -49.843 -29.553 -12.805  1.00 31.42           C
ATOM   1909  CG  ARG D  46     -51.013 -29.552 -11.817  1.00 30.84           C
ATOM   1910  CD  ARG D  46     -52.235 -28.789 -12.363  1.00 33.53           C
ATOM   1911  NE  ARG D  46     -52.666 -29.313 -13.654  1.00 31.93           N
ATOM   1912  CZ  ARG D  46     -53.160 -28.574 -14.640  1.00 36.12           C
ATOM   1913  NH1 ARG D  46     -53.316 -27.259 -14.486  1.00 35.51           N
ATOM   1914  NH2 ARG D  46     -53.495 -29.152 -15.785  1.00 34.99           N
ATOM   1915  N   SER D  47     -46.436 -29.196 -13.364  1.00 27.01           N
ATOM   1916  CA  SER D  47     -45.317 -29.433 -14.262  1.00 31.16           C
ATOM   1917  C   SER D  47     -44.528 -30.655 -13.816  1.00 28.39           C
ATOM   1918  O   SER D  47     -44.391 -30.921 -12.621  1.00 30.14           O
ATOM   1919  CB  SER D  47     -44.385 -28.215 -14.282  1.00 30.99           C
ATOM   1920  OG  SER D  47     -43.337 -28.398 -15.220  1.00 30.74           O
ATOM   1921  N   THR D  48     -44.013 -31.408 -14.793  1.00 26.81           N
ATOM   1922  CA  THR D  48     -43.032 -32.438 -14.487  1.00 29.51           C
ATOM   1923  C   THR D  48     -41.726 -31.837 -13.979  1.00 33.60           C
ATOM   1924  O   THR D  48     -40.877 -32.565 -13.457  1.00 31.25           O
ATOM   1925  CB  THR D  48     -42.730 -33.300 -15.713  1.00 33.12           C
ATOM   1926  OG1 THR D  48     -42.135 -32.487 -16.741  1.00 30.65           O
ATOM   1927  CG2 THR D  48     -44.000 -33.981 -16.235  1.00 31.04           C
ATOM   1928  N   SER D  49     -41.547 -30.529 -14.146  1.00 31.78           N
ATOM   1929  CA  SER D  49     -40.461 -29.777 -13.536  1.00 29.00           C
ATOM   1930  C   SER D  49     -41.087 -28.694 -12.668  1.00 28.25           C
```

[2219]

```
ATOM   1931  O   SER D  49     -41.052 -27.510 -13.027  1.00 30.15           O
ATOM   1932  CB  SER D  49     -39.559 -29.177 -14.606  1.00 26.75           C
ATOM   1933  OG  SER D  49     -40.310 -28.307 -15.433  1.00 30.96           O
ATOM   1934  N   PRO D  50     -41.671 -29.070 -11.525  1.00 28.05           N
ATOM   1935  CA  PRO D  50     -42.405 -28.098 -10.705  1.00 28.38           C
ATOM   1936  C   PRO D  50     -41.467 -27.139  -9.996  1.00 32.95           C
ATOM   1937  O   PRO D  50     -40.268 -27.393  -9.860  1.00 28.07           O
ATOM   1938  CB  PRO D  50     -43.152 -28.974  -9.692  1.00 27.88           C
ATOM   1939  CG  PRO D  50     -42.304 -30.184  -9.546  1.00 25.93           C
ATOM   1940  CD  PRO D  50     -41.672 -30.417 -10.911  1.00 30.73           C
ATOM   1941  N   TRP D  51     -42.047 -26.036  -9.511  1.00 32.29           N
ATOM   1942  CA  TRP D  51     -41.255 -24.964  -8.933  1.00 30.12           C
ATOM   1943  C   TRP D  51     -42.011 -24.270  -7.814  1.00 34.14           C
ATOM   1944  O   TRP D  51     -43.237 -24.358  -7.702  1.00 33.44           O
ATOM   1945  CB  TRP D  51     -40.828 -23.952  -9.998  1.00 31.01           C
ATOM   1946  CG  TRP D  51     -41.917 -23.178 -10.740  1.00 33.20           C
ATOM   1947  CD1 TRP D  51     -42.433 -21.960 -10.394  1.00 33.81           C
ATOM   1948  CD2 TRP D  51     -42.565 -23.542 -11.980  1.00 33.02           C
ATOM   1949  NE1 TRP D  51     -43.355 -21.549 -11.322  1.00 30.81           N
ATOM   1950  CE2 TRP D  51     -43.449 -22.494 -12.311  1.00 33.96           C
ATOM   1951  CE3 TRP D  51     -42.476 -24.645 -12.837  1.00 32.26           C
ATOM   1952  CZ2 TRP D  51     -44.252 -22.525 -13.452  1.00 32.85           C
ATOM   1953  CZ3 TRP D  51     -43.257 -24.669 -13.978  1.00 31.85           C
ATOM   1954  CH2 TRP D  51     -44.139 -23.618 -14.274  1.00 34.00           C
ATOM   1955  N   ASN D  52     -41.249 -23.599  -6.959  1.00 35.76           N
ATOM   1956  CA  ASN D  52     -41.817 -22.729  -5.946  1.00 34.71           C
ATOM   1957  C   ASN D  52     -41.727 -21.297  -6.428  1.00 33.55           C
ATOM   1958  O   ASN D  52     -41.013 -20.981  -7.384  1.00 34.29           O
ATOM   1959  CB  ASN D  52     -41.102 -22.886  -4.606  1.00 36.27           C
ATOM   1960  CG  ASN D  52     -41.211 -24.282  -4.058  1.00 40.09           C
ATOM   1961  OD1 ASN D  52     -42.265 -24.920  -4.151  1.00 37.75           O
ATOM   1962  ND2 ASN D  52     -40.115 -24.777  -3.482  1.00 37.73           N
ATOM   1963  N   LEU D  53     -42.480 -20.429  -5.757  1.00 37.08           N
ATOM   1964  CA  LEU D  53     -42.575 -19.026  -6.130  1.00 39.98           C
ATOM   1965  C   LEU D  53     -42.012 -18.169  -5.010  1.00 38.59           C
ATOM   1966  O   LEU D  53     -42.442 -18.278  -3.859  1.00 38.29           O
ATOM   1967  CB  LEU D  53     -44.018 -18.644  -6.442  1.00 37.94           C
ATOM   1968  CG  LEU D  53     -44.363 -19.095  -7.861  1.00 40.04           C
ATOM   1969  CD1 LEU D  53     -45.796 -18.800  -8.188  1.00 43.89           C
ATOM   1970  CD2 LEU D  53     -43.432 -18.425  -8.868  1.00 37.96           C
ATOM   1971  N   HIS D  54     -41.040 -17.335  -5.350  1.00 38.08           N
ATOM   1972  CA  HIS D  54     -40.419 -16.428  -4.404  1.00 40.21           C
ATOM   1973  C   HIS D  54     -40.929 -15.009  -4.637  1.00 43.00           C
ATOM   1974  O   HIS D  54     -40.890 -14.500  -5.765  1.00 38.78           O
ATOM   1975  CB  HIS D  54     -38.900 -16.474  -4.538  1.00 40.44           C
ATOM   1976  CG  HIS D  54     -38.196 -15.446  -3.712  1.00 46.13           C
ATOM   1977  ND1 HIS D  54     -38.369 -15.343  -2.347  1.00 44.50           N
ATOM   1978  CD2 HIS D  54     -37.326 -14.469  -4.058  1.00 46.83           C
ATOM   1979  CE1 HIS D  54     -37.627 -14.351  -1.888  1.00 51.84           C
ATOM   1980  NE2 HIS D  54     -36.983 -13.806  -2.905  1.00 49.64           N
ATOM   1981  N   ARG D  55     -41.404 -14.383  -3.568  1.00 45.91           N
ATOM   1982  CA  ARG D  55     -41.858 -12.997  -3.607  1.00 48.35           C
ATOM   1983  C   ARG D  55     -40.634 -12.091  -3.520  1.00 49.05           C
ATOM   1984  O   ARG D  55     -39.975 -12.018  -2.480  1.00 50.34           O
ATOM   1985  CB  ARG D  55     -42.839 -12.735  -2.466  1.00 50.18           C
ATOM   1986  CG  ARG D  55     -43.559 -11.385  -2.514  1.00 59.15           C
ATOM   1987  CD  ARG D  55     -44.482 -11.215  -1.309  1.00 59.61           C
ATOM   1988  NE  ARG D  55     -45.421 -10.107  -1.458  1.00 65.75           N
ATOM   1989  CZ  ARG D  55     -45.160  -8.846  -1.120  1.00 67.03           C
ATOM   1990  NH1 ARG D  55     -46.085  -7.909  -1.290  1.00 68.85           N
ATOM   1991  NH2 ARG D  55     -43.978  -8.513  -0.619  1.00 63.69           N
ATOM   1992  N   ASN D  56     -40.303 -11.431  -4.620  1.00 51.23           N
ATOM   1993  CA  ASN D  56     -39.190 -10.490  -4.667  1.00 52.85           C
ATOM   1994  C   ASN D  56     -39.778  -9.078  -4.620  1.00 56.65           C
ATOM   1995  O   ASN D  56     -40.330  -8.593  -5.612  1.00 56.33           O
ATOM   1996  CB  ASN D  56     -38.346 -10.724  -5.920  1.00 50.05           C
ATOM   1997  CG  ASN D  56     -37.192  -9.736  -6.057  1.00 57.77           C
ATOM   1998  OD1 ASN D  56     -37.347  -8.537  -5.831  1.00 58.62           O
```

[2220]

```
ATOM   1999  ND2 ASN D  56     -36.027 -10.244  -6.442  1.00 63.89           N
ATOM   2000  N   GLU D  57     -39.658  -8.423  -3.469  1.00 59.77           N
ATOM   2001  CA  GLU D  57     -40.214  -7.092  -3.265  1.00 59.71           C
ATOM   2002  C   GLU D  57     -39.122  -6.039  -3.368  1.00 66.34           C
ATOM   2003  O   GLU D  57     -38.021  -6.210  -2.835  1.00 66.56           O
ATOM   2004  CB  GLU D  57     -40.901  -6.978  -1.904  1.00 58.83           C
ATOM   2005  N   ASP D  58     -39.434  -4.954  -4.065  1.00 67.82           N
ATOM   2006  CA  ASP D  58     -38.544  -3.808  -4.161  1.00 70.43           C
ATOM   2007  C   ASP D  58     -39.388  -2.561  -4.379  1.00 73.87           C
ATOM   2008  O   ASP D  58     -39.939  -2.358  -5.470  1.00 73.64           O
ATOM   2009  CB  ASP D  58     -37.528  -3.980  -5.290  1.00 68.76           C
ATOM   2010  CG  ASP D  58     -36.461  -2.904  -5.272  1.00 76.25           C
ATOM   2011  OD1 ASP D  58     -36.493  -2.064  -4.345  1.00 78.32           O
ATOM   2012  OD2 ASP D  58     -35.596  -2.895  -6.179  1.00 76.87           O
ATOM   2013  N   PRO D  59     -39.542  -1.722  -3.355  1.00 76.17           N
ATOM   2014  CA  PRO D  59     -40.341  -0.501  -3.535  1.00 77.78           C
ATOM   2015  C   PRO D  59     -39.669   0.517  -4.434  1.00 78.68           C
ATOM   2016  O   PRO D  59     -40.367   1.293  -5.098  1.00 82.34           O
ATOM   2017  CB  PRO D  59     -40.510   0.021  -2.102  1.00 79.22           C
ATOM   2018  CG  PRO D  59     -40.256  -1.196  -1.231  1.00 80.59           C
ATOM   2019  CD  PRO D  59     -39.196  -1.958  -1.946  1.00 76.25           C
ATOM   2020  N   ALA D  60     -38.331   0.528  -4.488  1.00 75.50           N
ATOM   2021  CA  ALA D  60     -37.574   1.354  -5.428  1.00 80.98           C
ATOM   2022  C   ALA D  60     -37.677   0.856  -6.873  1.00 80.61           C
ATOM   2023  O   ALA D  60     -36.896   1.326  -7.718  1.00 78.12           O
ATOM   2024  CB  ALA D  60     -36.104   1.420  -5.005  1.00 78.19           C
ATOM   2025  N   ARG D  61     -38.606  -0.061  -7.153  1.00 74.09           N
ATOM   2026  CA  ARG D  61     -38.745  -0.679  -8.461  1.00 69.09           C
ATOM   2027  C   ARG D  61     -40.220  -0.758  -8.818  1.00 63.28           C
ATOM   2028  O   ARG D  61     -41.070  -0.937  -7.946  1.00 63.65           O
ATOM   2029  CB  ARG D  61     -38.122  -2.089  -8.488  1.00 69.38           C
ATOM   2030  CG  ARG D  61     -38.036  -2.710  -9.877  1.00 66.63           C
ATOM   2031  CD  ARG D  61     -38.565  -4.143  -9.926  1.00 64.28           C
ATOM   2032  NE  ARG D  61     -37.718  -5.099  -9.220  1.00 62.02           N
ATOM   2033  CZ  ARG D  61     -38.140  -5.916  -8.260  1.00 59.47           C
ATOM   2034  NH1 ARG D  61     -37.282  -6.746  -7.682  1.00 58.55           N
ATOM   2035  NH2 ARG D  61     -39.412  -5.910  -7.879  1.00 58.42           N
ATOM   2036  N   TYR D  62     -40.518  -0.615 -10.108  1.00 61.32           N
ATOM   2037  CA  TYR D  62     -41.866  -0.842 -10.614  1.00 62.59           C
ATOM   2038  C   TYR D  62     -41.818  -1.854 -11.751  1.00 62.68           C
ATOM   2039  O   TYR D  62     -41.154  -1.597 -12.769  1.00 61.87           O
ATOM   2040  CB  TYR D  62     -42.520   0.451 -11.090  1.00 61.86           C
ATOM   2041  CG  TYR D  62     -43.925   0.222 -11.587  1.00 63.26           C
ATOM   2042  CD1 TYR D  62     -45.001   0.208 -10.706  1.00 69.95           C
ATOM   2043  CD2 TYR D  62     -44.176   0.000 -12.932  1.00 62.65           C
ATOM   2044  CE1 TYR D  62     -46.292  -0.011 -11.157  1.00 71.98           C
ATOM   2045  CE2 TYR D  62     -45.457  -0.224 -13.391  1.00 69.01           C
ATOM   2046  CZ  TYR D  62     -46.510  -0.228 -12.504  1.00 74.46           C
ATOM   2047  OH  TYR D  62     -47.784  -0.454 -12.975  1.00 80.30           O
ATOM   2048  N   PRO D  63     -42.524  -2.995 -11.661  1.00 60.45           N
ATOM   2049  CA  PRO D  63     -43.422  -3.383 -10.563  1.00 60.46           C
ATOM   2050  C   PRO D  63     -42.693  -3.644  -9.251  1.00 60.64           C
ATOM   2051  O   PRO D  63     -41.523  -4.014  -9.256  1.00 59.93           O
ATOM   2052  CB  PRO D  63     -44.080  -4.667 -11.080  1.00 56.94           C
ATOM   2053  CG  PRO D  63     -43.136  -5.197 -12.095  1.00 56.77           C
ATOM   2054  CD  PRO D  63     -42.490  -4.006 -12.731  1.00 58.10           C
ATOM   2055  N   SER D  64     -43.386  -3.427  -8.135  1.00 58.56           N
ATOM   2056  CA  SER D  64     -42.755  -3.577  -6.826  1.00 60.78           C
ATOM   2057  C   SER D  64     -42.446  -5.038  -6.518  1.00 57.82           C
ATOM   2058  O   SER D  64     -41.392  -5.351  -5.952  1.00 59.41           O
ATOM   2059  CB  SER D  64     -43.668  -2.989  -5.752  1.00 63.04           C
ATOM   2060  OG  SER D  64     -45.003  -3.452  -5.940  1.00 61.57           O
ATOM   2061  N   VAL D  65     -43.356  -5.939  -6.878  1.00 57.44           N
ATOM   2062  CA  VAL D  65     -43.257  -7.356  -6.557  1.00 55.88           C
ATOM   2063  C   VAL D  65     -43.034  -8.119  -7.853  1.00 53.77           C
ATOM   2064  O   VAL D  65     -43.817  -7.997  -8.806  1.00 46.38           O
ATOM   2065  CB  VAL D  65     -44.512  -7.866  -5.828  1.00 54.81           C
ATOM   2066  N   ILE D  66     -41.955  -8.889  -7.888  1.00 53.09           N
```

[2221]

```
ATOM   2067  CA  ILE D  66     -41.691  -9.862  -8.939  1.00 51.06           C
ATOM   2068  C   ILE D  66     -41.744 -11.239  -8.298  1.00 49.06           C
ATOM   2069  O   ILE D  66     -41.205 -11.443  -7.204  1.00 47.20           O
ATOM   2070  CB  ILE D  66     -40.324  -9.618  -9.614  1.00 51.83           C
ATOM   2071  CG1 ILE D  66     -40.303  -8.254 -10.308  1.00 56.07           C
ATOM   2072  CG2 ILE D  66     -40.003 -10.726 -10.616  1.00 48.92           C
ATOM   2073  CD1 ILE D  66     -41.244  -8.169 -11.491  1.00 57.88           C
ATOM   2074  N   TRP D  67     -42.389 -12.182  -8.972  1.00 45.62           N
ATOM   2075  CA  TRP D  67     -42.421 -13.566  -8.522  1.00 45.21           C
ATOM   2076  C   TRP D  67     -41.346 -14.345  -9.267  1.00 41.93           C
ATOM   2077  O   TRP D  67     -41.319 -14.346 -10.502  1.00 43.66           O
ATOM   2078  CB  TRP D  67     -43.810 -14.165  -8.733  1.00 44.72           C
ATOM   2079  CG  TRP D  67     -44.827 -13.462  -7.912  1.00 49.36           C
ATOM   2080  CD1 TRP D  67     -45.627 -12.411  -8.297  1.00 52.15           C
ATOM   2081  CD2 TRP D  67     -45.132 -13.716  -6.542  1.00 48.50           C
ATOM   2082  NE1 TRP D  67     -46.424 -12.012  -7.247  1.00 50.22           N
ATOM   2083  CE2 TRP D  67     -46.141 -12.796  -6.158  1.00 51.01           C
ATOM   2084  CE3 TRP D  67     -44.659 -14.634  -5.602  1.00 45.90           C
ATOM   2085  CZ2 TRP D  67     -46.684 -12.778  -4.876  1.00 50.88           C
ATOM   2086  CZ3 TRP D  67     -45.200 -14.618  -4.327  1.00 48.63           C
ATOM   2087  CH2 TRP D  67     -46.201 -13.693  -3.974  1.00 55.70           C
ATOM   2088  N   GLU D  68     -40.443 -14.974  -8.520  1.00 40.10           N
ATOM   2089  CA  GLU D  68     -39.296 -15.672  -9.097  1.00 40.77           C
ATOM   2090  C   GLU D  68     -39.431 -17.174  -8.871  1.00 37.28           C
ATOM   2091  O   GLU D  68     -39.644 -17.626  -7.740  1.00 35.20           O
ATOM   2092  CB  GLU D  68     -37.974 -15.151  -8.509  1.00 45.61           C
ATOM   2093  CG  GLU D  68     -37.581 -13.757  -9.010  1.00 49.40           C
ATOM   2094  CD  GLU D  68     -36.337 -13.176  -8.333  1.00 59.84           C
ATOM   2095  OE1 GLU D  68     -36.025 -13.565  -7.187  1.00 60.69           O
ATOM   2096  OE2 GLU D  68     -35.672 -12.314  -8.952  1.00 57.31           O
ATOM   2097  N   ALA D  69     -39.296 -17.936  -9.949  1.00 36.94           N
ATOM   2098  CA  ALA D  69     -39.428 -19.382  -9.895  1.00 40.54           C
ATOM   2099  C   ALA D  69     -38.147 -20.035  -9.381  1.00 38.44           C
ATOM   2100  O   ALA D  69     -37.044 -19.684  -9.809  1.00 33.92           O
ATOM   2101  CB  ALA D  69     -39.764 -19.920 -11.288  1.00 32.95           C
ATOM   2102  N   LYS D  70     -38.309 -21.013  -8.485  1.00 36.09           N
ATOM   2103  CA  LYS D  70     -37.226 -21.881  -8.024  1.00 35.52           C
ATOM   2104  C   LYS D  70     -37.622 -23.330  -8.262  1.00 30.86           C
ATOM   2105  O   LYS D  70     -38.580 -23.806  -7.647  1.00 31.12           O
ATOM   2106  CB  LYS D  70     -36.962 -21.717  -6.527  1.00 34.91           C
ATOM   2107  CG  LYS D  70     -36.709 -20.335  -5.965  1.00 38.38           C
ATOM   2108  CD  LYS D  70     -36.850 -20.478  -4.453  1.00 34.66           C
ATOM   2109  CE  LYS D  70     -36.920 -19.162  -3.814  1.00 39.15           C
ATOM   2110  NZ  LYS D  70     -35.898 -18.345  -4.456  1.00 39.95           N
ATOM   2111  N   CYS D  71     -36.869 -24.046  -9.096  1.00 29.18           N
ATOM   2112  CA  CYS D  71     -37.217 -25.438  -9.368  1.00 32.77           C
ATOM   2113  C   CYS D  71     -37.106 -26.252  -8.084  1.00 36.29           C
ATOM   2114  O   CYS D  71     -36.200 -26.037  -7.273  1.00 35.81           O
ATOM   2115  CB  CYS D  71     -36.309 -26.035 -10.456  1.00 29.12           C
ATOM   2116  SG  CYS D  71     -36.223 -25.117 -12.021  1.00 41.10           S
ATOM   2117  N   ARG D  72     -38.051 -27.179  -7.885  1.00 31.29           N
ATOM   2118  CA  ARG D  72     -38.095 -27.932  -6.633  1.00 31.32           C
ATOM   2119  C   ARG D  72     -37.056 -29.046  -6.570  1.00 32.82           C
ATOM   2120  O   ARG D  72     -36.650 -29.452  -5.474  1.00 37.38           O
ATOM   2121  CB  ARG D  72     -39.476 -28.546  -6.427  1.00 30.60           C
ATOM   2122  CG  ARG D  72     -40.538 -27.557  -6.046  1.00 34.04           C
ATOM   2123  CD  ARG D  72     -41.856 -28.239  -5.820  1.00 30.80           C
ATOM   2124  NE  ARG D  72     -42.953 -27.276  -5.840  1.00 32.05           N
ATOM   2125  CZ  ARG D  72     -44.225 -27.619  -6.021  1.00 35.84           C
ATOM   2126  NH1 ARG D  72     -44.543 -28.897  -6.196  1.00 31.10           N
ATOM   2127  NH2 ARG D  72     -45.171 -26.691  -6.027  1.00 34.63           N
ATOM   2128  N   HIS D  73     -36.651 -29.578  -7.714  1.00 29.99           N
ATOM   2129  CA  HIS D  73     -35.829 -30.772  -7.759  1.00 30.48           C
ATOM   2130  C   HIS D  73     -34.815 -30.611  -8.866  1.00 30.89           C
ATOM   2131  O   HIS D  73     -34.995 -29.799  -9.775  1.00 31.51           O
ATOM   2132  CB  HIS D  73     -36.636 -32.045  -8.053  1.00 29.16           C
ATOM   2133  CG  HIS D  73     -37.892 -32.172  -7.269  1.00 30.25           C
ATOM   2134  ND1 HIS D  73     -37.901 -32.467  -5.925  1.00 33.35           N
```

[2222]

```
ATOM   2135  CD2 HIS D  73     -39.190 -32.067  -7.644  1.00 35.42           C
ATOM   2136  CE1 HIS D  73     -39.149 -32.538  -5.503  1.00 36.30           C
ATOM   2137  NE2 HIS D  73     -39.951 -32.295  -6.525  1.00 38.71           N
ATOM   2138  N   LEU D  74     -33.762 -31.431  -8.793  1.00 30.46           N
ATOM   2139  CA  LEU D  74     -32.843 -31.565  -9.913  1.00 29.83           C
ATOM   2140  C   LEU D  74     -33.473 -32.378 -11.032  1.00 26.01           C
ATOM   2141  O   LEU D  74     -33.381 -32.004 -12.201  1.00 29.73           O
ATOM   2142  CB  LEU D  74     -31.533 -32.228  -9.461  1.00 24.39           C
ATOM   2143  CG  LEU D  74     -30.492 -32.473 -10.562  1.00 29.73           C
ATOM   2144  CD1 LEU D  74     -30.132 -31.199 -11.285  1.00 30.19           C
ATOM   2145  CD2 LEU D  74     -29.203 -33.109  -9.979  1.00 33.58           C
ATOM   2146  N   GLY D  75     -34.075 -33.514 -10.698  1.00 24.36           N
ATOM   2147  CA  GLY D  75     -34.708 -34.354 -11.697  1.00 29.69           C
ATOM   2148  C   GLY D  75     -36.093 -33.834 -12.057  1.00 32.15           C
ATOM   2149  O   GLY D  75     -36.516 -32.754 -11.637  1.00 26.87           O
ATOM   2150  N   CYS D  76     -36.814 -34.646 -12.847  1.00 36.01           N
ATOM   2151  CA  CYS D  76     -38.191 -34.382 -13.258  1.00 30.38           C
ATOM   2152  C   CYS D  76     -39.096 -35.537 -12.842  1.00 34.78           C
ATOM   2153  O   CYS D  76     -38.676 -36.700 -12.797  1.00 33.43           O
ATOM   2154  CB  CYS D  76     -38.317 -34.187 -14.790  1.00 26.81           C
ATOM   2155  SG  CYS D  76     -37.238 -32.935 -15.564  1.00 30.50           S
ATOM   2156  N   ILE D  77     -40.355 -35.200 -12.551  1.00 36.15           N
ATOM   2157  CA  ILE D  77     -41.365 -36.190 -12.184  1.00 33.03           C
ATOM   2158  C   ILE D  77     -41.681 -37.073 -13.381  1.00 31.98           C
ATOM   2159  O   ILE D  77     -41.983 -36.575 -14.470  1.00 38.11           O
ATOM   2160  CB  ILE D  77     -42.628 -35.483 -11.688  1.00 34.93           C
ATOM   2161  CG1 ILE D  77     -42.246 -34.448 -10.633  1.00 30.83           C
ATOM   2162  CG2 ILE D  77     -43.622 -36.495 -11.139  1.00 36.15           C
ATOM   2163  CD1 ILE D  77     -41.836 -35.057  -9.338  1.00 36.20           C
ATOM   2164  N   ASN D  78     -41.614 -38.390 -13.191  1.00 33.09           N
ATOM   2165  CA  ASN D  78     -41.924 -39.304 -14.279  1.00 38.25           C
ATOM   2166  C   ASN D  78     -43.368 -39.803 -14.162  1.00 38.79           C
ATOM   2167  O   ASN D  78     -44.144 -39.358 -13.301  1.00 36.08           O
ATOM   2168  CB  ASN D  78     -40.921 -40.465 -14.323  1.00 35.59           C
ATOM   2169  CG  ASN D  78     -40.995 -41.356 -13.104  1.00 37.39           C
ATOM   2170  OD1 ASN D  78     -41.947 -41.307 -12.326  1.00 34.91           O
ATOM   2171  ND2 ASN D  78     -39.964 -42.180 -12.921  1.00 37.93           N
ATOM   2172  N   ALA D  79     -43.723 -40.769 -15.022  1.00 39.83           N
ATOM   2173  CA  ALA D  79     -45.098 -41.245 -15.118  1.00 41.92           C
ATOM   2174  C   ALA D  79     -45.541 -42.029 -13.889  1.00 43.45           C
ATOM   2175  O   ALA D  79     -46.736 -42.304 -13.758  1.00 42.54           O
ATOM   2176  CB  ALA D  79     -45.272 -42.100 -16.376  1.00 37.05           C
ATOM   2177  N   ASP D  80     -44.623 -42.402 -12.999  1.00 41.13           N
ATOM   2178  CA  ASP D  80     -44.992 -43.002 -11.722  1.00 40.66           C
ATOM   2179  C   ASP D  80     -45.100 -41.984 -10.596  1.00 40.37           C
ATOM   2180  O   ASP D  80     -45.276 -42.383  -9.444  1.00 41.58           O
ATOM   2181  CB  ASP D  80     -43.978 -44.074 -11.306  1.00 43.99           C
ATOM   2182  CG  ASP D  80     -43.815 -45.173 -12.342  1.00 44.82           C
ATOM   2183  OD1 ASP D  80     -44.820 -45.639 -12.894  1.00 44.24           O
ATOM   2184  OD2 ASP D  80     -42.663 -45.573 -12.609  1.00 56.78           O
ATOM   2185  N   GLY D  81     -44.976 -40.691 -10.887  1.00 37.10           N
ATOM   2186  CA  GLY D  81     -44.982 -39.700  -9.833  1.00 34.46           C
ATOM   2187  C   GLY D  81     -43.666 -39.522  -9.103  1.00 41.84           C
ATOM   2188  O   GLY D  81     -43.638 -38.815  -8.091  1.00 41.90           O
ATOM   2189  N   ASN D  82     -42.572 -40.122  -9.582  1.00 36.65           N
ATOM   2190  CA  ASN D  82     -41.297 -40.121  -8.870  1.00 40.79           C
ATOM   2191  C   ASN D  82     -40.293 -39.173  -9.508  1.00 34.50           C
ATOM   2192  O   ASN D  82     -40.267 -38.996 -10.729  1.00 35.49           O
ATOM   2193  CB  ASN D  82     -40.676 -41.520  -8.833  1.00 39.76           C
ATOM   2194  CG  ASN D  82     -41.526 -42.509  -8.082  1.00 45.93           C
ATOM   2195  OD1 ASN D  82     -42.148 -42.174  -7.071  1.00 47.10           O
ATOM   2196  ND2 ASN D  82     -41.577 -43.734  -8.582  1.00 41.75           N
ATOM   2197  N   VAL D  83     -39.438 -38.582  -8.669  1.00 38.08           N
ATOM   2198  CA  VAL D  83     -38.356 -37.764  -9.197  1.00 36.38           C
ATOM   2199  C   VAL D  83     -37.398 -38.649  -9.979  1.00 33.52           C
ATOM   2200  O   VAL D  83     -36.962 -39.697  -9.498  1.00 36.98           O
ATOM   2201  CB  VAL D  83     -37.651 -37.013  -8.063  1.00 42.44           C
ATOM   2202  CG1 VAL D  83     -36.402 -36.334  -8.596  1.00 32.47           C
```

[2223]

```
ATOM   2203  CG2 VAL D  83     -38.613 -35.990  -7.446  1.00 36.67           C
ATOM   2204  N   ASP D  84     -37.072 -38.233 -11.197  1.00 35.39           N
ATOM   2205  CA  ASP D  84     -36.363 -39.069 -12.157  1.00 34.10           C
ATOM   2206  C   ASP D  84     -35.123 -38.325 -12.651  1.00 33.43           C
ATOM   2207  O   ASP D  84     -35.236 -37.261 -13.270  1.00 33.97           O
ATOM   2208  CB  ASP D  84     -37.310 -39.426 -13.309  1.00 31.21           C
ATOM   2209  CG  ASP D  84     -36.763 -40.466 -14.235  1.00 36.37           C
ATOM   2210  OD1 ASP D  84     -35.558 -40.400 -14.596  1.00 34.43           O
ATOM   2211  OD2 ASP D  84     -37.561 -41.353 -14.625  1.00 39.83           O
ATOM   2212  N   TYR D  85     -33.943 -38.893 -12.412  1.00 32.59           N
ATOM   2213  CA  TYR D  85     -32.698 -38.196 -12.727  1.00 28.18           C
ATOM   2214  C   TYR D  85     -32.187 -38.501 -14.131  1.00 29.93           C
ATOM   2215  O   TYR D  85     -31.058 -38.135 -14.469  1.00 30.00           O
ATOM   2216  CB  TYR D  85     -31.649 -38.494 -11.645  1.00 27.92           C
ATOM   2217  CG  TYR D  85     -32.074 -37.895 -10.307  1.00 31.23           C
ATOM   2218  CD1 TYR D  85     -31.802 -36.559  -9.991  1.00 33.23           C
ATOM   2219  CD2 TYR D  85     -32.799 -38.644  -9.389  1.00 33.25           C
ATOM   2220  CE1 TYR D  85     -32.214 -36.007  -8.778  1.00 33.93           C
ATOM   2221  CE2 TYR D  85     -33.212 -38.111  -8.190  1.00 33.35           C
ATOM   2222  CZ  TYR D  85     -32.923 -36.791  -7.888  1.00 39.17           C
ATOM   2223  OH  TYR D  85     -33.351 -36.270  -6.688  1.00 41.92           O
ATOM   2224  N   HIS D  86     -33.013 -39.110 -14.979  1.00 30.10           N
ATOM   2225  CA  HIS D  86     -32.713 -39.162 -16.403  1.00 28.29           C
ATOM   2226  C   HIS D  86     -32.980 -37.844 -17.109  1.00 26.18           C
ATOM   2227  O   HIS D  86     -32.724 -37.744 -18.309  1.00 31.48           O
ATOM   2228  CB  HIS D  86     -33.518 -40.270 -17.080  1.00 27.75           C
ATOM   2229  CG  HIS D  86     -33.146 -41.651 -16.631  1.00 28.00           C
ATOM   2230  ND1 HIS D  86     -33.812 -42.314 -15.622  1.00 30.82           N
ATOM   2231  CD2 HIS D  86     -32.184 -42.500 -17.065  1.00 30.46           C
ATOM   2232  CE1 HIS D  86     -33.280 -43.512 -15.454  1.00 28.62           C
ATOM   2233  NE2 HIS D  86     -32.291 -43.651 -16.319  1.00 33.22           N
ATOM   2234  N   MET D  87     -33.506 -36.848 -16.406  1.00 25.91           N
ATOM   2235  CA  MET D  87     -33.771 -35.526 -16.957  1.00 30.90           C
ATOM   2236  C   MET D  87     -33.546 -34.518 -15.839  1.00 27.11           C
ATOM   2237  O   MET D  87     -33.478 -34.881 -14.669  1.00 29.84           O
ATOM   2238  CB  MET D  87     -35.211 -35.392 -17.495  1.00 30.49           C
ATOM   2239  CG  MET D  87     -35.651 -36.372 -18.574  1.00 33.47           C
ATOM   2240  SD  MET D  87     -36.259 -37.943 -17.887  1.00 54.56           S
ATOM   2241  CE  MET D  87     -37.688 -37.448 -16.915  1.00 38.59           C
ATOM   2242  N   ASN D  88     -33.475 -33.238 -16.192  1.00 28.59           N
ATOM   2243  CA  ASN D  88     -33.310 -32.198 -15.183  1.00 28.71           C
ATOM   2244  C   ASN D  88     -34.410 -31.149 -15.312  1.00 27.40           C
ATOM   2245  O   ASN D  88     -34.734 -30.718 -16.425  1.00 28.43           O
ATOM   2246  CB  ASN D  88     -31.944 -31.465 -15.287  1.00 26.31           C
ATOM   2247  CG  ASN D  88     -30.722 -32.314 -14.847  1.00 31.32           C
ATOM   2248  OD1 ASN D  88     -29.576 -31.847 -14.987  1.00 32.77           O
ATOM   2249  ND2 ASN D  88     -30.948 -33.526 -14.317  1.00 24.76           N
ATOM   2250  N   SER D  89     -34.962 -30.734 -14.165  1.00 25.72           N
ATOM   2251  CA  SER D  89     -35.655 -29.450 -14.054  1.00 29.53           C
ATOM   2252  C   SER D  89     -34.657 -28.300 -14.192  1.00 31.65           C
ATOM   2253  O   SER D  89     -33.651 -28.254 -13.471  1.00 35.47           O
ATOM   2254  CB  SER D  89     -36.372 -29.320 -12.707  1.00 26.05           C
ATOM   2255  OG  SER D  89     -37.241 -30.405 -12.428  1.00 30.24           O
ATOM   2256  N   VAL D  90     -34.946 -27.360 -15.092  1.00 30.86           N
ATOM   2257  CA  VAL D  90     -34.109 -26.172 -15.296  1.00 31.68           C
ATOM   2258  C   VAL D  90     -34.993 -24.932 -15.334  1.00 36.74           C
ATOM   2259  O   VAL D  90     -36.124 -24.995 -15.844  1.00 30.63           O
ATOM   2260  CB  VAL D  90     -33.272 -26.278 -16.582  1.00 32.90           C
ATOM   2261  CG1 VAL D  90     -32.254 -27.404 -16.464  1.00 33.13           C
ATOM   2262  CG2 VAL D  90     -34.161 -26.506 -17.797  1.00 33.23           C
ATOM   2263  N   PRO D  91     -34.538 -23.794 -14.802  1.00 37.06           N
ATOM   2264  CA  PRO D  91     -35.349 -22.574 -14.872  1.00 36.58           C
ATOM   2265  C   PRO D  91     -35.246 -21.924 -16.243  1.00 38.15           C
ATOM   2266  O   PRO D  91     -34.244 -22.044 -16.944  1.00 41.50           O
ATOM   2267  CB  PRO D  91     -34.742 -21.670 -13.787  1.00 32.70           C
ATOM   2268  CG  PRO D  91     -33.302 -22.106 -13.710  1.00 39.16           C
ATOM   2269  CD  PRO D  91     -33.297 -23.604 -14.021  1.00 34.97           C
ATOM   2270  N   ILE D  92     -36.312 -21.247 -16.635  1.00 35.65           N
```

[2224]

```
ATOM   2271  CA  ILE D  92     -36.287 -20.388 -17.809  1.00 40.58           C
ATOM   2272  C   ILE D  92     -36.028 -18.968 -17.315  1.00 45.34           C
ATOM   2273  O   ILE D  92     -36.898 -18.347 -16.692  1.00 42.64           O
ATOM   2274  CB  ILE D  92     -37.590 -20.481 -18.604  1.00 40.52           C
ATOM   2275  CG1 ILE D  92     -37.798 -21.917 -19.092  1.00 41.51           C
ATOM   2276  CG2 ILE D  92     -37.549 -19.505 -19.760  1.00 42.62           C
ATOM   2277  CD1 ILE D  92     -39.268 -22.331 -19.154  1.00 41.66           C
ATOM   2278  N   GLN D  93     -34.819 -18.471 -17.560  1.00 42.40           N
ATOM   2279  CA  GLN D  93     -34.371 -17.171 -17.080  1.00 47.06           C
ATOM   2280  C   GLN D  93     -34.488 -16.155 -18.204  1.00 50.90           C
ATOM   2281  O   GLN D  93     -33.823 -16.302 -19.240  1.00 50.07           O
ATOM   2282  CB  GLN D  93     -32.922 -17.230 -16.610  1.00 43.67           C
ATOM   2283  CG  GLN D  93     -32.639 -18.093 -15.418  1.00 43.86           C
ATOM   2284  CD  GLN D  93     -31.161 -18.035 -15.065  1.00 49.18           C
ATOM   2285  OE1 GLN D  93     -30.306 -18.212 -15.932  1.00 50.77           O
ATOM   2286  NE2 GLN D  93     -30.853 -17.744 -13.801  1.00 50.29           N
ATOM   2287  N   GLN D  94     -35.290 -15.107 -17.980  1.00 50.38           N
ATOM   2288  CA  GLN D  94     -35.541 -14.071 -18.974  1.00 49.81           C
ATOM   2289  C   GLN D  94     -35.225 -12.689 -18.421  1.00 48.21           C
ATOM   2290  O   GLN D  94     -35.484 -12.400 -17.247  1.00 46.68           O
ATOM   2291  CB  GLN D  94     -36.992 -14.113 -19.448  1.00 54.10           C
ATOM   2292  CG  GLN D  94     -37.418 -15.514 -19.847  1.00 60.25           C
ATOM   2293  CD  GLN D  94     -38.165 -15.549 -21.157  1.00 59.92           C
ATOM   2294  OE1 GLN D  94     -38.936 -14.641 -21.467  1.00 67.53           O
ATOM   2295  NE2 GLN D  94     -37.935 -16.600 -21.942  1.00 53.86           N
ATOM   2296  N   GLU D  95     -34.650 -11.847 -19.280  1.00 44.75           N
ATOM   2297  CA  GLU D  95     -34.508 -10.425 -18.993  1.00 53.04           C
ATOM   2298  C   GLU D  95     -35.832  -9.718 -19.261  1.00 50.91           C
ATOM   2299  O   GLU D  95     -36.406  -9.850 -20.345  1.00 48.82           O
ATOM   2300  CB  GLU D  95     -33.396  -9.810 -19.849  1.00 48.33           C
ATOM   2301  N   ILE D  96     -36.327  -8.975 -18.272  1.00 49.85           N
ATOM   2302  CA  ILE D  96     -37.586  -8.256 -18.422  1.00 52.94           C
ATOM   2303  C   ILE D  96     -37.390  -6.790 -18.040  1.00 57.51           C
ATOM   2304  O   ILE D  96     -36.474  -6.433 -17.294  1.00 57.78           O
ATOM   2305  CB  ILE D  96     -38.716  -8.886 -17.582  1.00 56.43           C
ATOM   2306  CG1 ILE D  96     -38.644  -8.409 -16.135  1.00 54.07           C
ATOM   2307  CG2 ILE D  96     -38.639 -10.411 -17.637  1.00 55.52           C
ATOM   2308  CD1 ILE D  96     -39.847  -8.830 -15.301  1.00 53.35           C
ATOM   2309  N   LEU D  97     -38.273  -5.938 -18.572  1.00 60.63           N
ATOM   2310  CA  LEU D  97     -38.232  -4.504 -18.293  1.00 60.20           C
ATOM   2311  C   LEU D  97     -38.823  -4.194 -16.926  1.00 62.68           C
ATOM   2312  O   LEU D  97     -39.862  -4.740 -16.544  1.00 65.31           O
ATOM   2313  CB  LEU D  97     -39.010  -3.711 -19.345  1.00 58.29           C
ATOM   2314  CG  LEU D  97     -38.406  -3.446 -20.724  1.00 61.46           C
ATOM   2315  CD1 LEU D  97     -39.415  -2.724 -21.586  1.00 53.56           C
ATOM   2316  CD2 LEU D  97     -37.093  -2.656 -20.631  1.00 57.60           C
ATOM   2317  N   VAL D  98     -38.160  -3.294 -16.198  1.00 59.54           N
ATOM   2318  CA  VAL D  98     -38.673  -2.725 -14.956  1.00 63.57           C
ATOM   2319  C   VAL D  98     -38.332  -1.237 -14.939  1.00 68.26           C
ATOM   2320  O   VAL D  98     -37.627  -0.726 -15.812  1.00 68.10           O
ATOM   2321  CB  VAL D  98     -38.091  -3.416 -13.703  1.00 65.08           C
ATOM   2322  CG1 VAL D  98     -38.399  -4.917 -13.703  1.00 62.08           C
ATOM   2323  CG2 VAL D  98     -36.598  -3.166 -13.618  1.00 60.83           C
ATOM   2324  N   LEU D  99     -38.837  -0.542 -13.919  1.00 64.53           N
ATOM   2325  CA  LEU D  99     -38.521   0.864 -13.675  1.00 66.62           C
ATOM   2326  C   LEU D  99     -37.902   0.965 -12.287  1.00 72.02           C
ATOM   2327  O   LEU D  99     -38.586   0.734 -11.285  1.00 69.40           O
ATOM   2328  CB  LEU D  99     -39.768   1.738 -13.781  1.00 65.06           C
ATOM   2329  CG  LEU D  99     -40.682   1.523 -14.991  1.00 66.34           C
ATOM   2330  CD1 LEU D  99     -41.836   2.514 -14.989  1.00 62.01           C
ATOM   2331  CD2 LEU D  99     -39.899   1.618 -16.289  1.00 67.96           C
ATOM   2332  N   ALA D 100     -36.608   1.297 -12.225  1.00 73.82           N
ATOM   2333  CA  ALA D 100     -35.916   1.406 -10.942  1.00 79.17           C
ATOM   2334  C   ALA D 100     -36.164   2.781 -10.331  1.00 87.16           C
ATOM   2335  O   ALA D 100     -37.293   3.273 -10.371  1.00 87.55           O
ATOM   2336  CB  ALA D 100     -34.416   1.142 -11.102  1.00 74.31           C
ATOM   2337  N   ARG D 101     -35.139   3.397  -9.739  1.00 92.34           N
ATOM   2338  CA  ARG D 101     -35.221   4.782  -9.278  1.00 92.68           C
```

[2225]

```
ATOM   2339  C   ARG D 101     -33.900   5.465  -9.588  1.00 95.85           C
ATOM   2340  O   ARG D 101     -32.851   5.054  -9.077  1.00 95.15           O
ATOM   2341  CB  ARG D 101     -35.554   4.879  -7.785  1.00 91.48           C
ATOM   2342  CG  ARG D 101     -37.026   4.623  -7.481  1.00 88.72           C
ATOM   2343  CD  ARG D 101     -37.422   5.121  -6.103  1.00 90.67           C
ATOM   2344  NE  ARG D 101     -38.633   4.463  -5.621  1.00 90.05           N
ATOM   2345  CZ  ARG D 101     -39.867   4.785  -5.998  1.00 90.59           C
ATOM   2346  NH1 ARG D 101     -40.066   5.761  -6.871  1.00 92.33           N
ATOM   2347  NH2 ARG D 101     -40.905   4.125  -5.504  1.00 88.60           N
ATOM   2348  N   GLU D 102     -33.953   6.506 -10.435  1.00 98.47           N
ATOM   2349  CA  GLU D 102     -32.715   7.088 -10.952  1.00 97.81           C
ATOM   2350  C   GLU D 102     -31.940   7.823  -9.863  1.00 97.27           C
ATOM   2351  O   GLU D 102     -30.725   7.591  -9.737  1.00 98.54           O
ATOM   2352  CB  GLU D 102     -33.019   7.972 -12.167  1.00 94.72           C
ATOM   2353  N   PRO D 103     -32.544   8.699  -9.062  1.00 97.60           N
ATOM   2354  CA  PRO D 103     -31.925   9.055  -7.783  1.00 99.19           C
ATOM   2355  C   PRO D 103     -32.433   8.139  -6.683  1.00 99.03           C
ATOM   2356  O   PRO D 103     -33.652   8.030  -6.473  1.00 99.02           O
ATOM   2357  CB  PRO D 103     -32.363  10.511  -7.567  1.00 93.50           C
ATOM   2358  CG  PRO D 103     -33.647  10.646  -8.334  1.00 90.97           C
ATOM   2359  CD  PRO D 103     -33.695   9.570  -9.382  1.00 95.08           C
ATOM   2360  N   PRO D 104     -31.534   7.441  -5.980  1.00101.12           N
ATOM   2361  CA  PRO D 104     -31.977   6.436  -5.000  1.00101.24           C
ATOM   2362  C   PRO D 104     -32.865   7.034  -3.915  1.00105.86           C
ATOM   2363  O   PRO D 104     -32.610   8.128  -3.406  1.00106.97           O
ATOM   2364  CB  PRO D 104     -30.660   5.903  -4.419  1.00103.41           C
ATOM   2365  CG  PRO D 104     -29.632   6.189  -5.468  1.00103.40           C
ATOM   2366  CD  PRO D 104     -30.066   7.477  -6.114  1.00104.09           C
ATOM   2367  N   HIS D 105     -33.924   6.294  -3.573  1.00106.16           N
ATOM   2368  CA  HIS D 105     -34.944   6.671  -2.596  1.00102.87           C
ATOM   2369  C   HIS D 105     -35.712   7.929  -2.993  1.00102.54           C
ATOM   2370  O   HIS D 105     -36.466   8.471  -2.176  1.00103.77           O
ATOM   2371  CB  HIS D 105     -34.348   6.845  -1.189  1.00 94.12           C
ATOM   2372  N   SER D 106     -35.559   8.403  -4.229  1.00100.21           N
ATOM   2373  CA  SER D 106     -36.232   9.618  -4.674  1.00100.71           C
ATOM   2374  C   SER D 106     -37.288   9.272  -5.714  1.00100.18           C
ATOM   2375  O   SER D 106     -36.938   8.921  -6.853  1.00 98.42           O
ATOM   2376  CB  SER D 106     -35.227  10.619  -5.245  1.00 95.05           C
ATOM   2377  N   PRO D 107     -38.578   9.356  -5.378  1.00 99.60           N
ATOM   2378  CA  PRO D 107     -39.628   8.977  -6.337  1.00 98.56           C
ATOM   2379  C   PRO D 107     -39.899  10.022  -7.411  1.00 97.79           C
ATOM   2380  O   PRO D 107     -41.053  10.213  -7.811  1.00 93.31           O
ATOM   2381  CB  PRO D 107     -40.862   8.780  -5.444  1.00100.07           C
ATOM   2382  CG  PRO D 107     -40.333   8.700  -4.027  1.00100.44           C
ATOM   2383  CD  PRO D 107     -39.112   9.554  -4.021  1.00100.76           C
ATOM   2384  N   ASN D 108     -38.853  10.689  -7.894  1.00 97.74           N
ATOM   2385  CA  ASN D 108     -38.975  11.718  -8.926  1.00 98.13           C
ATOM   2386  C   ASN D 108     -38.496  11.156 -10.262  1.00103.28           C
ATOM   2387  O   ASN D 108     -37.405  11.477 -10.744  1.00101.70           O
ATOM   2388  CB  ASN D 108     -38.184  12.977  -8.526  1.00 89.33           C
ATOM   2389  N   SER D 109     -39.332  10.297 -10.859  1.00102.42           N
ATOM   2390  CA  SER D 109     -39.035   9.628 -12.125  1.00 99.36           C
ATOM   2391  C   SER D 109     -37.806   8.728 -12.005  1.00 99.73           C
ATOM   2392  O   SER D 109     -37.063   8.802 -11.019  1.00100.31           O
ATOM   2393  CB  SER D 109     -38.854  10.656 -13.248  1.00101.48           C
ATOM   2394  N   PHE D 110     -37.569   7.873 -12.997  1.00 97.76           N
ATOM   2395  CA  PHE D 110     -36.587   6.819 -12.790  1.00 96.14           C
ATOM   2396  C   PHE D 110     -36.122   6.227 -14.114  1.00 96.23           C
ATOM   2397  O   PHE D 110     -36.689   6.489 -15.179  1.00 92.33           O
ATOM   2398  CB  PHE D 110     -37.170   5.729 -11.904  1.00 93.68           C
ATOM   2399  N   ARG D 111     -35.087   5.389 -14.011  1.00 93.59           N
ATOM   2400  CA  ARG D 111     -34.441   4.731 -15.137  1.00 87.65           C
ATOM   2401  C   ARG D 111     -35.142   3.422 -15.501  1.00 82.38           C
ATOM   2402  O   ARG D 111     -35.816   2.786 -14.683  1.00 77.52           O
ATOM   2403  CB  ARG D 111     -32.965   4.457 -14.829  1.00 84.19           C
ATOM   2404  N   LEU D 112     -34.957   3.025 -16.755  1.00 76.34           N
ATOM   2405  CA  LEU D 112     -35.570   1.834 -17.326  1.00 71.15           C
ATOM   2406  C   LEU D 112     -34.501   0.750 -17.402  1.00 69.11           C
```

[2226]

```
ATOM   2407  O   LEU D 112     -33.595   0.826 -18.236  1.00 70.46           O
ATOM   2408  CB  LEU D 112     -36.139   2.160 -18.704  1.00 68.02           C
ATOM   2409  CG  LEU D 112     -36.805   1.089 -19.557  1.00 72.00           C
ATOM   2410  CD1 LEU D 112     -38.293   1.346 -19.642  1.00 65.64           C
ATOM   2411  CD2 LEU D 112     -36.187   1.076 -20.946  1.00 75.06           C
ATOM   2412  N   GLU D 113     -34.596  -0.250 -16.529  1.00 66.19           N
ATOM   2413  CA  GLU D 113     -33.578  -1.287 -16.418  1.00 61.96           C
ATOM   2414  C   GLU D 113     -34.117  -2.644 -16.867  1.00 62.93           C
ATOM   2415  O   GLU D 113     -35.326  -2.851 -17.008  1.00 61.44           O
ATOM   2416  CB  GLU D 113     -33.047  -1.382 -14.981  1.00 57.90           C
ATOM   2417  N   LYS D 114     -33.188  -3.570 -17.100  1.00 60.80           N
ATOM   2418  CA  LYS D 114     -33.496  -4.939 -17.486  1.00 58.16           C
ATOM   2419  C   LYS D 114     -32.949  -5.868 -16.414  1.00 58.26           C
ATOM   2420  O   LYS D 114     -31.791  -5.727 -16.004  1.00 52.50           O
ATOM   2421  CB  LYS D 114     -32.896  -5.278 -18.858  1.00 50.72           C
ATOM   2422  N   ILE D 115     -33.783  -6.798 -15.941  1.00 52.33           N
ATOM   2423  CA  ILE D 115     -33.367  -7.743 -14.913  1.00 50.02           C
ATOM   2424  C   ILE D 115     -33.664  -9.167 -15.360  1.00 52.55           C
ATOM   2425  O   ILE D 115     -34.660  -9.438 -16.040  1.00 52.74           O
ATOM   2426  CB  ILE D 115     -34.037  -7.467 -13.554  1.00 49.15           C
ATOM   2427  CG1 ILE D 115     -35.557  -7.558 -13.691  1.00 53.90           C
ATOM   2428  CG2 ILE D 115     -33.625  -6.097 -13.028  1.00 55.51           C
ATOM   2429  CD1 ILE D 115     -36.279  -7.697 -12.376  1.00 54.54           C
ATOM   2430  N   LEU D 116     -32.794 -10.083 -14.943  1.00 48.36           N
ATOM   2431  CA  LEU D 116     -32.892 -11.499 -15.268  1.00 45.07           C
ATOM   2432  C   LEU D 116     -33.713 -12.227 -14.204  1.00 46.25           C
ATOM   2433  O   LEU D 116     -33.338 -12.242 -13.025  1.00 45.27           O
ATOM   2434  CB  LEU D 116     -31.487 -12.088 -15.353  1.00 49.37           C
ATOM   2435  CG  LEU D 116     -31.352 -13.532 -15.800  1.00 47.93           C
ATOM   2436  CD1 LEU D 116     -31.677 -13.617 -17.281  1.00 46.03           C
ATOM   2437  CD2 LEU D 116     -29.949 -14.017 -15.495  1.00 48.92           C
ATOM   2438  N   VAL D 117     -34.821 -12.845 -14.613  1.00 45.20           N
ATOM   2439  CA  VAL D 117     -35.733 -13.493 -13.675  1.00 44.73           C
ATOM   2440  C   VAL D 117     -36.070 -14.891 -14.172  1.00 44.21           C
ATOM   2441  O   VAL D 117     -36.171 -15.130 -15.380  1.00 44.56           O
ATOM   2442  CB  VAL D 117     -37.021 -12.664 -13.461  1.00 46.33           C
ATOM   2443  CG1 VAL D 117     -36.684 -11.211 -13.114  1.00 46.00           C
ATOM   2444  CG2 VAL D 117     -37.903 -12.709 -14.686  1.00 51.89           C
ATOM   2445  N   SER D 118     -36.215 -15.825 -13.237  1.00 45.67           N
ATOM   2446  CA  SER D 118     -36.745 -17.146 -13.553  1.00 44.02           C
ATOM   2447  C   SER D 118     -38.267 -17.044 -13.634  1.00 38.19           C
ATOM   2448  O   SER D 118     -38.935 -16.818 -12.623  1.00 37.80           O
ATOM   2449  CB  SER D 118     -36.311 -18.167 -12.505  1.00 37.87           C
ATOM   2450  OG  SER D 118     -34.915 -18.359 -12.531  1.00 42.91           O
ATOM   2451  N   VAL D 119     -38.817 -17.203 -14.838  1.00 42.42           N
ATOM   2452  CA  VAL D 119     -40.265 -17.103 -15.040  1.00 42.20           C
ATOM   2453  C   VAL D 119     -40.988 -18.433 -14.827  1.00 42.07           C
ATOM   2454  O   VAL D 119     -42.205 -18.439 -14.605  1.00 45.50           O
ATOM   2455  CB  VAL D 119     -40.534 -16.561 -16.450  1.00 40.96           C
ATOM   2456  CG1 VAL D 119     -39.785 -15.262 -16.646  1.00 48.84           C
ATOM   2457  CG2 VAL D 119     -40.061 -17.548 -17.480  1.00 46.43           C
ATOM   2458  N   GLY D 120     -40.271 -19.548 -14.862  1.00 37.64           N
ATOM   2459  CA  GLY D 120     -40.846 -20.873 -14.727  1.00 34.47           C
ATOM   2460  C   GLY D 120     -39.750 -21.900 -14.927  1.00 36.84           C
ATOM   2461  O   GLY D 120     -38.569 -21.559 -15.114  1.00 33.07           O
ATOM   2462  N   CYS D 121     -40.144 -23.170 -14.883  1.00 34.63           N
ATOM   2463  CA  CYS D 121     -39.183 -24.248 -15.106  1.00 31.30           C
ATOM   2464  C   CYS D 121     -39.693 -25.182 -16.200  1.00 30.10           C
ATOM   2465  O   CYS D 121     -40.903 -25.358 -16.379  1.00 36.69           O
ATOM   2466  CB  CYS D 121     -38.880 -25.036 -13.795  1.00 30.96           C
ATOM   2467  SG  CYS D 121     -38.059 -24.107 -12.408  1.00 35.83           S
ATOM   2468  N   THR D 122     -38.758 -25.757 -16.949  1.00 28.28           N
ATOM   2469  CA  THR D 122     -39.025 -26.779 -17.947  1.00 29.67           C
ATOM   2470  C   THR D 122     -38.095 -27.968 -17.695  1.00 32.30           C
ATOM   2471  O   THR D 122     -37.139 -27.889 -16.918  1.00 31.46           O
ATOM   2472  CB  THR D 122     -38.844 -26.231 -19.376  1.00 28.45           C
ATOM   2473  OG1 THR D 122     -39.447 -27.131 -20.314  1.00 29.08           O
ATOM   2474  CG2 THR D 122     -37.366 -26.087 -19.733  1.00 28.25           C
```

[2227]

```
ATOM   2475  N   CYS D 123     -38.371 -29.083 -18.362  1.00 30.92           N
ATOM   2476  CA  CYS D 123     -37.636 -30.324 -18.157  1.00 27.44           C
ATOM   2477  C   CYS D 123     -36.761 -30.596 -19.373  1.00 30.27           C
ATOM   2478  O   CYS D 123     -37.261 -30.676 -20.497  1.00 34.37           O
ATOM   2479  CB  CYS D 123     -38.592 -31.496 -17.913  1.00 27.83           C
ATOM   2480  SG  CYS D 123     -37.679 -33.063 -17.575  1.00 33.49           S
ATOM   2481  N   VAL D 124     -35.460 -30.736 -19.161  1.00 30.82           N
ATOM   2482  CA  VAL D 124     -34.538 -30.941 -20.271  1.00 27.66           C
ATOM   2483  C   VAL D 124     -34.123 -32.402 -20.277  1.00 29.84           C
ATOM   2484  O   VAL D 124     -33.985 -33.030 -19.221  1.00 30.20           O
ATOM   2485  CB  VAL D 124     -33.324 -29.993 -20.187  1.00 38.11           C
ATOM   2486  CG1 VAL D 124     -32.640 -30.090 -18.831  1.00 35.31           C
ATOM   2487  CG2 VAL D 124     -32.319 -30.291 -21.295  1.00 38.78           C
ATOM   2488  N   THR D 125     -33.969 -32.959 -21.468  1.00 30.43           N
ATOM   2489  CA  THR D 125     -33.605 -34.351 -21.619  1.00 31.99           C
ATOM   2490  C   THR D 125     -32.361 -34.450 -22.485  1.00 32.91           C
ATOM   2491  O   THR D 125     -32.156 -33.612 -23.372  1.00 29.67           O
ATOM   2492  CB  THR D 125     -34.751 -35.159 -22.258  1.00 35.17           C
ATOM   2493  OG1 THR D 125     -34.306 -36.494 -22.494  1.00 40.91           O
ATOM   2494  CG2 THR D 125     -35.166 -34.557 -23.597  1.00 31.44           C
ATOM   2495  N   PRO D 126     -31.501 -35.452 -22.235  1.00 31.76           N
ATOM   2496  CA  PRO D 126     -30.364 -35.710 -23.131  1.00 32.68           C
ATOM   2497  C   PRO D 126     -30.734 -36.419 -24.421  1.00 36.61           C
ATOM   2498  O   PRO D 126     -29.875 -36.529 -25.303  1.00 43.15           O
ATOM   2499  CB  PRO D 126     -29.454 -36.612 -22.276  1.00 32.29           C
ATOM   2500  CG  PRO D 126     -30.382 -37.324 -21.405  1.00 29.50           C
ATOM   2501  CD  PRO D 126     -31.452 -36.326 -21.049  1.00 28.52           C
ATOM   2502  N   ILE D 127     -31.957 -36.927 -24.550  1.00 39.15           N
ATOM   2503  CA  ILE D 127     -32.395 -37.666 -25.730  1.00 41.77           C
ATOM   2504  C   ILE D 127     -33.121 -36.694 -26.650  1.00 42.19           C
ATOM   2505  O   ILE D 127     -34.268 -36.321 -26.383  1.00 47.14           O
ATOM   2506  CB  ILE D 127     -33.314 -38.834 -25.351  1.00 40.08           C
ATOM   2507  CG1 ILE D 127     -32.696 -39.683 -24.246  1.00 38.23           C
ATOM   2508  CG2 ILE D 127     -33.630 -39.686 -26.581  1.00 41.45           C
ATOM   2509  CD1 ILE D 127     -31.579 -40.547 -24.726  1.00 35.96           C
ATOM   2510  N   VAL D 128     -32.482 -36.280 -27.735  1.00 45.44           N
ATOM   2511  CA  VAL D 128     -33.135 -35.352 -28.665  1.00 54.60           C
ATOM   2512  C   VAL D 128     -32.978 -35.837 -30.099  1.00 54.67           C
ATOM   2513  O   VAL D 128     -31.862 -36.099 -30.545  1.00 55.01           O
ATOM   2514  CB  VAL D 128     -32.588 -33.902 -28.520  1.00 54.36           C
ATOM   2515  CG1 VAL D 128     -33.292 -32.962 -29.508  1.00 50.07           C
ATOM   2516  CG2 VAL D 128     -32.744 -33.390 -27.074  1.00 45.58           C
TER
ATOM   2517  N   ASN B   1     -62.073 -38.470 -37.615  1.00 48.42           N
ATOM   2518  CA  ASN B   1     -62.439 -38.546 -39.023  1.00 46.04           C
ATOM   2519  C   ASN B   1     -62.414 -40.007 -39.507  1.00 48.16           C
ATOM   2520  O   ASN B   1     -61.704 -40.837 -38.940  1.00 51.52           O
ATOM   2521  CB  ASN B   1     -61.469 -37.714 -39.876  1.00 46.76           C
ATOM   2522  CG  ASN B   1     -61.676 -36.224 -39.727  1.00 53.84           C
ATOM   2523  OD1 ASN B   1     -62.808 -35.735 -39.713  1.00 54.15           O
ATOM   2524  ND2 ASN B   1     -60.573 -35.482 -39.652  1.00 50.03           N
ATOM   2525  N   PHE B   2     -63.184 -40.325 -40.545  1.00 43.59           N
ATOM   2526  CA  PHE B   2     -63.078 -41.647 -41.146  1.00 41.83           C
ATOM   2527  C   PHE B   2     -61.735 -41.778 -41.870  1.00 37.11           C
ATOM   2528  O   PHE B   2     -61.076 -40.786 -42.196  1.00 39.19           O
ATOM   2529  CB  PHE B   2     -64.223 -41.897 -42.137  1.00 31.99           C
ATOM   2530  CG  PHE B   2     -64.187 -41.003 -43.358  1.00 33.22           C
ATOM   2531  CD1 PHE B   2     -64.720 -39.725 -43.316  1.00 32.92           C
ATOM   2532  CD2 PHE B   2     -63.610 -41.437 -44.535  1.00 31.28           C
ATOM   2533  CE1 PHE B   2     -64.687 -38.897 -44.431  1.00 31.00           C
ATOM   2534  CE2 PHE B   2     -63.567 -40.624 -45.648  1.00 30.29           C
ATOM   2535  CZ  PHE B   2     -64.116 -39.347 -45.600  1.00 31.48           C
ATOM   2536  N   MET B   3     -61.332 -43.014 -42.140  1.00 36.96           N
ATOM   2537  CA  MET B   3     -60.139 -43.235 -42.941  1.00 42.85           C
ATOM   2538  C   MET B   3     -60.496 -44.047 -44.177  1.00 34.33           C
ATOM   2539  O   MET B   3     -61.510 -44.742 -44.216  1.00 37.16           O
ATOM   2540  CB  MET B   3     -59.017 -43.923 -42.139  1.00 42.55           C
ATOM   2541  CG  MET B   3     -59.176 -45.429 -41.978  1.00 49.35           C
```

[2228]

```
ATOM   2542  SD  MET B   3     -57.794 -46.216 -41.109  1.00 76.18           S
ATOM   2543  CE  MET B   3     -56.474 -46.113 -42.336  1.00 55.63           C
ATOM   2544  N   LEU B   4     -59.643 -43.936 -45.189  1.00 34.59           N
ATOM   2545  CA  LEU B   4     -59.746 -44.685 -46.429  1.00 35.34           C
ATOM   2546  C   LEU B   4     -58.531 -45.582 -46.578  1.00 35.47           C
ATOM   2547  O   LEU B   4     -57.396 -45.097 -46.544  1.00 36.39           O
ATOM   2548  CB  LEU B   4     -59.834 -43.722 -47.615  1.00 33.53           C
ATOM   2549  CG  LEU B   4     -61.110 -42.897 -47.690  1.00 35.43           C
ATOM   2550  CD1 LEU B   4     -60.989 -41.907 -48.837  1.00 30.73           C
ATOM   2551  CD2 LEU B   4     -62.298 -43.856 -47.897  1.00 30.16           C
ATOM   2552  N   THR B   5     -58.757 -46.876 -46.785  1.00 37.10           N
ATOM   2553  CA  THR B   5     -57.662 -47.838 -46.883  1.00 31.53           C
ATOM   2554  C   THR B   5     -57.616 -48.426 -48.283  1.00 32.80           C
ATOM   2555  O   THR B   5     -58.551 -49.122 -48.701  1.00 32.50           O
ATOM   2556  CB  THR B   5     -57.804 -48.960 -45.854  1.00 33.84           C
ATOM   2557  OG1 THR B   5     -57.904 -48.400 -44.544  1.00 37.51           O
ATOM   2558  CG2 THR B   5     -56.590 -49.852 -45.905  1.00 34.07           C
ATOM   2559  N   GLN B   6     -56.528 -48.151 -48.995  1.00 31.68           N
ATOM   2560  CA  GLN B   6     -56.180 -48.751 -50.271  1.00 32.76           C
ATOM   2561  C   GLN B   6     -54.778 -49.359 -50.171  1.00 35.40           C
ATOM   2562  O   GLN B   6     -53.984 -48.936 -49.327  1.00 36.56           O
ATOM   2563  CB  GLN B   6     -56.243 -47.717 -51.407  1.00 28.46           C
ATOM   2564  CG  GLN B   6     -55.515 -46.387 -51.113  1.00 32.85           C
ATOM   2565  CD  GLN B   6     -55.639 -45.359 -52.246  1.00 30.53           C
ATOM   2566  OE1 GLN B   6     -55.873 -44.178 -51.997  1.00 31.04           O
ATOM   2567  NE2 GLN B   6     -55.468 -45.809 -53.493  1.00 29.32           N
ATOM   2568  N   PRO B   7     -54.457 -50.371 -50.980  1.00 30.74           N
ATOM   2569  CA  PRO B   7     -53.174 -51.063 -50.803  1.00 33.78           C
ATOM   2570  C   PRO B   7     -52.004 -50.130 -51.043  1.00 34.92           C
ATOM   2571  O   PRO B   7     -52.086 -49.171 -51.814  1.00 32.56           O
ATOM   2572  CB  PRO B   7     -53.216 -52.192 -51.841  1.00 34.55           C
ATOM   2573  CG  PRO B   7     -54.386 -51.882 -52.743  1.00 35.51           C
ATOM   2574  CD  PRO B   7     -55.318 -51.014 -51.988  1.00 34.11           C
ATOM   2575  N   HIS B   8     -50.897 -50.427 -50.365  1.00 36.19           N
ATOM   2576  CA  HIS B   8     -49.688 -49.629 -50.559  1.00 33.12           C
ATOM   2577  C   HIS B   8     -49.186 -49.734 -51.994  1.00 34.25           C
ATOM   2578  O   HIS B   8     -48.697 -48.754 -52.562  1.00 33.17           O
ATOM   2579  CB  HIS B   8     -48.607 -50.070 -49.573  1.00 35.45           C
ATOM   2580  CG  HIS B   8     -47.397 -49.198 -49.582  1.00 42.13           C
ATOM   2581  ND1 HIS B   8     -47.375 -47.949 -48.995  1.00 49.60           N
ATOM   2582  CD2 HIS B   8     -46.170 -49.378 -50.128  1.00 47.92           C
ATOM   2583  CE1 HIS B   8     -46.181 -47.405 -49.162  1.00 45.61           C
ATOM   2584  NE2 HIS B   8     -45.433 -48.249 -49.851  1.00 51.43           N
ATOM   2585  N   SER B   9     -49.288 -50.915 -52.598  1.00 33.01           N
ATOM   2586  CA  SER B   9     -48.790 -51.075 -53.953  1.00 33.81           C
ATOM   2587  C   SER B   9     -49.470 -52.268 -54.599  1.00 31.87           C
ATOM   2588  O   SER B   9     -49.954 -53.174 -53.917  1.00 30.71           O
ATOM   2589  CB  SER B   9     -47.262 -51.252 -53.971  1.00 35.69           C
ATOM   2590  OG  SER B   9     -46.883 -52.474 -53.362  1.00 33.41           O
ATOM   2591  N   VAL B  10     -49.474 -52.262 -55.932  1.00 34.29           N
ATOM   2592  CA  VAL B  10     -50.018 -53.363 -56.721  1.00 36.39           C
ATOM   2593  C   VAL B  10     -49.222 -53.433 -58.018  1.00 31.35           C
ATOM   2594  O   VAL B  10     -48.744 -52.413 -58.524  1.00 32.90           O
ATOM   2595  CB  VAL B  10     -51.544 -53.180 -56.971  1.00 29.59           C
ATOM   2596  CG1 VAL B  10     -51.813 -52.060 -57.949  1.00 34.26           C
ATOM   2597  CG2 VAL B  10     -52.175 -54.453 -57.483  1.00 34.64           C
ATOM   2598  N   SER B  11     -49.065 -54.642 -58.557  1.00 30.95           N
ATOM   2599  CA  SER B  11     -48.363 -54.817 -59.823  1.00 32.97           C
ATOM   2600  C   SER B  11     -49.144 -55.743 -60.746  1.00 37.02           C
ATOM   2601  O   SER B  11     -49.802 -56.688 -60.301  1.00 37.99           O
ATOM   2602  CB  SER B  11     -46.940 -55.365 -59.621  1.00 36.52           C
ATOM   2603  OG  SER B  11     -46.955 -56.693 -59.123  1.00 37.70           O
ATOM   2604  N   GLU B  12     -49.040 -55.469 -62.045  1.00 35.82           N
ATOM   2605  CA  GLU B  12     -49.813 -56.164 -63.063  1.00 41.15           C
ATOM   2606  C   GLU B  12     -49.093 -56.018 -64.404  1.00 42.93           C
ATOM   2607  O   GLU B  12     -48.385 -55.036 -64.632  1.00 41.99           O
ATOM   2608  CB  GLU B  12     -51.240 -55.592 -63.115  1.00 38.97           C
ATOM   2609  CG  GLU B  12     -52.171 -56.223 -64.120  1.00 36.91           C
```

[2229]

```
ATOM   2610  CD  GLU B  12     -52.409 -57.677 -63.828  1.00 43.45           C
ATOM   2611  OE1 GLU B  12     -52.902 -57.969 -62.724  1.00 43.79           O
ATOM   2612  OE2 GLU B  12     -52.086 -58.535 -64.683  1.00 45.22           O
ATOM   2613  N   SER B  13     -49.276 -57.008 -65.284  1.00 42.46           N
ATOM   2614  CA  SER B  13     -48.617 -57.061 -66.586  1.00 38.98           C
ATOM   2615  C   SER B  13     -49.334 -56.172 -67.599  1.00 42.80           C
ATOM   2616  O   SER B  13     -50.536 -55.918 -67.475  1.00 44.41           O
ATOM   2617  CB  SER B  13     -48.602 -58.493 -67.110  1.00 40.45           C
ATOM   2618  OG  SER B  13     -48.048 -59.392 -66.168  1.00 52.53           O
ATOM   2619  N   PRO B  14     -48.631 -55.730 -68.643  1.00 42.59           N
ATOM   2620  CA  PRO B  14     -49.276 -54.887 -69.659  1.00 43.44           C
ATOM   2621  C   PRO B  14     -50.395 -55.624 -70.380  1.00 39.03           C
ATOM   2622  O   PRO B  14     -50.379 -56.844 -70.515  1.00 40.78           O
ATOM   2623  CB  PRO B  14     -48.128 -54.542 -70.622  1.00 42.28           C
ATOM   2624  CG  PRO B  14     -46.861 -54.821 -69.850  1.00 42.94           C
ATOM   2625  CD  PRO B  14     -47.202 -55.957 -68.935  1.00 44.97           C
ATOM   2626  N   GLY B  15     -51.389 -54.863 -70.831  1.00 41.27           N
ATOM   2627  CA  GLY B  15     -52.504 -55.431 -71.560  1.00 41.27           C
ATOM   2628  C   GLY B  15     -53.571 -56.097 -70.715  1.00 39.30           C
ATOM   2629  O   GLY B  15     -54.616 -56.455 -71.251  1.00 41.89           O
ATOM   2630  N   LYS B  16     -53.342 -56.289 -69.425  1.00 40.71           N
ATOM   2631  CA  LYS B  16     -54.301 -56.917 -68.532  1.00 37.27           C
ATOM   2632  C   LYS B  16     -55.113 -55.858 -67.795  1.00 40.45           C
ATOM   2633  O   LYS B  16     -54.825 -54.658 -67.859  1.00 37.56           O
ATOM   2634  CB  LYS B  16     -53.578 -57.823 -67.525  1.00 41.04           C
ATOM   2635  CG  LYS B  16     -52.670 -58.884 -68.142  1.00 42.80           C
ATOM   2636  CD  LYS B  16     -53.457 -59.888 -68.954  1.00 45.47           C
ATOM   2637  N   THR B  17     -56.135 -56.325 -67.076  1.00 36.79           N
ATOM   2638  CA  THR B  17     -56.997 -55.475 -66.259  1.00 36.22           C
ATOM   2639  C   THR B  17     -56.555 -55.542 -64.799  1.00 34.84           C
ATOM   2640  O   THR B  17     -56.126 -56.591 -64.320  1.00 35.56           O
ATOM   2641  CB  THR B  17     -58.472 -55.895 -66.391  1.00 36.20           C
ATOM   2642  OG1 THR B  17     -58.887 -55.761 -67.755  1.00 38.22           O
ATOM   2643  CG2 THR B  17     -59.386 -55.017 -65.535  1.00 30.80           C
ATOM   2644  N   VAL B  18     -56.619 -54.407 -64.105  1.00 32.79           N
ATOM   2645  CA  VAL B  18     -56.292 -54.348 -62.687  1.00 34.91           C
ATOM   2646  C   VAL B  18     -57.375 -53.564 -61.965  1.00 33.52           C
ATOM   2647  O   VAL B  18     -57.980 -52.639 -62.521  1.00 32.06           O
ATOM   2648  CB  VAL B  18     -54.886 -53.734 -62.421  1.00 35.79           C
ATOM   2649  CG1 VAL B  18     -54.767 -52.310 -62.983  1.00 34.16           C
ATOM   2650  CG2 VAL B  18     -54.588 -53.715 -60.930  1.00 35.90           C
ATOM   2651  N   THR B  19     -57.651 -53.975 -60.730  1.00 34.14           N
ATOM   2652  CA  THR B  19     -58.605 -53.304 -59.859  1.00 37.12           C
ATOM   2653  C   THR B  19     -57.898 -52.821 -58.598  1.00 38.74           C
ATOM   2654  O   THR B  19     -57.127 -53.569 -57.985  1.00 39.30           O
ATOM   2655  CB  THR B  19     -59.755 -54.239 -59.493  1.00 34.53           C
ATOM   2656  OG1 THR B  19     -60.391 -54.675 -60.699  1.00 42.25           O
ATOM   2657  CG2 THR B  19     -60.773 -53.522 -58.628  1.00 32.67           C
ATOM   2658  N   ILE B  20     -58.149 -51.571 -58.224  1.00 31.70           N
ATOM   2659  CA  ILE B  20     -57.652 -50.999 -56.978  1.00 30.67           C
ATOM   2660  C   ILE B  20     -58.867 -50.688 -56.122  1.00 32.69           C
ATOM   2661  O   ILE B  20     -59.761 -49.950 -56.553  1.00 31.83           O
ATOM   2662  CB  ILE B  20     -56.804 -49.743 -57.229  1.00 32.42           C
ATOM   2663  CG1 ILE B  20     -55.591 -50.082 -58.114  1.00 32.48           C
ATOM   2664  CG2 ILE B  20     -56.364 -49.100 -55.907  1.00 30.57           C
ATOM   2665  CD1 ILE B  20     -54.711 -48.876 -58.428  1.00 32.93           C
ATOM   2666  N   SER B  21     -58.913 -51.246 -54.917  1.00 34.59           N
ATOM   2667  CA  SER B  21     -60.052 -51.051 -54.034  1.00 34.59           C
ATOM   2668  C   SER B  21     -59.687 -50.153 -52.865  1.00 36.84           C
ATOM   2669  O   SER B  21     -58.526 -50.084 -52.453  1.00 33.77           O
ATOM   2670  CB  SER B  21     -60.585 -52.377 -53.511  1.00 30.33           C
ATOM   2671  OG  SER B  21     -61.150 -53.108 -54.585  1.00 42.46           O
ATOM   2672  N   CYS B  22     -60.712 -49.490 -52.330  1.00 30.65           N
ATOM   2673  CA  CYS B  22     -60.573 -48.468 -51.308  1.00 31.83           C
ATOM   2674  C   CYS B  22     -61.707 -48.651 -50.314  1.00 34.25           C
ATOM   2675  O   CYS B  22     -62.875 -48.548 -50.694  1.00 37.58           O
ATOM   2676  CB  CYS B  22     -60.628 -47.080 -51.959  1.00 39.82           C
ATOM   2677  SG  CYS B  22     -60.591 -45.630 -50.894  1.00 50.45           S
```

[2230]

```
ATOM   2678  N   THR B  23     -61.380 -48.911 -49.051  1.00 32.18           N
ATOM   2679  CA  THR B  23     -62.377 -49.178 -48.022  1.00 35.27           C
ATOM   2680  C   THR B  23     -62.518 -47.997 -47.070  1.00 32.66           C
ATOM   2681  O   THR B  23     -61.522 -47.495 -46.546  1.00 35.42           O
ATOM   2682  CB  THR B  23     -62.009 -50.436 -47.239  1.00 34.82           C
ATOM   2683  OG1 THR B  23     -62.033 -51.541 -48.133  1.00 34.17           O
ATOM   2684  CG2 THR B  23     -63.005 -50.689 -46.107  1.00 32.04           C
ATOM   2685  N   ARG B  24     -63.758 -47.594 -46.806  1.00 33.64           N
ATOM   2686  CA  ARG B  24     -64.058 -46.498 -45.893  1.00 33.22           C
ATOM   2687  C   ARG B  24     -64.374 -47.075 -44.520  1.00 35.18           C
ATOM   2688  O   ARG B  24     -65.221 -47.967 -44.403  1.00 33.56           O
ATOM   2689  CB  ARG B  24     -65.233 -45.663 -46.412  1.00 30.06           C
ATOM   2690  CG  ARG B  24     -65.664 -44.538 -45.480  1.00 31.06           C
ATOM   2691  CD  ARG B  24     -66.668 -43.631 -46.154  1.00 36.99           C
ATOM   2692  NE  ARG B  24     -67.163 -42.584 -45.264  1.00 35.01           N
ATOM   2693  CZ  ARG B  24     -67.493 -41.369 -45.679  1.00 33.17           C
ATOM   2694  NH1 ARG B  24     -67.365 -41.067 -46.959  1.00 29.84           N
ATOM   2695  NH2 ARG B  24     -67.940 -40.458 -44.821  1.00 35.12           N
ATOM   2696  N   SER B  25     -63.696 -46.564 -43.486  1.00 35.65           N
ATOM   2697  CA  SER B  25     -63.742 -47.196 -42.166  1.00 38.81           C
ATOM   2698  C   SER B  25     -65.048 -46.924 -41.427  1.00 41.04           C
ATOM   2699  O   SER B  25     -65.530 -47.797 -40.698  1.00 43.00           O
ATOM   2700  CB  SER B  25     -62.566 -46.732 -41.311  1.00 40.58           C
ATOM   2701  OG  SER B  25     -62.701 -45.360 -40.944  1.00 44.01           O
ATOM   2702  N   SER B  26     -65.627 -45.732 -41.582  1.00 40.11           N
ATOM   2703  CA  SER B  26     -66.855 -45.383 -40.870  1.00 40.20           C
ATOM   2704  C   SER B  26     -67.618 -44.357 -41.689  1.00 39.36           C
ATOM   2705  O   SER B  26     -67.050 -43.655 -42.532  1.00 37.44           O
ATOM   2706  CB  SER B  26     -66.610 -44.849 -39.449  1.00 39.17           C
ATOM   2707  OG  SER B  26     -65.776 -43.715 -39.456  1.00 46.93           O
ATOM   2708  N   GLY B  27     -68.915 -44.272 -41.412  1.00 38.77           N
ATOM   2709  CA  GLY B  27     -69.834 -43.600 -42.297  1.00 35.65           C
ATOM   2710  C   GLY B  27     -70.117 -44.449 -43.526  1.00 37.33           C
ATOM   2711  O   GLY B  27     -69.338 -45.313 -43.914  1.00 43.78           O
ATOM   2712  N   SER B  28     -71.246 -44.174 -44.165  1.00 35.08           N
ATOM   2713  CA  SER B  28     -71.684 -44.942 -45.320  1.00 34.40           C
ATOM   2714  C   SER B  28     -71.038 -44.399 -46.591  1.00 36.61           C
ATOM   2715  O   SER B  28     -71.192 -43.215 -46.914  1.00 35.35           O
ATOM   2716  CB  SER B  28     -73.210 -44.897 -45.413  1.00 38.66           C
ATOM   2717  OG  SER B  28     -73.668 -45.611 -46.544  1.00 49.30           O
ATOM   2718  N   LEU B  29     -70.319 -45.266 -47.314  1.00 35.01           N
ATOM   2719  CA  LEU B  29     -69.594 -44.810 -48.494  1.00 32.98           C
ATOM   2720  C   LEU B  29     -70.542 -44.271 -49.551  1.00 36.37           C
ATOM   2721  O   LEU B  29     -70.234 -43.275 -50.223  1.00 33.54           O
ATOM   2722  CB  LEU B  29     -68.753 -45.944 -49.077  1.00 35.11           C
ATOM   2723  CG  LEU B  29     -67.882 -45.517 -50.269  1.00 31.35           C
ATOM   2724  CD1 LEU B  29     -66.416 -45.888 -50.052  1.00 30.27           C
ATOM   2725  CD2 LEU B  29     -68.389 -46.151 -51.532  1.00 36.75           C
ATOM   2726  N   ALA B  30     -71.718 -44.894 -49.686  1.00 35.43           N
ATOM   2727  CA  ALA B  30     -72.648 -44.538 -50.746  1.00 33.36           C
ATOM   2728  C   ALA B  30     -73.309 -43.188 -50.528  1.00 32.13           C
ATOM   2729  O   ALA B  30     -73.990 -42.710 -51.440  1.00 32.80           O
ATOM   2730  CB  ALA B  30     -73.734 -45.602 -50.873  1.00 36.42           C
ATOM   2731  N   ASN B  31     -73.115 -42.564 -49.361  1.00 32.10           N
ATOM   2732  CA  ASN B  31     -73.667 -41.244 -49.084  1.00 31.08           C
ATOM   2733  C   ASN B  31     -72.810 -40.105 -49.626  1.00 32.25           C
ATOM   2734  O   ASN B  31     -73.272 -38.956 -49.588  1.00 30.60           O
ATOM   2735  CB  ASN B  31     -73.837 -41.043 -47.578  1.00 31.95           C
ATOM   2736  CG  ASN B  31     -75.028 -41.770 -47.027  1.00 37.55           C
ATOM   2737  OD1 ASN B  31     -75.876 -42.249 -47.775  1.00 38.02           O
ATOM   2738  ND2 ASN B  31     -75.091 -41.881 -45.707  1.00 39.81           N
ATOM   2739  N   TYR B  32     -71.593 -40.387 -50.124  1.00 29.19           N
ATOM   2740  CA  TYR B  32     -70.646 -39.347 -50.536  1.00 28.14           C
ATOM   2741  C   TYR B  32     -69.862 -39.813 -51.755  1.00 27.65           C
ATOM   2742  O   TYR B  32     -69.337 -40.932 -51.766  1.00 32.18           O
ATOM   2743  CB  TYR B  32     -69.684 -38.991 -49.385  1.00 24.79           C
ATOM   2744  CG  TYR B  32     -70.378 -38.798 -48.051  1.00 27.65           C
ATOM   2745  CD1 TYR B  32     -70.938 -37.575 -47.703  1.00 28.81           C
```

[2231]

```
ATOM   2746  CD2 TYR B  32     -70.495 -39.846 -47.148  1.00 30.05           C
ATOM   2747  CE1 TYR B  32     -71.597 -37.404 -46.488  1.00 29.19           C
ATOM   2748  CE2 TYR B  32     -71.143 -39.686 -45.927  1.00 26.84           C
ATOM   2749  CZ  TYR B  32     -71.701 -38.470 -45.608  1.00 30.99           C
ATOM   2750  OH  TYR B  32     -72.349 -38.312 -44.397  1.00 32.13           O
ATOM   2751  N   TYR B  33     -69.759 -38.948 -52.765  1.00 24.68           N
ATOM   2752  CA  TYR B  33     -69.071 -39.306 -54.004  1.00 29.07           C
ATOM   2753  C   TYR B  33     -67.608 -39.665 -53.745  1.00 28.77           C
ATOM   2754  O   TYR B  33     -66.958 -39.103 -52.860  1.00 25.04           O
ATOM   2755  CB  TYR B  33     -69.134 -38.148 -55.012  1.00 27.61           C
ATOM   2756  CG  TYR B  33     -70.443 -38.086 -55.791  1.00 30.44           C
ATOM   2757  CD1 TYR B  33     -70.997 -39.237 -56.360  1.00 31.29           C
ATOM   2758  CD2 TYR B  33     -71.133 -36.881 -55.941  1.00 27.33           C
ATOM   2759  CE1 TYR B  33     -72.194 -39.182 -57.081  1.00 33.84           C
ATOM   2760  CE2 TYR B  33     -72.335 -36.824 -56.647  1.00 30.82           C
ATOM   2761  CZ  TYR B  33     -72.854 -37.972 -57.208  1.00 32.37           C
ATOM   2762  OH  TYR B  33     -74.036 -37.916 -57.911  1.00 38.61           O
ATOM   2763  N   VAL B  34     -67.099 -40.618 -54.533  1.00 28.13           N
ATOM   2764  CA  VAL B  34     -65.703 -41.048 -54.495  1.00 28.95           C
ATOM   2765  C   VAL B  34     -65.007 -40.568 -55.761  1.00 28.95           C
ATOM   2766  O   VAL B  34     -65.511 -40.779 -56.875  1.00 27.86           O
ATOM   2767  CB  VAL B  34     -65.555 -42.580 -54.393  1.00 31.86           C
ATOM   2768  CG1 VAL B  34     -64.061 -42.957 -54.396  1.00 23.97           C
ATOM   2769  CG2 VAL B  34     -66.288 -43.155 -53.176  1.00 27.83           C
ATOM   2770  N   GLN B  35     -63.825 -39.982 -55.588  1.00 24.81           N
ATOM   2771  CA  GLN B  35     -62.942 -39.557 -56.661  1.00 25.52           C
ATOM   2772  C   GLN B  35     -61.676 -40.406 -56.647  1.00 30.37           C
ATOM   2773  O   GLN B  35     -61.273 -40.943 -55.614  1.00 30.08           O
ATOM   2774  CB  GLN B  35     -62.564 -38.070 -56.506  1.00 28.82           C
ATOM   2775  CG  GLN B  35     -63.676 -37.069 -56.776  1.00 24.67           C
ATOM   2776  CD  GLN B  35     -64.946 -37.330 -55.952  1.00 28.56           C
ATOM   2777  OE1 GLN B  35     -65.988 -37.666 -56.509  1.00 25.72           O
ATOM   2778  NE2 GLN B  35     -64.851 -37.200 -54.636  1.00 28.32           N
ATOM   2779  N   TRP B  36     -61.038 -40.502 -57.808  1.00 26.30           N
ATOM   2780  CA  TRP B  36     -59.775 -41.205 -57.978  1.00 31.28           C
ATOM   2781  C   TRP B  36     -58.843 -40.272 -58.732  1.00 32.28           C
ATOM   2782  O   TRP B  36     -59.230 -39.718 -59.766  1.00 32.41           O
ATOM   2783  CB  TRP B  36     -59.938 -42.521 -58.759  1.00 30.36           C
ATOM   2784  CG  TRP B  36     -60.688 -43.596 -58.040  1.00 28.28           C
ATOM   2785  CD1 TRP B  36     -62.051 -43.830 -58.073  1.00 28.28           C
ATOM   2786  CD2 TRP B  36     -60.135 -44.585 -57.181  1.00 29.88           C
ATOM   2787  NE1 TRP B  36     -62.362 -44.897 -57.274  1.00 26.21           N
ATOM   2788  CE2 TRP B  36     -61.208 -45.390 -56.722  1.00 28.49           C
ATOM   2789  CE3 TRP B  36     -58.837 -44.876 -56.748  1.00 31.12           C
ATOM   2790  CZ2 TRP B  36     -61.019 -46.453 -55.845  1.00 28.40           C
ATOM   2791  CZ3 TRP B  36     -58.652 -45.939 -55.883  1.00 32.68           C
ATOM   2792  CH2 TRP B  36     -59.735 -46.716 -55.441  1.00 30.05           C
ATOM   2793  N   TYR B  37     -57.626 -40.095 -58.223  1.00 30.65           N
ATOM   2794  CA  TYR B  37     -56.644 -39.219 -58.849  1.00 31.50           C
ATOM   2795  C   TYR B  37     -55.427 -40.027 -59.288  1.00 36.71           C
ATOM   2796  O   TYR B  37     -54.974 -40.939 -58.579  1.00 36.68           O
ATOM   2797  CB  TYR B  37     -56.240 -38.073 -57.896  1.00 33.16           C
ATOM   2798  CG  TYR B  37     -57.433 -37.259 -57.453  1.00 31.99           C
ATOM   2799  CD1 TYR B  37     -57.932 -36.229 -58.248  1.00 35.14           C
ATOM   2800  CD2 TYR B  37     -58.107 -37.560 -56.281  1.00 34.29           C
ATOM   2801  CE1 TYR B  37     -59.051 -35.497 -57.861  1.00 34.20           C
ATOM   2802  CE2 TYR B  37     -59.225 -36.828 -55.876  1.00 33.29           C
ATOM   2803  CZ  TYR B  37     -59.695 -35.804 -56.672  1.00 37.52           C
ATOM   2804  OH  TYR B  37     -60.815 -35.098 -56.274  1.00 34.84           O
ATOM   2805  N   GLN B  38     -54.923 -39.716 -60.477  1.00 31.34           N
ATOM   2806  CA  GLN B  38     -53.659 -40.264 -60.945  1.00 31.62           C
ATOM   2807  C   GLN B  38     -52.554 -39.249 -60.700  1.00 33.06           C
ATOM   2808  O   GLN B  38     -52.708 -38.068 -61.026  1.00 35.31           O
ATOM   2809  CB  GLN B  38     -53.730 -40.604 -62.429  1.00 33.78           C
ATOM   2810  CG  GLN B  38     -52.475 -41.241 -63.013  1.00 31.88           C
ATOM   2811  CD  GLN B  38     -52.552 -41.284 -64.514  1.00 36.12           C
ATOM   2812  OE1 GLN B  38     -52.506 -40.246 -65.178  1.00 38.97           O
ATOM   2813  NE2 GLN B  38     -52.726 -42.475 -65.062  1.00 38.13           N
```

[2232]

```
ATOM   2814  N   GLN B  39     -51.436 -39.704 -60.136  1.00 34.02           N
ATOM   2815  CA  GLN B  39     -50.278 -38.828 -59.978  1.00 36.27           C
ATOM   2816  C   GLN B  39     -49.039 -39.599 -60.407  1.00 33.33           C
ATOM   2817  O   GLN B  39     -48.580 -40.506 -59.706  1.00 32.04           O
ATOM   2818  CB  GLN B  39     -50.131 -38.315 -58.545  1.00 33.07           C
ATOM   2819  CG  GLN B  39     -48.968 -37.345 -58.403  1.00 33.17           C
ATOM   2820  CD  GLN B  39     -48.809 -36.807 -57.004  1.00 34.82           C
ATOM   2821  OE1 GLN B  39     -49.072 -37.508 -56.032  1.00 37.83           O
ATOM   2822  NE2 GLN B  39     -48.361 -35.557 -56.889  1.00 34.85           N
ATOM   2823  N   ARG B  40     -48.502 -39.220 -61.530  1.00 37.17           N
ATOM   2824  CA  ARG B  40     -47.246 -39.735 -62.026  1.00 37.50           C
ATOM   2825  C   ARG B  40     -46.081 -39.116 -61.264  1.00 37.35           C
ATOM   2826  O   ARG B  40     -46.175 -37.976 -60.803  1.00 39.14           O
ATOM   2827  CB  ARG B  40     -47.113 -39.429 -63.517  1.00 40.90           C
ATOM   2828  CG  ARG B  40     -48.050 -40.238 -64.377  1.00 41.81           C
ATOM   2829  CD  ARG B  40     -47.999 -39.848 -65.837  1.00 50.88           C
ATOM   2830  NE  ARG B  40     -49.049 -40.545 -66.570  1.00 50.07           N
ATOM   2831  CZ  ARG B  40     -49.604 -40.119 -67.695  1.00 55.82           C
ATOM   2832  NH1 ARG B  40     -49.229 -38.966 -68.229  1.00 61.75           N
ATOM   2833  NH2 ARG B  40     -50.550 -40.849 -68.278  1.00 56.41           N
ATOM   2834  N   PRO B  41     -44.958 -39.847 -61.143  1.00 37.63           N
ATOM   2835  CA  PRO B  41     -43.784 -39.315 -60.422  1.00 38.24           C
ATOM   2836  C   PRO B  41     -43.369 -37.913 -60.860  1.00 39.50           C
ATOM   2837  O   PRO B  41     -43.132 -37.662 -62.045  1.00 41.41           O
ATOM   2838  CB  PRO B  41     -42.678 -40.333 -60.754  1.00 40.03           C
ATOM   2839  CG  PRO B  41     -43.407 -41.620 -60.995  1.00 43.27           C
ATOM   2840  CD  PRO B  41     -44.748 -41.224 -61.627  1.00 38.94           C
ATOM   2841  N   GLY B  42     -43.286 -36.985 -59.914  1.00 37.98           N
ATOM   2842  CA  GLY B  42     -42.865 -35.640 -60.222  1.00 36.60           C
ATOM   2843  C   GLY B  42     -43.943 -34.739 -60.789  1.00 41.87           C
ATOM   2844  O   GLY B  42     -43.647 -33.588 -61.131  1.00 44.27           O
ATOM   2845  N   CYS B  43     -45.183 -35.203 -60.884  1.00 44.78           N
ATOM   2846  CA  CYS B  43     -46.245 -34.442 -61.523  1.00 38.50           C
ATOM   2847  C   CYS B  43     -47.304 -34.040 -60.509  1.00 36.58           C
ATOM   2848  O   CYS B  43     -47.368 -34.557 -59.390  1.00 36.71           O
ATOM   2849  CB  CYS B  43     -46.908 -35.250 -62.647  1.00 43.50           C
ATOM   2850  SG  CYS B  43     -45.868 -35.919 -63.963  1.00 44.38           S
ATOM   2851  N   SER B  44     -48.162 -33.122 -60.944  1.00 39.38           N
ATOM   2852  CA  SER B  44     -49.393 -32.814 -60.232  1.00 37.90           C
ATOM   2853  C   SER B  44     -50.373 -33.976 -60.366  1.00 36.31           C
ATOM   2854  O   SER B  44     -50.342 -34.711 -61.353  1.00 37.77           O
ATOM   2855  CB  SER B  44     -50.051 -31.565 -60.816  1.00 34.90           C
ATOM   2856  OG  SER B  44     -49.268 -30.411 -60.609  1.00 49.25           O
ATOM   2857  N   PRO B  45     -51.281 -34.136 -59.414  1.00 36.69           N
ATOM   2858  CA  PRO B  45     -52.343 -35.132 -59.588  1.00 37.55           C
ATOM   2859  C   PRO B  45     -53.316 -34.685 -60.658  1.00 36.50           C
ATOM   2860  O   PRO B  45     -53.481 -33.494 -60.929  1.00 39.25           O
ATOM   2861  CB  PRO B  45     -53.028 -35.180 -58.218  1.00 34.29           C
ATOM   2862  CG  PRO B  45     -52.114 -34.405 -57.285  1.00 36.42           C
ATOM   2863  CD  PRO B  45     -51.378 -33.432 -58.127  1.00 35.27           C
ATOM   2864  N   THR B  46     -53.955 -35.657 -61.291  1.00 39.89           N
ATOM   2865  CA  THR B  46     -55.042 -35.333 -62.194  1.00 32.00           C
ATOM   2866  C   THR B  46     -56.129 -36.384 -62.029  1.00 35.81           C
ATOM   2867  O   THR B  46     -55.862 -37.563 -61.761  1.00 30.60           O
ATOM   2868  CB  THR B  46     -54.584 -35.238 -63.653  1.00 39.72           C
ATOM   2869  OG1 THR B  46     -55.570 -34.522 -64.414  1.00 46.69           O
ATOM   2870  CG2 THR B  46     -54.408 -36.624 -64.258  1.00 33.41           C
ATOM   2871  N   ILE B  47     -57.364 -35.930 -62.178  1.00 34.43           N
ATOM   2872  CA  ILE B  47     -58.515 -36.771 -61.919  1.00 33.42           C
ATOM   2873  C   ILE B  47     -58.703 -37.734 -63.081  1.00 32.48           C
ATOM   2874  O   ILE B  47     -58.619 -37.348 -64.250  1.00 31.40           O
ATOM   2875  CB  ILE B  47     -59.761 -35.904 -61.676  1.00 36.97           C
ATOM   2876  CG1 ILE B  47     -60.950 -36.765 -61.270  1.00 37.67           C
ATOM   2877  CG2 ILE B  47     -60.086 -35.074 -62.906  1.00 42.28           C
ATOM   2878  CD1 ILE B  47     -61.659 -36.248 -60.032  1.00 41.63           C
ATOM   2879  N   VAL B  48     -58.943 -39.003 -62.758  1.00 35.13           N
ATOM   2880  CA  VAL B  48     -59.380 -39.969 -63.745  1.00 33.96           C
ATOM   2881  C   VAL B  48     -60.844 -40.356 -63.562  1.00 31.61           C
```

[2233]

```
ATOM   2882  O   VAL B  48     -61.494 -40.727 -64.544  1.00 35.04           O
ATOM   2883  CB  VAL B  48     -58.487 -41.228 -63.748  1.00 36.24           C
ATOM   2884  CG1 VAL B  48     -57.058 -40.868 -64.161  1.00 36.62           C
ATOM   2885  CG2 VAL B  48     -58.508 -41.895 -62.390  1.00 30.98           C
ATOM   2886  N   ILE B  49     -61.378 -40.285 -62.344  1.00 34.09           N
ATOM   2887  CA  ILE B  49     -62.774 -40.616 -62.055  1.00 28.47           C
ATOM   2888  C   ILE B  49     -63.295 -39.653 -61.000  1.00 30.38           C
ATOM   2889  O   ILE B  49     -62.665 -39.477 -59.952  1.00 33.64           O
ATOM   2890  CB  ILE B  49     -62.938 -42.060 -61.538  1.00 32.61           C
ATOM   2891  CG1 ILE B  49     -62.607 -43.094 -62.621  1.00 30.56           C
ATOM   2892  CG2 ILE B  49     -64.368 -42.264 -60.972  1.00 31.48           C
ATOM   2893  CD1 ILE B  49     -63.620 -43.155 -63.759  1.00 34.19           C
ATOM   2894  N   PHE B  50     -64.451 -39.049 -61.250  1.00 31.25           N
ATOM   2895  CA  PHE B  50     -65.131 -38.288 -60.219  1.00 28.65           C
ATOM   2896  C   PHE B  50     -66.586 -38.749 -60.126  1.00 30.30           C
ATOM   2897  O   PHE B  50     -67.124 -39.381 -61.036  1.00 32.34           O
ATOM   2898  CB  PHE B  50     -65.033 -36.764 -60.462  1.00 27.77           C
ATOM   2899  CG  PHE B  50     -65.842 -36.261 -61.624  1.00 33.04           C
ATOM   2900  CD1 PHE B  50     -65.346 -36.324 -62.920  1.00 31.75           C
ATOM   2901  CD2 PHE B  50     -67.102 -35.691 -61.415  1.00 33.54           C
ATOM   2902  CE1 PHE B  50     -66.094 -35.847 -63.994  1.00 34.09           C
ATOM   2903  CE2 PHE B  50     -67.861 -35.198 -62.486  1.00 30.85           C
ATOM   2904  CZ  PHE B  50     -67.359 -35.279 -63.776  1.00 34.73           C
ATOM   2905  N   ALA B  51     -67.204 -38.454 -58.992  1.00 24.01           N
ATOM   2906  CA  ALA B  51     -68.589 -38.835 -58.718  1.00 31.55           C
ATOM   2907  C   ALA B  51     -68.813 -40.336 -58.928  1.00 34.18           C
ATOM   2908  O   ALA B  51     -69.740 -40.759 -59.629  1.00 30.70           O
ATOM   2909  CB  ALA B  51     -69.563 -38.000 -59.566  1.00 28.26           C
ATOM   2910  N   ASN B  52     -67.940 -41.142 -58.304  1.00 31.81           N
ATOM   2911  CA  ASN B  52     -68.016 -42.601 -58.283  1.00 27.20           C
ATOM   2912  C   ASN B  52     -67.591 -43.233 -59.597  1.00 30.50           C
ATOM   2913  O   ASN B  52     -66.804 -44.186 -59.599  1.00 32.19           O
ATOM   2914  CB  ASN B  52     -69.433 -43.096 -57.939  1.00 32.97           C
ATOM   2915  CG  ASN B  52     -69.878 -42.702 -56.533  1.00 32.46           C
ATOM   2916  OD1 ASN B  52     -69.064 -42.344 -55.685  1.00 31.69           O
ATOM   2917  ND2 ASN B  52     -71.182 -42.778 -56.285  1.00 34.01           N
ATOM   2918  N   ASN B  53     -68.137 -42.745 -60.714  1.00 30.54           N
ATOM   2919  CA  ASN B  53     -67.917 -43.417 -61.988  1.00 28.56           C
ATOM   2920  C   ASN B  53     -67.907 -42.487 -63.195  1.00 32.46           C
ATOM   2921  O   ASN B  53     -68.041 -42.991 -64.315  1.00 38.20           O
ATOM   2922  CB  ASN B  53     -68.996 -44.532 -62.227  1.00 31.93           C
ATOM   2923  CG  ASN B  53     -70.431 -43.986 -62.296  1.00 37.06           C
ATOM   2924  OD1 ASN B  53     -70.673 -42.780 -62.249  1.00 38.44           O
ATOM   2925  ND2 ASN B  53     -71.382 -44.887 -62.453  1.00 37.03           N
ATOM   2926  N   GLN B  54     -67.794 -41.166 -63.025  1.00 35.09           N
ATOM   2927  CA  GLN B  54     -67.772 -40.225 -64.142  1.00 34.04           C
ATOM   2928  C   GLN B  54     -66.346 -40.005 -64.626  1.00 37.89           C
ATOM   2929  O   GLN B  54     -65.426 -39.807 -63.828  1.00 38.28           O
ATOM   2930  CB  GLN B  54     -68.380 -38.876 -63.748  1.00 33.30           C
ATOM   2931  CG  GLN B  54     -69.815 -38.943 -63.266  1.00 34.67           C
ATOM   2932  CD  GLN B  54     -70.746 -39.446 -64.359  1.00 43.31           C
ATOM   2933  OE1 GLN B  54     -70.985 -38.748 -65.341  1.00 47.07           O
ATOM   2934  NE2 GLN B  54     -71.255 -40.669 -64.203  1.00 38.25           N
ATOM   2935  N   ARG B  55     -66.181 -39.974 -65.940  1.00 40.15           N
ATOM   2936  CA  ARG B  55     -64.874 -39.911 -66.558  1.00 37.85           C
ATOM   2937  C   ARG B  55     -64.713 -38.565 -67.238  1.00 42.26           C
ATOM   2938  O   ARG B  55     -65.552 -38.210 -68.078  1.00 44.17           O
ATOM   2939  CB  ARG B  55     -64.737 -41.049 -67.568  1.00 43.11           C
ATOM   2940  CG  ARG B  55     -63.435 -41.768 -67.503  1.00 39.58           C
ATOM   2941  CD  ARG B  55     -63.237 -42.699 -68.672  1.00 41.96           C
ATOM   2942  NE  ARG B  55     -64.460 -43.392 -69.057  1.00 49.14           N
ATOM   2943  CZ  ARG B  55     -65.136 -43.151 -70.175  1.00 51.17           C
ATOM   2944  NH1 ARG B  55     -64.698 -42.242 -71.039  1.00 46.74           N
ATOM   2945  NH2 ARG B  55     -66.241 -43.835 -70.435  1.00 54.49           N
ATOM   2946  N   PRO B  56     -63.702 -37.772 -66.889  1.00 40.68           N
ATOM   2947  CA  PRO B  56     -63.503 -36.485 -67.560  1.00 44.71           C
ATOM   2948  C   PRO B  56     -63.135 -36.669 -69.021  1.00 49.20           C
ATOM   2949  O   PRO B  56     -62.670 -37.731 -69.452  1.00 46.97           O
```

[2234]

```
ATOM   2950  CB  PRO B  56     -62.343 -35.842 -66.789  1.00 46.21           C
ATOM   2951  CG  PRO B  56     -62.176 -36.661 -65.547  1.00 46.93           C
ATOM   2952  CD  PRO B  56     -62.677 -38.033 -65.870  1.00 42.12           C
ATOM   2953  N   SER B  57     -63.334 -35.588 -69.778  1.00 45.78           N
ATOM   2954  CA  SER B  57     -62.894 -35.551 -71.164  1.00 48.93           C
ATOM   2955  C   SER B  57     -61.385 -35.713 -71.220  1.00 50.06           C
ATOM   2956  O   SER B  57     -60.649 -35.076 -70.457  1.00 49.53           O
ATOM   2957  CB  SER B  57     -63.302 -34.233 -71.831  1.00 47.59           C
ATOM   2958  N   GLY B  58     -60.928 -36.561 -72.136  1.00 45.72           N
ATOM   2959  CA  GLY B  58     -59.531 -36.851 -72.305  1.00 43.09           C
ATOM   2960  C   GLY B  58     -59.059 -38.114 -71.612  1.00 45.91           C
ATOM   2961  O   GLY B  58     -57.968 -38.599 -71.928  1.00 52.17           O
ATOM   2962  N   VAL B  59     -59.835 -38.657 -70.679  1.00 45.12           N
ATOM   2963  CA  VAL B  59     -59.479 -39.897 -69.995  1.00 43.46           C
ATOM   2964  C   VAL B  59     -60.109 -41.059 -70.757  1.00 40.31           C
ATOM   2965  O   VAL B  59     -61.333 -41.050 -70.975  1.00 39.88           O
ATOM   2966  CB  VAL B  59     -59.928 -39.890 -68.530  1.00 42.05           C
ATOM   2967  CG1 VAL B  59     -59.600 -41.231 -67.868  1.00 34.09           C
ATOM   2968  CG2 VAL B  59     -59.266 -38.743 -67.795  1.00 37.89           C
ATOM   2969  N   PRO B  60     -59.324 -42.040 -71.196  1.00 34.97           N
ATOM   2970  CA  PRO B  60     -59.872 -43.150 -71.980  1.00 35.62           C
ATOM   2971  C   PRO B  60     -60.814 -44.020 -71.172  1.00 40.89           C
ATOM   2972  O   PRO B  60     -60.745 -44.086 -69.942  1.00 38.44           O
ATOM   2973  CB  PRO B  60     -58.626 -43.933 -72.408  1.00 40.90           C
ATOM   2974  CG  PRO B  60     -57.598 -43.597 -71.402  1.00 38.75           C
ATOM   2975  CD  PRO B  60     -57.887 -42.199 -70.927  1.00 39.88           C
ATOM   2976  N   ASP B  61     -61.707 -44.691 -71.879  1.00 38.82           N
ATOM   2977  CA  ASP B  61     -62.655 -45.512 -71.152  1.00 40.57           C
ATOM   2978  C   ASP B  61     -62.003 -46.798 -70.591  1.00 39.74           C
ATOM   2979  O   ASP B  61     -62.702 -47.662 -70.060  1.00 41.08           O
ATOM   2980  CB  ASP B  61     -63.880 -45.819 -72.020  1.00 41.35           C
ATOM   2981  CG  ASP B  61     -63.561 -46.641 -73.250  1.00 49.18           C
ATOM   2982  OD1 ASP B  61     -62.379 -46.757 -73.653  1.00 50.76           O
ATOM   2983  OD2 ASP B  61     -64.531 -47.137 -73.853  1.00 49.46           O
ATOM   2984  N   ARG B  62     -60.679 -46.932 -70.715  1.00 38.44           N
ATOM   2985  CA  ARG B  62     -59.982 -47.990 -70.002  1.00 40.59           C
ATOM   2986  C   ARG B  62     -60.070 -47.814 -68.493  1.00 37.88           C
ATOM   2987  O   ARG B  62     -59.895 -48.793 -67.757  1.00 38.81           O
ATOM   2988  CB  ARG B  62     -58.514 -48.015 -70.418  1.00 36.93           C
ATOM   2989  CG  ARG B  62     -58.278 -48.180 -71.904  1.00 42.98           C
ATOM   2990  CD  ARG B  62     -56.785 -48.456 -72.208  1.00 46.04           C
ATOM   2991  NE  ARG B  62     -55.933 -47.294 -71.949  1.00 42.12           N
ATOM   2992  CZ  ARG B  62     -55.132 -47.173 -70.893  1.00 45.78           C
ATOM   2993  NH1 ARG B  62     -55.064 -48.155 -70.000  1.00 41.12           N
ATOM   2994  NH2 ARG B  62     -54.385 -46.079 -70.740  1.00 40.67           N
ATOM   2995  N   PHE B  63     -60.362 -46.599 -68.027  1.00 37.29           N
ATOM   2996  CA  PHE B  63     -60.575 -46.294 -66.621  1.00 32.06           C
ATOM   2997  C   PHE B  63     -62.061 -46.321 -66.312  1.00 37.45           C
ATOM   2998  O   PHE B  63     -62.850 -45.663 -67.003  1.00 41.17           O
ATOM   2999  CB  PHE B  63     -60.007 -44.916 -66.280  1.00 38.56           C
ATOM   3000  CG  PHE B  63     -58.522 -44.833 -66.445  1.00 34.75           C
ATOM   3001  CD1 PHE B  63     -57.965 -44.581 -67.688  1.00 37.55           C
ATOM   3002  CD2 PHE B  63     -57.678 -45.043 -65.370  1.00 39.00           C
ATOM   3003  CE1 PHE B  63     -56.585 -44.529 -67.852  1.00 36.59           C
ATOM   3004  CE2 PHE B  63     -56.309 -44.992 -65.529  1.00 34.38           C
ATOM   3005  CZ  PHE B  63     -55.765 -44.724 -66.777  1.00 32.03           C
ATOM   3006  N   SER B  64     -62.446 -47.062 -65.274  1.00 29.36           N
ATOM   3007  CA  SER B  64     -63.822 -47.015 -64.801  1.00 35.92           C
ATOM   3008  C   SER B  64     -63.844 -47.141 -63.286  1.00 33.75           C
ATOM   3009  O   SER B  64     -62.942 -47.711 -62.673  1.00 35.54           O
ATOM   3010  CB  SER B  64     -64.702 -48.105 -65.464  1.00 34.16           C
ATOM   3011  OG  SER B  64     -64.212 -49.410 -65.193  1.00 36.44           O
ATOM   3012  N   GLY B  65     -64.883 -46.600 -62.681  1.00 34.30           N
ATOM   3013  CA  GLY B  65     -65.007 -46.624 -61.239  1.00 34.54           C
ATOM   3014  C   GLY B  65     -66.355 -47.176 -60.842  1.00 36.08           C
ATOM   3015  O   GLY B  65     -67.320 -47.110 -61.599  1.00 32.11           O
ATOM   3016  N   SER B  66     -66.398 -47.755 -59.644  1.00 34.58           N
ATOM   3017  CA  SER B  66     -67.629 -48.278 -59.073  1.00 37.12           C
```

[2235]

```
ATOM   3018  C   SER B  66     -67.513 -48.223 -57.559  1.00 36.58           C
ATOM   3019  O   SER B  66     -66.435 -47.983 -57.005  1.00 34.13           O
ATOM   3020  CB  SER B  66     -67.922 -49.702 -59.556  1.00 35.75           C
ATOM   3021  OG  SER B  66     -66.850 -50.567 -59.221  1.00 41.57           O
ATOM   3022  N   ILE B  67     -68.646 -48.437 -56.900  1.00 33.55           N
ATOM   3023  CA  ILE B  67     -68.752 -48.493 -55.450  1.00 32.04           C
ATOM   3024  C   ILE B  67     -69.518 -49.754 -55.084  1.00 35.01           C
ATOM   3025  O   ILE B  67     -70.353 -50.236 -55.850  1.00 34.99           O
ATOM   3026  CB  ILE B  67     -69.462 -47.249 -54.872  1.00 36.96           C
ATOM   3027  CG1 ILE B  67     -70.949 -47.258 -55.264  1.00 35.68           C
ATOM   3028  CG2 ILE B  67     -68.794 -45.976 -55.348  1.00 33.44           C
ATOM   3029  CD1 ILE B  67     -71.759 -46.143 -54.629  1.00 35.68           C
ATOM   3030  N   ASP B  68     -69.217 -50.301 -53.911  1.00 40.48           N
ATOM   3031  CA  ASP B  68     -69.890 -51.483 -53.376  1.00 35.86           C
ATOM   3032  C   ASP B  68     -70.363 -51.102 -51.987  1.00 37.51           C
ATOM   3033  O   ASP B  68     -69.585 -51.161 -51.032  1.00 40.40           O
ATOM   3034  CB  ASP B  68     -68.965 -52.697 -53.335  1.00 41.84           C
ATOM   3035  CG  ASP B  68     -69.604 -53.919 -52.651  1.00 44.57           C
ATOM   3036  OD1 ASP B  68     -70.781 -53.871 -52.252  1.00 49.18           O
ATOM   3037  OD2 ASP B  68     -68.914 -54.941 -52.492  1.00 49.66           O
ATOM   3038  N   SER B  69     -71.642 -50.740 -51.894  1.00 37.25           N
ATOM   3039  CA  SER B  69     -72.207 -50.253 -50.644  1.00 40.38           C
ATOM   3040  C   SER B  69     -72.090 -51.282 -49.537  1.00 43.80           C
ATOM   3041  O   SER B  69     -71.921 -50.924 -48.363  1.00 46.26           O
ATOM   3042  CB  SER B  69     -73.678 -49.898 -50.853  1.00 46.94           C
ATOM   3043  OG  SER B  69     -74.262 -49.514 -49.626  1.00 53.80           O
ATOM   3044  N   SER B  70     -72.147 -52.562 -49.901  1.00 43.16           N
ATOM   3045  CA  SER B  70     -72.197 -53.638 -48.924  1.00 45.28           C
ATOM   3046  C   SER B  70     -70.858 -53.826 -48.210  1.00 46.30           C
ATOM   3047  O   SER B  70     -70.830 -54.181 -47.026  1.00 47.17           O
ATOM   3048  CB  SER B  70     -72.632 -54.921 -49.642  1.00 44.04           C
ATOM   3049  OG  SER B  70     -72.410 -56.055 -48.841  1.00 56.31           O
ATOM   3050  N   SER B  71     -69.743 -53.596 -48.899  1.00 45.45           N
ATOM   3051  CA  SER B  71     -68.426 -53.645 -48.278  1.00 38.65           C
ATOM   3052  C   SER B  71     -67.878 -52.266 -47.944  1.00 40.20           C
ATOM   3053  O   SER B  71     -66.719 -52.163 -47.531  1.00 38.56           O
ATOM   3054  CB  SER B  71     -67.446 -54.377 -49.188  1.00 41.32           C
ATOM   3055  OG  SER B  71     -67.446 -53.790 -50.471  1.00 46.24           O
ATOM   3056  N   ASN B  72     -68.671 -51.204 -48.156  1.00 38.84           N
ATOM   3057  CA  ASN B  72     -68.262 -49.830 -47.877  1.00 36.25           C
ATOM   3058  C   ASN B  72     -66.958 -49.492 -48.610  1.00 35.19           C
ATOM   3059  O   ASN B  72     -66.029 -48.908 -48.046  1.00 33.87           O
ATOM   3060  CB  ASN B  72     -68.132 -49.599 -46.365  1.00 34.18           C
ATOM   3061  CG  ASN B  72     -68.693 -48.270 -45.925  1.00 34.81           C
ATOM   3062  OD1 ASN B  72     -69.719 -47.826 -46.435  1.00 36.34           O
ATOM   3063  ND2 ASN B  72     -68.004 -47.605 -44.986  1.00 32.49           N
ATOM   3064  N   SER B  73     -66.895 -49.866 -49.887  1.00 31.15           N
ATOM   3065  CA  SER B  73     -65.661 -49.750 -50.640  1.00 32.31           C
ATOM   3066  C   SER B  73     -65.949 -49.240 -52.042  1.00 32.12           C
ATOM   3067  O   SER B  73     -67.059 -49.371 -52.562  1.00 36.21           O
ATOM   3068  CB  SER B  73     -64.910 -51.095 -50.713  1.00 38.93           C
ATOM   3069  OG  SER B  73     -65.562 -52.011 -51.587  1.00 41.54           O
ATOM   3070  N   ALA B  74     -64.933 -48.627 -52.645  1.00 32.88           N
ATOM   3071  CA  ALA B  74     -64.993 -48.207 -54.036  1.00 31.58           C
ATOM   3072  C   ALA B  74     -63.804 -48.820 -54.758  1.00 30.48           C
ATOM   3073  O   ALA B  74     -62.850 -49.276 -54.128  1.00 32.63           O
ATOM   3074  CB  ALA B  74     -65.015 -46.680 -54.183  1.00 29.86           C
ATOM   3075  N   SER B  75     -63.890 -48.896 -56.084  1.00 31.67           N
ATOM   3076  CA  SER B  75     -62.843 -49.550 -56.859  1.00 31.49           C
ATOM   3077  C   SER B  75     -62.581 -48.784 -58.139  1.00 32.73           C
ATOM   3078  O   SER B  75     -63.504 -48.238 -58.745  1.00 29.51           O
ATOM   3079  CB  SER B  75     -63.191 -51.000 -57.208  1.00 31.76           C
ATOM   3080  OG  SER B  75     -63.384 -51.775 -56.028  1.00 40.17           O
ATOM   3081  N   LEU B  76     -61.308 -48.706 -58.510  1.00 29.82           N
ATOM   3082  CA  LEU B  76     -60.880 -48.218 -59.809  1.00 28.91           C
ATOM   3083  C   LEU B  76     -60.402 -49.401 -60.635  1.00 31.82           C
ATOM   3084  O   LEU B  76     -59.570 -50.190 -60.175  1.00 35.81           O
ATOM   3085  CB  LEU B  76     -59.750 -47.192 -59.672  1.00 32.14           C
```

[2236]

```
ATOM   3086  CG  LEU B  76     -59.108 -46.735 -60.982  1.00 33.77           C
ATOM   3087  CD1 LEU B  76     -60.097 -45.882 -61.791  1.00 30.64           C
ATOM   3088  CD2 LEU B  76     -57.797 -45.969 -60.732  1.00 34.12           C
ATOM   3089  N   THR B  77     -60.898 -49.510 -61.856  1.00 32.05           N
ATOM   3090  CA  THR B  77     -60.502 -50.581 -62.751  1.00 30.39           C
ATOM   3091  C   THR B  77     -59.847 -49.982 -63.978  1.00 31.00           C
ATOM   3092  O   THR B  77     -60.408 -49.072 -64.595  1.00 35.60           O
ATOM   3093  CB  THR B  77     -61.715 -51.427 -63.143  1.00 34.36           C
ATOM   3094  OG1 THR B  77     -62.304 -51.944 -61.957  1.00 36.57           O
ATOM   3095  CG2 THR B  77     -61.306 -52.593 -64.011  1.00 32.16           C
ATOM   3096  N   ILE B  78     -58.665 -50.488 -64.325  1.00 30.53           N
ATOM   3097  CA  ILE B  78     -57.935 -50.079 -65.517  1.00 31.71           C
ATOM   3098  C   ILE B  78     -57.811 -51.296 -66.422  1.00 33.71           C
ATOM   3099  O   ILE B  78     -57.067 -52.236 -66.115  1.00 35.62           O
ATOM   3100  CB  ILE B  78     -56.545 -49.513 -65.189  1.00 34.85           C
ATOM   3101  CG1 ILE B  78     -56.628 -48.466 -64.077  1.00 33.25           C
ATOM   3102  CG2 ILE B  78     -55.939 -48.870 -66.420  1.00 33.52           C
ATOM   3103  CD1 ILE B  78     -55.267 -47.925 -63.657  1.00 29.89           C
ATOM   3104  N   SER B  79     -58.510 -51.277 -67.544  1.00 33.06           N
ATOM   3105  CA  SER B  79     -58.343 -52.329 -68.530  1.00 37.38           C
ATOM   3106  C   SER B  79     -57.220 -51.978 -69.500  1.00 36.64           C
ATOM   3107  O   SER B  79     -56.825 -50.820 -69.639  1.00 39.26           O
ATOM   3108  CB  SER B  79     -59.643 -52.551 -69.295  1.00 38.01           C
ATOM   3109  OG  SER B  79     -59.829 -51.507 -70.233  1.00 41.42           O
ATOM   3110  N   GLY B  80     -56.702 -53.005 -70.170  1.00 43.73           N
ATOM   3111  CA  GLY B  80     -55.675 -52.842 -71.191  1.00 43.66           C
ATOM   3112  C   GLY B  80     -54.454 -52.072 -70.724  1.00 43.33           C
ATOM   3113  O   GLY B  80     -53.995 -51.147 -71.399  1.00 43.73           O
ATOM   3114  N   LEU B  81     -53.900 -52.488 -69.589  1.00 41.40           N
ATOM   3115  CA  LEU B  81     -52.861 -51.730 -68.907  1.00 42.01           C
ATOM   3116  C   LEU B  81     -51.704 -51.381 -69.838  1.00 43.49           C
ATOM   3117  O   LEU B  81     -51.136 -52.251 -70.498  1.00 44.82           O
ATOM   3118  CB  LEU B  81     -52.361 -52.549 -67.719  1.00 38.18           C
ATOM   3119  CG  LEU B  81     -51.933 -51.795 -66.470  1.00 46.64           C
ATOM   3120  CD1 LEU B  81     -52.891 -50.644 -66.134  1.00 38.76           C
ATOM   3121  CD2 LEU B  81     -51.838 -52.790 -65.332  1.00 40.57           C
ATOM   3122  N   LYS B  82     -51.352 -50.098 -69.870  1.00 43.33           N
ATOM   3123  CA  LYS B  82     -50.210 -49.583 -70.612  1.00 44.40           C
ATOM   3124  C   LYS B  82     -49.170 -49.029 -69.645  1.00 45.06           C
ATOM   3125  O   LYS B  82     -49.484 -48.637 -68.517  1.00 43.76           O
ATOM   3126  CB  LYS B  82     -50.649 -48.500 -71.610  1.00 43.16           C
ATOM   3127  CG  LYS B  82     -51.708 -48.981 -72.626  1.00 46.66           C
ATOM   3128  CD  LYS B  82     -52.320 -47.833 -73.436  1.00 50.26           C
ATOM   3129  N   THR B  83     -47.914 -48.997 -70.097  1.00 45.85           N
ATOM   3130  CA  THR B  83     -46.834 -48.530 -69.228  1.00 50.20           C
ATOM   3131  C   THR B  83     -47.056 -47.100 -68.745  1.00 45.44           C
ATOM   3132  O   THR B  83     -46.642 -46.752 -67.634  1.00 45.67           O
ATOM   3133  CB  THR B  83     -45.477 -48.661 -69.934  1.00 56.79           C
ATOM   3134  OG1 THR B  83     -45.541 -48.060 -71.233  1.00 58.54           O
ATOM   3135  CG2 THR B  83     -45.071 -50.126 -70.060  1.00 57.65           C
ATOM   3136  N   GLU B  84     -47.714 -46.258 -69.539  1.00 44.95           N
ATOM   3137  CA  GLU B  84     -47.969 -44.907 -69.056  1.00 50.73           C
ATOM   3138  C   GLU B  84     -48.989 -44.868 -67.924  1.00 44.62           C
ATOM   3139  O   GLU B  84     -49.166 -43.808 -67.315  1.00 45.25           O
ATOM   3140  CB  GLU B  84     -48.399 -43.995 -70.209  1.00 51.96           C
ATOM   3141  CG  GLU B  84     -49.540 -44.536 -71.046  1.00 52.33           C
ATOM   3142  CD  GLU B  84     -49.048 -45.409 -72.196  1.00 60.96           C
ATOM   3143  OE1 GLU B  84     -48.012 -46.102 -72.041  1.00 58.89           O
ATOM   3144  OE2 GLU B  84     -49.696 -45.399 -73.265  1.00 71.69           O
ATOM   3145  N   ASP B  85     -49.668 -45.979 -67.633  1.00 39.37           N
ATOM   3146  CA  ASP B  85     -50.555 -46.033 -66.475  1.00 41.06           C
ATOM   3147  C   ASP B  85     -49.793 -46.197 -65.171  1.00 40.59           C
ATOM   3148  O   ASP B  85     -50.398 -46.106 -64.093  1.00 37.88           O
ATOM   3149  CB  ASP B  85     -51.565 -47.169 -66.624  1.00 38.88           C
ATOM   3150  CG  ASP B  85     -52.384 -47.047 -67.885  1.00 42.86           C
ATOM   3151  OD1 ASP B  85     -52.624 -45.897 -68.337  1.00 42.08           O
ATOM   3152  OD2 ASP B  85     -52.739 -48.109 -68.444  1.00 42.02           O
ATOM   3153  N   GLU B  86     -48.493 -46.454 -65.243  1.00 38.46           N
```

[2237]

```
ATOM   3154  CA  GLU B  86     -47.690 -46.546 -64.037  1.00 39.22           C
ATOM   3155  C   GLU B  86     -47.724 -45.218 -63.295  1.00 37.51           C
ATOM   3156  O   GLU B  86     -47.322 -44.186 -63.834  1.00 39.52           O
ATOM   3157  CB  GLU B  86     -46.265 -46.940 -64.382  1.00 38.74           C
ATOM   3158  CG  GLU B  86     -45.425 -47.111 -63.140  1.00 46.87           C
ATOM   3159  CD  GLU B  86     -44.276 -48.093 -63.321  1.00 47.71           C
ATOM   3160  OE1 GLU B  86     -44.399 -49.057 -64.122  1.00 46.51           O
ATOM   3161  OE2 GLU B  86     -43.266 -47.917 -62.612  1.00 55.23           O
ATOM   3162  N   ALA B  87     -48.235 -45.244 -62.067  1.00 35.88           N
ATOM   3163  CA  ALA B  87     -48.495 -44.032 -61.309  1.00 37.31           C
ATOM   3164  C   ALA B  87     -48.989 -44.390 -59.925  1.00 32.15           C
ATOM   3165  O   ALA B  87     -49.158 -45.566 -59.592  1.00 32.80           O
ATOM   3166  CB  ALA B  87     -49.541 -43.142 -61.995  1.00 32.68           C
ATOM   3167  N   ASP B  88     -49.203 -43.368 -59.123  1.00 29.76           N
ATOM   3168  CA  ASP B  88     -49.803 -43.492 -57.811  1.00 34.74           C
ATOM   3169  C   ASP B  88     -51.268 -43.065 -57.931  1.00 34.18           C
ATOM   3170  O   ASP B  88     -51.555 -41.971 -58.426  1.00 34.10           O
ATOM   3171  CB  ASP B  88     -49.035 -42.612 -56.831  1.00 38.93           C
ATOM   3172  CG  ASP B  88     -49.150 -43.084 -55.416  1.00 46.07           C
ATOM   3173  OD1 ASP B  88     -50.093 -43.856 -55.118  1.00 43.79           O
ATOM   3174  OD2 ASP B  88     -48.282 -42.689 -54.603  1.00 52.16           O
ATOM   3175  N   TYR B  89     -52.190 -43.928 -57.525  1.00 33.80           N
ATOM   3176  CA  TYR B  89     -53.615 -43.626 -57.622  1.00 30.63           C
ATOM   3177  C   TYR B  89     -54.214 -43.445 -56.237  1.00 28.86           C
ATOM   3178  O   TYR B  89     -54.092 -44.327 -55.384  1.00 35.10           O
ATOM   3179  CB  TYR B  89     -54.368 -44.722 -58.375  1.00 29.38           C
ATOM   3180  CG  TYR B  89     -53.966 -44.835 -59.826  1.00 32.87           C
ATOM   3181  CD1 TYR B  89     -52.858 -45.598 -60.205  1.00 32.31           C
ATOM   3182  CD2 TYR B  89     -54.673 -44.160 -60.817  1.00 27.86           C
ATOM   3183  CE1 TYR B  89     -52.476 -45.687 -61.531  1.00 30.62           C
ATOM   3184  CE2 TYR B  89     -54.299 -44.239 -62.135  1.00 29.02           C
ATOM   3185  CZ  TYR B  89     -53.195 -45.004 -62.491  1.00 31.47           C
ATOM   3186  OH  TYR B  89     -52.828 -45.100 -63.815  1.00 34.02           O
ATOM   3187  N   TYR B  90     -54.908 -42.330 -56.042  1.00 31.83           N
ATOM   3188  CA  TYR B  90     -55.507 -41.964 -54.767  1.00 31.22           C
ATOM   3189  C   TYR B  90     -57.026 -41.979 -54.880  1.00 33.08           C
ATOM   3190  O   TYR B  90     -57.588 -41.341 -55.777  1.00 31.48           O
ATOM   3191  CB  TYR B  90     -55.057 -40.562 -54.338  1.00 33.93           C
ATOM   3192  CG  TYR B  90     -53.576 -40.405 -54.033  1.00 25.94           C
ATOM   3193  CD1 TYR B  90     -52.657 -40.134 -55.048  1.00 29.69           C
ATOM   3194  CD2 TYR B  90     -53.105 -40.475 -52.725  1.00 30.78           C
ATOM   3195  CE1 TYR B  90     -51.307 -39.973 -54.770  1.00 30.11           C
ATOM   3196  CE2 TYR B  90     -51.755 -40.317 -52.439  1.00 31.55           C
ATOM   3197  CZ  TYR B  90     -50.867 -40.069 -53.464  1.00 31.11           C
ATOM   3198  OH  TYR B  90     -49.533 -39.903 -53.169  1.00 37.05           O
ATOM   3199  N   CYS B  91     -57.685 -42.693 -53.966  1.00 32.29           N
ATOM   3200  CA  CYS B  91     -59.112 -42.523 -53.774  1.00 35.41           C
ATOM   3201  C   CYS B  91     -59.321 -41.381 -52.796  1.00 30.84           C
ATOM   3202  O   CYS B  91     -58.452 -41.070 -51.978  1.00 28.10           O
ATOM   3203  CB  CYS B  91     -59.790 -43.801 -53.247  1.00 34.25           C
ATOM   3204  SG  CYS B  91     -59.085 -44.451 -51.691  1.00 44.75           S
ATOM   3205  N   GLN B  92     -60.490 -40.759 -52.889  1.00 29.20           N
ATOM   3206  CA  GLN B  92     -60.795 -39.606 -52.062  1.00 28.46           C
ATOM   3207  C   GLN B  92     -62.311 -39.474 -51.937  1.00 28.74           C
ATOM   3208  O   GLN B  92     -63.033 -39.658 -52.919  1.00 30.10           O
ATOM   3209  CB  GLN B  92     -60.196 -38.345 -52.678  1.00 28.36           C
ATOM   3210  CG  GLN B  92     -60.507 -37.111 -51.883  1.00 29.33           C
ATOM   3211  CD  GLN B  92     -61.680 -36.355 -52.449  1.00 32.32           C
ATOM   3212  OE1 GLN B  92     -61.807 -36.190 -53.659  1.00 36.76           O
ATOM   3213  NE2 GLN B  92     -62.561 -35.900 -51.567  1.00 32.96           N
ATOM   3214  N   THR B  93     -62.788 -39.172 -50.735  1.00 28.95           N
ATOM   3215  CA  THR B  93     -64.201 -38.822 -50.554  1.00 27.07           C
ATOM   3216  C   THR B  93     -64.301 -37.831 -49.393  1.00 27.47           C
ATOM   3217  O   THR B  93     -63.330 -37.140 -49.061  1.00 27.74           O
ATOM   3218  CB  THR B  93     -65.060 -40.085 -50.371  1.00 27.52           C
ATOM   3219  OG1 THR B  93     -66.460 -39.727 -50.337  1.00 29.33           O
ATOM   3220  CG2 THR B  93     -64.678 -40.824 -49.089  1.00 30.29           C
ATOM   3221  N   TYR B  94     -65.487 -37.700 -48.814  1.00 28.11           N
```

[2238]

```
ATOM   3222  CA  TYR B  94     -65.724 -36.649 -47.842  1.00 28.82           C
ATOM   3223  C   TYR B  94     -66.865 -37.076 -46.923  1.00 30.84           C
ATOM   3224  O   TYR B  94     -67.475 -38.135 -47.103  1.00 32.09           O
ATOM   3225  CB  TYR B  94     -66.006 -35.320 -48.567  1.00 30.21           C
ATOM   3226  CG  TYR B  94     -67.134 -35.447 -49.573  1.00 31.66           C
ATOM   3227  CD1 TYR B  94     -66.893 -35.942 -50.854  1.00 29.51           C
ATOM   3228  CD2 TYR B  94     -68.441 -35.107 -49.236  1.00 29.30           C
ATOM   3229  CE1 TYR B  94     -67.922 -36.081 -51.776  1.00 25.46           C
ATOM   3230  CE2 TYR B  94     -69.472 -35.237 -50.147  1.00 28.93           C
ATOM   3231  CZ  TYR B  94     -69.213 -35.720 -51.414  1.00 30.44           C
ATOM   3232  OH  TYR B  94     -70.246 -35.863 -52.319  1.00 30.08           O
ATOM   3233  N   ASP B  95     -67.137 -36.236 -45.923  1.00 31.58           N
ATOM   3234  CA  ASP B  95     -68.308 -36.286 -45.057  1.00 31.89           C
ATOM   3235  C   ASP B  95     -68.806 -34.833 -45.025  1.00 31.06           C
ATOM   3236  O   ASP B  95     -68.303 -34.034 -45.817  1.00 32.15           O
ATOM   3237  CB  ASP B  95     -67.953 -36.907 -43.689  1.00 32.23           C
ATOM   3238  CG  ASP B  95     -67.116 -35.981 -42.770  1.00 38.75           C
ATOM   3239  OD1 ASP B  95     -67.019 -34.741 -42.981  1.00 34.32           O
ATOM   3240  OD2 ASP B  95     -66.538 -36.526 -41.799  1.00 41.63           O
ATOM   3241  N   PRO B  96     -69.775 -34.432 -44.187  1.00 30.98           N
ATOM   3242  CA  PRO B  96     -70.271 -33.044 -44.277  1.00 31.73           C
ATOM   3243  C   PRO B  96     -69.219 -31.968 -44.048  1.00 36.58           C
ATOM   3244  O   PRO B  96     -69.423 -30.819 -44.473  1.00 35.42           O
ATOM   3245  CB  PRO B  96     -71.369 -32.993 -43.204  1.00 34.15           C
ATOM   3246  CG  PRO B  96     -71.877 -34.392 -43.137  1.00 34.81           C
ATOM   3247  CD  PRO B  96     -70.624 -35.235 -43.282  1.00 31.05           C
ATOM   3248  N   TYR B  97     -68.096 -32.291 -43.419  1.00 37.30           N
ATOM   3249  CA  TYR B  97     -67.082 -31.283 -43.138  1.00 36.48           C
ATOM   3250  C   TYR B  97     -65.724 -31.625 -43.739  1.00 36.42           C
ATOM   3251  O   TYR B  97     -65.171 -30.830 -44.505  1.00 30.61           O
ATOM   3252  CB  TYR B  97     -66.967 -31.086 -41.614  1.00 37.79           C
ATOM   3253  CG  TYR B  97     -66.006 -29.980 -41.220  1.00 38.44           C
ATOM   3254  CD1 TYR B  97     -66.442 -28.660 -41.097  1.00 37.00           C
ATOM   3255  CD2 TYR B  97     -64.666 -30.258 -40.971  1.00 33.82           C
ATOM   3256  CE1 TYR B  97     -65.565 -27.649 -40.732  1.00 34.61           C
ATOM   3257  CE2 TYR B  97     -63.777 -29.256 -40.613  1.00 38.05           C
ATOM   3258  CZ  TYR B  97     -64.232 -27.956 -40.494  1.00 39.25           C
ATOM   3259  OH  TYR B  97     -63.358 -26.956 -40.143  1.00 37.60           O
ATOM   3260  N   SER B  98     -65.178 -32.796 -43.438  1.00 34.91           N
ATOM   3261  CA  SER B  98     -63.803 -33.110 -43.804  1.00 33.31           C
ATOM   3262  C   SER B  98     -63.716 -33.787 -45.171  1.00 34.89           C
ATOM   3263  O   SER B  98     -64.645 -34.453 -45.640  1.00 33.18           O
ATOM   3264  CB  SER B  98     -63.179 -34.022 -42.752  1.00 33.77           C
ATOM   3265  OG  SER B  98     -63.606 -33.638 -41.459  1.00 41.25           O
ATOM   3266  N   VAL B  99     -62.552 -33.644 -45.779  1.00 28.81           N
ATOM   3267  CA  VAL B  99     -62.207 -34.292 -47.029  1.00 27.11           C
ATOM   3268  C   VAL B  99     -61.055 -35.213 -46.694  1.00 30.18           C
ATOM   3269  O   VAL B  99     -60.176 -34.833 -45.914  1.00 28.47           O
ATOM   3270  CB  VAL B  99     -61.832 -33.245 -48.099  1.00 28.56           C
ATOM   3271  CG1 VAL B  99     -61.356 -33.874 -49.393  1.00 25.70           C
ATOM   3272  CG2 VAL B  99     -63.042 -32.358 -48.364  1.00 30.82           C
ATOM   3273  N   VAL B 100     -61.085 -36.438 -47.225  1.00 29.41           N
ATOM   3274  CA  VAL B 100     -60.105 -37.458 -46.874  1.00 28.53           C
ATOM   3275  C   VAL B 100     -59.594 -38.111 -48.144  1.00 31.61           C
ATOM   3276  O   VAL B 100     -60.385 -38.518 -49.004  1.00 29.98           O
ATOM   3277  CB  VAL B 100     -60.688 -38.522 -45.921  1.00 32.64           C
ATOM   3278  CG1 VAL B 100     -59.647 -39.615 -45.609  1.00 30.33           C
ATOM   3279  CG2 VAL B 100     -61.193 -37.887 -44.649  1.00 30.04           C
ATOM   3280  N   PHE B 101     -58.277 -38.220 -48.243  1.00 26.47           N
ATOM   3281  CA  PHE B 101     -57.595 -38.982 -49.276  1.00 30.58           C
ATOM   3282  C   PHE B 101     -57.129 -40.305 -48.680  1.00 34.44           C
ATOM   3283  O   PHE B 101     -56.755 -40.364 -47.507  1.00 35.08           O
ATOM   3284  CB  PHE B 101     -56.388 -38.211 -49.808  1.00 31.80           C
ATOM   3285  CG  PHE B 101     -56.750 -37.005 -50.640  1.00 33.37           C
ATOM   3286  CD1 PHE B 101     -57.152 -35.821 -50.034  1.00 28.86           C
ATOM   3287  CD2 PHE B 101     -56.665 -37.052 -52.027  1.00 29.24           C
ATOM   3288  CE1 PHE B 101     -57.478 -34.711 -50.802  1.00 28.01           C
ATOM   3289  CE2 PHE B 101     -56.976 -35.948 -52.791  1.00 27.24           C
```

[2239]

```
ATOM   3290  CZ  PHE B 101     -57.388 -34.777 -52.173  1.00 28.83           C
ATOM   3291  N   GLY B 102     -57.188 -41.367 -49.477  1.00 31.80           N
ATOM   3292  CA  GLY B 102     -56.489 -42.585 -49.126  1.00 33.01           C
ATOM   3293  C   GLY B 102     -54.973 -42.405 -49.193  1.00 31.48           C
ATOM   3294  O   GLY B 102     -54.439 -41.372 -49.608  1.00 27.54           O
ATOM   3295  N   GLY B 103     -54.261 -43.442 -48.758  1.00 32.46           N
ATOM   3296  CA  GLY B 103     -52.812 -43.342 -48.734  1.00 30.64           C
ATOM   3297  C   GLY B 103     -52.152 -43.372 -50.096  1.00 32.68           C
ATOM   3298  O   GLY B 103     -50.963 -43.067 -50.184  1.00 34.83           O
ATOM   3299  N   GLY B 104     -52.879 -43.708 -51.157  1.00 33.93           N
ATOM   3300  CA  GLY B 104     -52.236 -43.854 -52.453  1.00 30.95           C
ATOM   3301  C   GLY B 104     -51.748 -45.271 -52.705  1.00 33.15           C
ATOM   3302  O   GLY B 104     -51.170 -45.912 -51.818  1.00 26.91           O
ATOM   3303  N   THR B 105     -52.035 -45.794 -53.896  1.00 33.54           N
ATOM   3304  CA  THR B 105     -51.577 -47.112 -54.322  1.00 36.67           C
ATOM   3305  C   THR B 105     -50.622 -46.926 -55.488  1.00 34.08           C
ATOM   3306  O   THR B 105     -51.011 -46.396 -56.532  1.00 33.34           O
ATOM   3307  CB  THR B 105     -52.736 -48.016 -54.744  1.00 31.76           C
ATOM   3308  OG1 THR B 105     -53.635 -48.221 -53.646  1.00 29.73           O
ATOM   3309  CG2 THR B 105     -52.214 -49.373 -55.230  1.00 31.61           C
ATOM   3310  N   LYS B 106     -49.391 -47.370 -55.319  1.00 31.67           N
ATOM   3311  CA  LYS B 106     -48.417 -47.284 -56.394  1.00 34.28           C
ATOM   3312  C   LYS B 106     -48.630 -48.460 -57.324  1.00 30.71           C
ATOM   3313  O   LYS B 106     -48.537 -49.619 -56.896  1.00 30.70           O
ATOM   3314  CB  LYS B 106     -46.985 -47.273 -55.850  1.00 39.16           C
ATOM   3315  CG  LYS B 106     -46.609 -46.005 -55.065  1.00 46.03           C
ATOM   3316  CD  LYS B 106     -45.108 -45.984 -54.720  1.00 51.08           C
ATOM   3317  CE  LYS B 106     -44.771 -44.878 -53.731  1.00 58.73           C
ATOM   3318  NZ  LYS B 106     -45.341 -43.563 -54.155  1.00 62.00           N
ATOM   3319  N   LEU B 107     -48.965 -48.165 -58.577  1.00 29.19           N
ATOM   3320  CA  LEU B 107     -49.227 -49.193 -59.576  1.00 33.29           C
ATOM   3321  C   LEU B 107     -47.972 -49.407 -60.416  1.00 31.48           C
ATOM   3322  O   LEU B 107     -47.514 -48.484 -61.093  1.00 33.83           O
ATOM   3323  CB  LEU B 107     -50.398 -48.789 -60.469  1.00 28.30           C
ATOM   3324  CG  LEU B 107     -50.655 -49.692 -61.681  1.00 33.31           C
ATOM   3325  CD1 LEU B 107     -50.998 -51.120 -61.249  1.00 36.25           C
ATOM   3326  CD2 LEU B 107     -51.737 -49.125 -62.571  1.00 34.36           C
ATOM   3327  N   THR B 108     -47.448 -50.626 -60.407  1.00 35.00           N
ATOM   3328  CA  THR B 108     -46.320 -51.010 -61.252  1.00 38.29           C
ATOM   3329  C   THR B 108     -46.833 -51.839 -62.418  1.00 39.52           C
ATOM   3330  O   THR B 108     -47.535 -52.833 -62.211  1.00 37.88           O
ATOM   3331  CB  THR B 108     -45.274 -51.834 -60.482  1.00 35.49           C
ATOM   3332  OG1 THR B 108     -44.648 -51.041 -59.471  1.00 38.74           O
ATOM   3333  CG2 THR B 108     -44.231 -52.394 -61.430  1.00 36.89           C
ATOM   3334  N   VAL B 109     -46.486 -51.437 -63.632  1.00 36.28           N
ATOM   3335  CA  VAL B 109     -46.766 -52.233 -64.816  1.00 40.46           C
ATOM   3336  C   VAL B 109     -45.500 -53.028 -65.135  1.00 44.07           C
ATOM   3337  O   VAL B 109     -44.517 -52.463 -65.621  1.00 47.32           O
ATOM   3338  CB  VAL B 109     -47.218 -51.349 -65.984  1.00 40.93           C
ATOM   3339  CG1 VAL B 109     -47.517 -52.202 -67.210  1.00 44.14           C
ATOM   3340  CG2 VAL B 109     -48.464 -50.552 -65.578  1.00 41.37           C
ATOM   3341  N   LEU B 110     -45.509 -54.337 -64.862  1.00 49.68           N
ATOM   3342  CA  LEU B 110     -44.286 -55.131 -65.009  1.00 51.43           C
ATOM   3343  C   LEU B 110     -43.714 -55.064 -66.424  1.00 50.73           C
ATOM   3344  O   LEU B 110     -44.433 -54.972 -67.418  1.00 53.26           O
ATOM   3345  CB  LEU B 110     -44.511 -56.598 -64.630  1.00 46.26           C
ATOM   3346  CG  LEU B 110     -44.828 -57.041 -63.199  1.00 45.60           C
ATOM   3347  CD1 LEU B 110     -44.264 -56.051 -62.177  1.00 47.61           C
ATOM   3348  CD2 LEU B 110     -46.279 -57.299 -62.975  1.00 44.70           C
ATOM   3349  N   GLY B 111     -42.395 -55.152 -66.500  1.00 60.56           N
ATOM   3350  CA  GLY B 111     -41.671 -54.844 -67.707  1.00 64.96           C
ATOM   3351  C   GLY B 111     -41.046 -53.464 -67.688  1.00 69.56           C
ATOM   3352  O   GLY B 111     -40.265 -53.142 -68.593  1.00 70.62           O
ATOM   3353  N   GLY B 112     -41.398 -52.625 -66.707  1.00 69.21           N
ATOM   3354  CA  GLY B 112     -40.662 -51.397 -66.464  1.00 72.88           C
ATOM   3355  C   GLY B 112     -41.018 -50.242 -67.373  1.00 79.57           C
ATOM   3356  O   GLY B 112     -41.601 -49.239 -66.943  1.00 76.87           O
ATOM   3357  N   SER B 113     -40.649 -50.382 -68.647  1.00 81.76           N
```

[2240]

```
ATOM   3358  CA  SER B 113     -40.762 -49.310 -69.622  1.00 85.16           C
ATOM   3359  C   SER B 113     -41.281 -49.878 -70.938  1.00 85.62           C
ATOM   3360  O   SER B 113     -41.565 -51.078 -71.064  1.00 81.37           O
ATOM   3361  CB  SER B 113     -39.414 -48.598 -69.817  1.00 85.49           C
ATOM   3362  OG  SER B 113     -38.377 -49.523 -70.108  1.00 79.74           O
ATOM   3363  N   GLY B 114     -41.402 -48.988 -71.921  1.00 84.18           N
ATOM   3364  CA  GLY B 114     -42.006 -49.282 -73.205  1.00 85.69           C
ATOM   3365  C   GLY B 114     -43.074 -48.236 -73.433  1.00 82.09           C
ATOM   3366  O   GLY B 114     -44.137 -48.509 -74.002  1.00 82.07           O
ATOM   3367  N   GLY B 115     -42.770 -47.030 -72.972  1.00 79.71           N
ATOM   3368  CA  GLY B 115     -43.717 -45.935 -72.925  1.00 78.69           C
ATOM   3369  C   GLY B 115     -43.204 -44.886 -71.953  1.00 83.74           C
ATOM   3370  O   GLY B 115     -42.063 -44.950 -71.492  1.00 87.19           O
ATOM   3371  N   SER B 116     -44.069 -43.916 -71.649  1.00 76.96           N
ATOM   3372  CA  SER B 116     -43.660 -42.869 -70.715  1.00 78.69           C
ATOM   3373  C   SER B 116     -44.842 -42.277 -69.949  1.00 77.63           C
ATOM   3374  O   SER B 116     -45.138 -42.715 -68.831  1.00 75.76           O
ATOM   3375  CB  SER B 116     -42.888 -41.763 -71.452  1.00 86.80           C
ATOM   3376  OG  SER B 116     -43.701 -41.061 -72.383  1.00 85.86           O
ATOM   3377  N   GLY B 117     -45.504 -41.268 -70.514  1.00 74.01           N
ATOM   3378  CA  GLY B 117     -46.568 -40.599 -69.796  1.00 64.72           C
ATOM   3379  C   GLY B 117     -46.604 -39.090 -69.954  1.00 70.42           C
ATOM   3380  O   GLY B 117     -47.330 -38.571 -70.809  1.00 71.40           O
ATOM   3381  N   GLY B 118     -45.841 -38.372 -69.137  1.00 68.00           N
ATOM   3382  CA  GLY B 118     -45.889 -36.924 -69.133  1.00 62.78           C
ATOM   3383  C   GLY B 118     -46.848 -36.384 -68.084  1.00 56.41           C
ATOM   3384  O   GLY B 118     -47.759 -37.068 -67.614  1.00 57.16           O
ATOM   3385  N   CYS B 119     -46.623 -35.122 -67.704  1.00 45.31           N
ATOM   3386  CA  CYS B 119     -47.417 -34.497 -66.658  1.00 45.35           C
ATOM   3387  C   CYS B 119     -48.628 -33.767 -67.225  1.00 56.15           C
ATOM   3388  O   CYS B 119     -48.630 -33.336 -68.384  1.00 56.67           O
ATOM   3389  CB  CYS B 119     -46.568 -33.519 -65.861  1.00 44.70           C
ATOM   3390  SG  CYS B 119     -45.213 -34.252 -64.945  1.00 51.38           S
ATOM   3391  N   PRO B 120     -49.667 -33.576 -66.413  1.00 54.84           N
ATOM   3392  CA  PRO B 120     -50.800 -32.763 -66.845  1.00 55.41           C
ATOM   3393  C   PRO B 120     -50.388 -31.307 -66.940  1.00 56.91           C
ATOM   3394  O   PRO B 120     -49.331 -30.932 -66.419  1.00 58.86           O
ATOM   3395  CB  PRO B 120     -51.826 -32.964 -65.718  1.00 50.39           C
ATOM   3396  CG  PRO B 120     -51.294 -34.117 -64.873  1.00 44.25           C
ATOM   3397  CD  PRO B 120     -49.838 -34.094 -65.040  1.00 47.96           C
ATOM   3398  N   PRO B 121     -51.208 -30.449 -67.543  1.00 63.53           N
ATOM   3399  CA  PRO B 121     -50.951 -29.005 -67.483  1.00 62.17           C
ATOM   3400  C   PRO B 121     -51.498 -28.415 -66.188  1.00 59.86           C
ATOM   3401  O   PRO B 121     -52.264 -29.046 -65.463  1.00 63.23           O
ATOM   3402  CB  PRO B 121     -51.698 -28.463 -68.705  1.00 64.92           C
ATOM   3403  CG  PRO B 121     -52.820 -29.429 -68.896  1.00 65.79           C
ATOM   3404  CD  PRO B 121     -52.268 -30.780 -68.512  1.00 61.88           C
ATOM   3405  N   CYS B 122     -51.084 -27.183 -65.899  1.00 62.21           N
ATOM   3406  CA  CYS B 122     -51.566 -26.509 -64.695  1.00 64.60           C
ATOM   3407  C   CYS B 122     -53.022 -26.085 -64.877  1.00 65.65           C
ATOM   3408  O   CYS B 122     -53.372 -25.417 -65.856  1.00 67.26           O
ATOM   3409  CB  CYS B 122     -50.688 -25.298 -64.361  1.00 66.04           C
ATOM   3410  SG  CYS B 122     -48.867 -25.624 -64.343  1.00 80.17           S
ATOM   3411  N   GLY B 123     -53.871 -26.480 -63.930  1.00 62.16           N
ATOM   3412  CA  GLY B 123     -55.305 -26.331 -64.070  1.00 56.87           C
ATOM   3413  C   GLY B 123     -56.021 -27.582 -64.528  1.00 60.43           C
ATOM   3414  O   GLY B 123     -57.241 -27.535 -64.741  1.00 61.55           O
ATOM   3415  N   SER B 124     -55.295 -28.687 -64.719  1.00 62.35           N
ATOM   3416  CA  SER B 124     -55.819 -29.994 -65.111  1.00 66.28           C
ATOM   3417  C   SER B 124     -56.372 -30.005 -66.529  1.00 71.20           C
ATOM   3418  O   SER B 124     -57.000 -30.990 -66.933  1.00 75.73           O
ATOM   3419  CB  SER B 124     -56.901 -30.497 -64.147  1.00 51.20           C
ATOM   3420  OG  SER B 124     -56.404 -30.553 -62.827  1.00 48.03           O
ATOM   3421  N   GLY B 125     -56.149 -28.952 -67.299  1.00 74.52           N
ATOM   3422  CA  GLY B 125     -56.492 -28.940 -68.705  1.00 74.16           C
ATOM   3423  C   GLY B 125     -57.644 -27.998 -69.009  1.00 76.24           C
ATOM   3424  O   GLY B 125     -58.279 -27.418 -68.125  1.00 70.39           O
ATOM   3425  N   GLY B 126     -57.907 -27.871 -70.307  1.00 80.00           N
```

[2241]

```
ATOM   3426  CA  GLY B 126     -58.964 -26.985 -70.757  1.00 72.30           C
ATOM   3427  C   GLY B 126     -58.588 -25.533 -70.536  1.00 71.39           C
ATOM   3428  O   GLY B 126     -57.425 -25.134 -70.679  1.00 73.57           O
ATOM   3429  N   GLU B 127     -59.584 -24.728 -70.168  1.00 67.36           N
ATOM   3430  CA  GLU B 127     -59.372 -23.308 -69.943  1.00 64.48           C
ATOM   3431  C   GLU B 127     -59.147 -22.955 -68.481  1.00 60.64           C
ATOM   3432  O   GLU B 127     -58.777 -21.811 -68.192  1.00 60.77           O
ATOM   3433  CB  GLU B 127     -60.574 -22.509 -70.473  1.00 64.86           C
ATOM   3434  N   VAL B 128     -59.327 -23.902 -67.563  1.00 58.12           N
ATOM   3435  CA  VAL B 128     -59.169 -23.634 -66.139  1.00 52.21           C
ATOM   3436  C   VAL B 128     -57.679 -23.549 -65.825  1.00 54.34           C
ATOM   3437  O   VAL B 128     -56.923 -24.479 -66.118  1.00 59.24           O
ATOM   3438  CB  VAL B 128     -59.850 -24.716 -65.293  1.00 51.72           C
ATOM   3439  CG1 VAL B 128     -59.588 -24.466 -63.815  1.00 47.23           C
ATOM   3440  CG2 VAL B 128     -61.336 -24.781 -65.603  1.00 44.40           C
ATOM   3441  N   GLN B 129     -57.249 -22.423 -65.262  1.00 45.72           N
ATOM   3442  CA  GLN B 129     -55.858 -22.222 -64.883  1.00 48.83           C
ATOM   3443  C   GLN B 129     -55.809 -21.804 -63.424  1.00 45.16           C
ATOM   3444  O   GLN B 129     -56.554 -20.914 -63.005  1.00 42.85           O
ATOM   3445  CB  GLN B 129     -55.168 -21.172 -65.766  1.00 46.59           C
ATOM   3446  N   LEU B 130     -54.932 -22.448 -62.661  1.00 45.45           N
ATOM   3447  CA  LEU B 130     -54.746 -22.180 -61.238  1.00 43.43           C
ATOM   3448  C   LEU B 130     -53.247 -22.060 -61.011  1.00 45.00           C
ATOM   3449  O   LEU B 130     -52.515 -23.038 -61.188  1.00 49.55           O
ATOM   3450  CB  LEU B 130     -55.344 -23.291 -60.370  1.00 38.30           C
ATOM   3451  CG  LEU B 130     -56.849 -23.577 -60.497  1.00 43.39           C
ATOM   3452  CD1 LEU B 130     -57.239 -24.827 -59.712  1.00 39.02           C
ATOM   3453  CD2 LEU B 130     -57.689 -22.381 -60.042  1.00 40.46           C
ATOM   3454  N   LEU B 131     -52.787 -20.867 -60.644  1.00 44.32           N
ATOM   3455  CA  LEU B 131     -51.360 -20.574 -60.518  1.00 47.49           C
ATOM   3456  C   LEU B 131     -51.059 -20.212 -59.073  1.00 45.50           C
ATOM   3457  O   LEU B 131     -51.511 -19.174 -58.578  1.00 45.44           O
ATOM   3458  CB  LEU B 131     -50.937 -19.452 -61.463  1.00 50.57           C
ATOM   3459  CG  LEU B 131     -51.445 -19.544 -62.904  1.00 58.90           C
ATOM   3460  CD1 LEU B 131     -51.212 -18.225 -63.646  1.00 60.38           C
ATOM   3461  CD2 LEU B 131     -50.783 -20.715 -63.639  1.00 55.64           C
ATOM   3462  N   GLU B 132     -50.343 -21.094 -58.391  1.00 46.87           N
ATOM   3463  CA  GLU B 132     -49.954 -20.867 -57.012  1.00 46.74           C
ATOM   3464  C   GLU B 132     -48.718 -19.975 -56.942  1.00 48.97           C
ATOM   3465  O   GLU B 132     -47.880 -19.952 -57.852  1.00 46.83           O
ATOM   3466  CB  GLU B 132     -49.667 -22.201 -56.310  1.00 43.21           C
ATOM   3467  CG  GLU B 132     -50.851 -23.132 -56.186  1.00 40.80           C
ATOM   3468  CD  GLU B 132     -50.946 -24.127 -57.317  1.00 47.88           C
ATOM   3469  OE1 GLU B 132     -50.397 -23.853 -58.409  1.00 47.21           O
ATOM   3470  OE2 GLU B 132     -51.585 -25.186 -57.114  1.00 45.49           O
ATOM   3471  N   SER B 133     -48.594 -19.260 -55.831  1.00 44.93           N
ATOM   3472  CA  SER B 133     -47.378 -18.513 -55.557  1.00 47.36           C
ATOM   3473  C   SER B 133     -47.318 -18.242 -54.063  1.00 44.31           C
ATOM   3474  O   SER B 133     -48.301 -18.421 -53.338  1.00 44.03           O
ATOM   3475  CB  SER B 133     -47.319 -17.216 -56.369  1.00 49.11           C
ATOM   3476  OG  SER B 133     -48.271 -16.291 -55.900  1.00 50.88           O
ATOM   3477  N   GLY B 134     -46.144 -17.801 -53.612  1.00 46.11           N
ATOM   3478  CA  GLY B 134     -45.902 -17.539 -52.210  1.00 41.37           C
ATOM   3479  C   GLY B 134     -45.046 -18.582 -51.531  1.00 43.02           C
ATOM   3480  O   GLY B 134     -44.677 -18.392 -50.368  1.00 49.65           O
ATOM   3481  N   GLY B 135     -44.758 -19.696 -52.195  1.00 42.38           N
ATOM   3482  CA  GLY B 135     -43.947 -20.724 -51.577  1.00 46.29           C
ATOM   3483  C   GLY B 135     -42.515 -20.265 -51.387  1.00 50.61           C
ATOM   3484  O   GLY B 135     -41.999 -19.422 -52.124  1.00 52.14           O
ATOM   3485  N   GLY B 136     -41.861 -20.830 -50.382  1.00 47.78           N
ATOM   3486  CA  GLY B 136     -40.484 -20.463 -50.131  1.00 50.87           C
ATOM   3487  C   GLY B 136     -39.929 -21.183 -48.924  1.00 49.58           C
ATOM   3488  O   GLY B 136     -40.544 -22.100 -48.376  1.00 46.99           O
ATOM   3489  N   LEU B 137     -38.730 -20.754 -48.536  1.00 49.42           N
ATOM   3490  CA  LEU B 137     -38.058 -21.263 -47.353  1.00 47.97           C
ATOM   3491  C   LEU B 137     -38.440 -20.370 -46.177  1.00 42.00           C
ATOM   3492  O   LEU B 137     -38.412 -19.145 -46.293  1.00 50.89           O
ATOM   3493  CB  LEU B 137     -36.546 -21.272 -47.583  1.00 52.69           C
```

[2242]

```
ATOM   3494  CG  LEU B 137     -35.612 -21.804 -46.503  1.00 53.71           C
ATOM   3495  CD1 LEU B 137     -35.739 -23.313 -46.355  1.00 51.44           C
ATOM   3496  CD2 LEU B 137     -34.170 -21.392 -46.799  1.00 51.88           C
ATOM   3497  N   VAL B 138     -38.815 -20.982 -45.058  1.00 41.85           N
ATOM   3498  CA  VAL B 138     -39.378 -20.255 -43.923  1.00 44.61           C
ATOM   3499  C   VAL B 138     -38.945 -20.970 -42.651  1.00 41.16           C
ATOM   3500  O   VAL B 138     -38.634 -22.160 -42.673  1.00 44.98           O
ATOM   3501  CB  VAL B 138     -40.919 -20.168 -44.042  1.00 41.38           C
ATOM   3502  CG1 VAL B 138     -41.504 -21.563 -44.089  1.00 43.28           C
ATOM   3503  CG2 VAL B 138     -41.537 -19.367 -42.890  1.00 41.72           C
ATOM   3504  N   GLN B 139     -38.889 -20.232 -41.545  1.00 40.93           N
ATOM   3505  CA  GLN B 139     -38.431 -20.861 -40.312  1.00 42.86           C
ATOM   3506  C   GLN B 139     -39.594 -21.379 -39.471  1.00 44.09           C
ATOM   3507  O   GLN B 139     -40.711 -20.847 -39.545  1.00 45.03           O
ATOM   3508  CB  GLN B 139     -37.608 -19.873 -39.486  1.00 47.17           C
ATOM   3509  N   PRO B 140     -39.351 -22.405 -38.649  1.00 42.43           N
ATOM   3510  CA  PRO B 140     -40.373 -22.822 -37.687  1.00 38.69           C
ATOM   3511  C   PRO B 140     -40.747 -21.659 -36.780  1.00 41.71           C
ATOM   3512  O   PRO B 140     -39.888 -20.900 -36.326  1.00 41.16           O
ATOM   3513  CB  PRO B 140     -39.697 -23.958 -36.914  1.00 38.18           C
ATOM   3514  CG  PRO B 140     -38.651 -24.465 -37.839  1.00 44.98           C
ATOM   3515  CD  PRO B 140     -38.155 -23.266 -38.590  1.00 40.57           C
ATOM   3516  N   GLY B 141     -42.048 -21.518 -36.530  1.00 38.92           N
ATOM   3517  CA  GLY B 141     -42.579 -20.353 -35.857  1.00 37.12           C
ATOM   3518  C   GLY B 141     -42.847 -19.169 -36.760  1.00 35.21           C
ATOM   3519  O   GLY B 141     -43.388 -18.167 -36.287  1.00 37.93           O
ATOM   3520  N   GLY B 142     -42.455 -19.236 -38.031  1.00 38.66           N
ATOM   3521  CA  GLY B 142     -42.704 -18.180 -38.988  1.00 39.40           C
ATOM   3522  C   GLY B 142     -44.111 -18.221 -39.575  1.00 39.70           C
ATOM   3523  O   GLY B 142     -44.975 -19.000 -39.172  1.00 41.52           O
ATOM   3524  N   SER B 143     -44.321 -17.344 -40.567  1.00 42.94           N
ATOM   3525  CA  SER B 143     -45.591 -17.127 -41.247  1.00 39.00           C
ATOM   3526  C   SER B 143     -45.364 -17.111 -42.751  1.00 44.17           C
ATOM   3527  O   SER B 143     -44.279 -16.774 -43.228  1.00 43.55           O
ATOM   3528  CB  SER B 143     -46.243 -15.808 -40.839  1.00 42.76           C
ATOM   3529  OG  SER B 143     -46.833 -15.898 -39.556  1.00 53.87           O
ATOM   3530  N   LEU B 144     -46.396 -17.490 -43.498  1.00 43.11           N
ATOM   3531  CA  LEU B 144     -46.323 -17.466 -44.953  1.00 42.73           C
ATOM   3532  C   LEU B 144     -47.739 -17.331 -45.495  1.00 43.30           C
ATOM   3533  O   LEU B 144     -48.670 -17.891 -44.921  1.00 46.91           O
ATOM   3534  CB  LEU B 144     -45.654 -18.742 -45.478  1.00 42.28           C
ATOM   3535  CG  LEU B 144     -44.823 -18.732 -46.751  1.00 45.22           C
ATOM   3536  CD1 LEU B 144     -43.714 -17.700 -46.694  1.00 47.05           C
ATOM   3537  CD2 LEU B 144     -44.249 -20.118 -46.976  1.00 46.55           C
ATOM   3538  N   ARG B 145     -47.906 -16.595 -46.589  1.00 40.28           N
ATOM   3539  CA  ARG B 145     -49.205 -16.499 -47.246  1.00 39.94           C
ATOM   3540  C   ARG B 145     -49.095 -17.048 -48.656  1.00 41.62           C
ATOM   3541  O   ARG B 145     -48.330 -16.526 -49.471  1.00 37.12           O
ATOM   3542  CB  ARG B 145     -49.732 -15.068 -47.303  1.00 41.57           C
ATOM   3543  CG  ARG B 145     -51.235 -15.032 -47.559  1.00 48.08           C
ATOM   3544  CD  ARG B 145     -51.762 -13.623 -47.741  1.00 53.51           C
ATOM   3545  NE  ARG B 145     -51.268 -13.025 -48.975  1.00 56.46           N
ATOM   3546  CZ  ARG B 145     -51.707 -11.879 -49.480  1.00 63.70           C
ATOM   3547  NH1 ARG B 145     -51.184 -11.419 -50.610  1.00 64.37           N
ATOM   3548  NH2 ARG B 145     -52.656 -11.193 -48.847  1.00 60.49           N
ATOM   3549  N   LEU B 146     -49.862 -18.093 -48.944  1.00 38.86           N
ATOM   3550  CA  LEU B 146     -49.933 -18.603 -50.299  1.00 38.31           C
ATOM   3551  C   LEU B 146     -51.093 -17.950 -51.020  1.00 40.32           C
ATOM   3552  O   LEU B 146     -52.105 -17.585 -50.412  1.00 37.25           O
ATOM   3553  CB  LEU B 146     -50.107 -20.117 -50.318  1.00 38.49           C
ATOM   3554  CG  LEU B 146     -49.044 -20.880 -49.535  1.00 42.46           C
ATOM   3555  CD1 LEU B 146     -49.259 -22.352 -49.738  1.00 40.94           C
ATOM   3556  CD2 LEU B 146     -47.665 -20.487 -49.996  1.00 34.14           C
ATOM   3557  N   SER B 147     -50.933 -17.799 -52.326  1.00 41.09           N
ATOM   3558  CA  SER B 147     -51.994 -17.279 -53.168  1.00 42.13           C
ATOM   3559  C   SER B 147     -52.147 -18.180 -54.382  1.00 41.74           C
ATOM   3560  O   SER B 147     -51.193 -18.829 -54.825  1.00 42.76           O
ATOM   3561  CB  SER B 147     -51.704 -15.834 -53.597  1.00 40.84           C
```

[2243]

```
ATOM   3562  OG  SER B 147     -50.678 -15.827 -54.566  1.00 52.82           O
ATOM   3563  N   CYS B 148     -53.368 -18.225 -54.901  1.00 43.97           N
ATOM   3564  CA  CYS B 148     -53.695 -18.966 -56.111  1.00 43.52           C
ATOM   3565  C   CYS B 148     -54.524 -18.070 -57.019  1.00 42.43           C
ATOM   3566  O   CYS B 148     -55.615 -17.631 -56.629  1.00 42.97           O
ATOM   3567  CB  CYS B 148     -54.459 -20.243 -55.769  1.00 43.76           C
ATOM   3568  SG  CYS B 148     -55.092 -21.165 -57.170  1.00 47.41           S
ATOM   3569  N   ALA B 149     -54.007 -17.800 -58.218  1.00 45.63           N
ATOM   3570  CA  ALA B 149     -54.674 -16.952 -59.202  1.00 41.05           C
ATOM   3571  C   ALA B 149     -55.453 -17.831 -60.173  1.00 41.50           C
ATOM   3572  O   ALA B 149     -54.872 -18.679 -60.859  1.00 46.58           O
ATOM   3573  CB  ALA B 149     -53.663 -16.086 -59.956  1.00 38.09           C
ATOM   3574  N   ALA B 150     -56.759 -17.614 -60.247  1.00 40.46           N
ATOM   3575  CA  ALA B 150     -57.638 -18.442 -61.051  1.00 41.60           C
ATOM   3576  C   ALA B 150     -58.077 -17.679 -62.291  1.00 40.53           C
ATOM   3577  O   ALA B 150     -58.353 -16.478 -62.231  1.00 41.88           O
ATOM   3578  CB  ALA B 150     -58.866 -18.872 -60.245  1.00 42.02           C
ATOM   3579  N   SER B 151     -58.156 -18.380 -63.413  1.00 40.31           N
ATOM   3580  CA  SER B 151     -58.709 -17.776 -64.610  1.00 46.02           C
ATOM   3581  C   SER B 151     -59.381 -18.862 -65.434  1.00 45.52           C
ATOM   3582  O   SER B 151     -59.078 -20.052 -65.293  1.00 42.45           O
ATOM   3583  CB  SER B 151     -57.619 -17.063 -65.417  1.00 44.51           C
ATOM   3584  OG  SER B 151     -56.673 -18.004 -65.887  1.00 49.14           O
ATOM   3585  N   GLY B 152     -60.314 -18.443 -66.285  1.00 49.18           N
ATOM   3586  CA  GLY B 152     -60.970 -19.368 -67.182  1.00 45.78           C
ATOM   3587  C   GLY B 152     -62.270 -19.958 -66.684  1.00 45.77           C
ATOM   3588  O   GLY B 152     -62.718 -20.967 -67.241  1.00 51.66           O
ATOM   3589  N   PHE B 153     -62.859 -19.405 -65.627  1.00 41.83           N
ATOM   3590  CA  PHE B 153     -64.139 -19.882 -65.109  1.00 42.24           C
ATOM   3591  C   PHE B 153     -64.678 -18.817 -64.168  1.00 40.46           C
ATOM   3592  O   PHE B 153     -63.965 -17.892 -63.777  1.00 42.98           O
ATOM   3593  CB  PHE B 153     -64.019 -21.238 -64.395  1.00 40.94           C
ATOM   3594  CG  PHE B 153     -63.131 -21.216 -63.188  1.00 41.16           C
ATOM   3595  CD1 PHE B 153     -61.750 -21.370 -63.318  1.00 37.70           C
ATOM   3596  CD2 PHE B 153     -63.669 -21.026 -61.925  1.00 34.14           C
ATOM   3597  CE1 PHE B 153     -60.938 -21.347 -62.212  1.00 39.98           C
ATOM   3598  CE2 PHE B 153     -62.864 -21.013 -60.809  1.00 36.44           C
ATOM   3599  CZ  PHE B 153     -61.489 -21.174 -60.948  1.00 40.88           C
ATOM   3600  N   GLY B 154     -65.954 -18.940 -63.832  1.00 39.77           N
ATOM   3601  CA  GLY B 154     -66.550 -18.035 -62.868  1.00 37.75           C
ATOM   3602  C   GLY B 154     -66.132 -18.318 -61.443  1.00 40.82           C
ATOM   3603  O   GLY B 154     -66.778 -19.116 -60.753  1.00 39.40           O
ATOM   3604  N   PHE B 155     -65.108 -17.598 -60.968  1.00 36.75           N
ATOM   3605  CA  PHE B 155     -64.417 -17.975 -59.739  1.00 38.93           C
ATOM   3606  C   PHE B 155     -65.364 -18.059 -58.541  1.00 39.56           C
ATOM   3607  O   PHE B 155     -65.286 -19.007 -57.745  1.00 36.64           O
ATOM   3608  CB  PHE B 155     -63.279 -16.978 -59.489  1.00 38.09           C
ATOM   3609  CG  PHE B 155     -62.496 -17.224 -58.230  1.00 36.98           C
ATOM   3610  CD1 PHE B 155     -61.655 -18.316 -58.124  1.00 41.01           C
ATOM   3611  CD2 PHE B 155     -62.571 -16.343 -57.171  1.00 41.00           C
ATOM   3612  CE1 PHE B 155     -60.921 -18.533 -56.975  1.00 42.42           C
ATOM   3613  CE2 PHE B 155     -61.833 -16.545 -56.022  1.00 37.96           C
ATOM   3614  CZ  PHE B 155     -61.008 -17.640 -55.920  1.00 40.30           C
ATOM   3615  N   SER B 156     -66.293 -17.112 -58.413  1.00 37.94           N
ATOM   3616  CA  SER B 156     -67.148 -17.080 -57.233  1.00 36.06           C
ATOM   3617  C   SER B 156     -68.190 -18.195 -57.203  1.00 40.13           C
ATOM   3618  O   SER B 156     -68.863 -18.359 -56.180  1.00 36.05           O
ATOM   3619  CB  SER B 156     -67.859 -15.739 -57.144  1.00 44.94           C
ATOM   3620  OG  SER B 156     -68.711 -15.576 -58.255  1.00 48.34           O
ATOM   3621  N   SER B 157     -68.334 -18.965 -58.278  1.00 42.29           N
ATOM   3622  CA  SER B 157     -69.269 -20.084 -58.328  1.00 40.08           C
ATOM   3623  C   SER B 157     -68.668 -21.403 -57.876  1.00 38.16           C
ATOM   3624  O   SER B 157     -69.350 -22.433 -57.954  1.00 35.77           O
ATOM   3625  CB  SER B 157     -69.788 -20.274 -59.754  1.00 39.82           C
ATOM   3626  OG  SER B 157     -70.582 -19.188 -60.118  1.00 49.80           O
ATOM   3627  N   TYR B 158     -67.421 -21.411 -57.416  1.00 37.13           N
ATOM   3628  CA  TYR B 158     -66.722 -22.666 -57.170  1.00 34.02           C
ATOM   3629  C   TYR B 158     -66.125 -22.679 -55.778  1.00 33.88           C
```

[2244]

```
ATOM   3630  O   TYR B 158     -65.347 -21.786 -55.421  1.00 39.39           O
ATOM   3631  CB  TYR B 158     -65.632 -22.889 -58.221  1.00 38.05           C
ATOM   3632  CG  TYR B 158     -66.210 -23.339 -59.537  1.00 38.59           C
ATOM   3633  CD1 TYR B 158     -66.663 -22.404 -60.480  1.00 38.15           C
ATOM   3634  CD2 TYR B 158     -66.333 -24.693 -59.835  1.00 35.20           C
ATOM   3635  CE1 TYR B 158     -67.216 -22.813 -61.687  1.00 34.94           C
ATOM   3636  CE2 TYR B 158     -66.880 -25.115 -61.047  1.00 36.12           C
ATOM   3637  CZ  TYR B 158     -67.321 -24.169 -61.961  1.00 36.54           C
ATOM   3638  OH  TYR B 158     -67.856 -24.587 -63.151  1.00 39.84           O
ATOM   3639  N   ALA B 159     -66.481 -23.690 -55.002  1.00 33.38           N
ATOM   3640  CA  ALA B 159     -65.715 -23.997 -53.808  1.00 34.98           C
ATOM   3641  C   ALA B 159     -64.275 -24.303 -54.203  1.00 36.25           C
ATOM   3642  O   ALA B 159     -64.008 -24.862 -55.273  1.00 36.66           O
ATOM   3643  CB  ALA B 159     -66.328 -25.182 -53.067  1.00 29.17           C
ATOM   3644  N   MET B 160     -63.346 -23.926 -53.328  1.00 33.47           N
ATOM   3645  CA  MET B 160     -61.921 -24.085 -53.562  1.00 35.50           C
ATOM   3646  C   MET B 160     -61.292 -24.776 -52.361  1.00 35.17           C
ATOM   3647  O   MET B 160     -61.833 -24.739 -51.252  1.00 37.28           O
ATOM   3648  CB  MET B 160     -61.243 -22.721 -53.805  1.00 34.96           C
ATOM   3649  CG  MET B 160     -61.840 -21.899 -54.952  1.00 29.27           C
ATOM   3650  SD  MET B 160     -61.490 -22.604 -56.586  1.00 40.28           S
ATOM   3651  CE  MET B 160     -59.694 -22.566 -56.680  1.00 36.60           C
ATOM   3652  N   SER B 161     -60.125 -25.387 -52.580  1.00 31.83           N
ATOM   3653  CA  SER B 161     -59.462 -26.104 -51.501  1.00 36.39           C
ATOM   3654  C   SER B 161     -57.943 -26.058 -51.660  1.00 31.54           C
ATOM   3655  O   SER B 161     -57.406 -25.727 -52.719  1.00 30.77           O
ATOM   3656  CB  SER B 161     -59.936 -27.564 -51.427  1.00 35.10           C
ATOM   3657  OG  SER B 161     -59.556 -28.278 -52.588  1.00 44.63           O
ATOM   3658  N   TRP B 162     -57.261 -26.372 -50.566  1.00 29.89           N
ATOM   3659  CA  TRP B 162     -55.813 -26.538 -50.540  1.00 31.27           C
ATOM   3660  C   TRP B 162     -55.504 -27.970 -50.129  1.00 27.58           C
ATOM   3661  O   TRP B 162     -56.094 -28.491 -49.175  1.00 28.69           O
ATOM   3662  CB  TRP B 162     -55.160 -25.549 -49.568  1.00 31.58           C
ATOM   3663  CG  TRP B 162     -55.172 -24.096 -50.019  1.00 31.58           C
ATOM   3664  CD1 TRP B 162     -56.034 -23.099 -49.613  1.00 36.10           C
ATOM   3665  CD2 TRP B 162     -54.246 -23.477 -50.919  1.00 31.12           C
ATOM   3666  NE1 TRP B 162     -55.696 -21.903 -50.221  1.00 32.34           N
ATOM   3667  CE2 TRP B 162     -54.613 -22.114 -51.033  1.00 34.35           C
ATOM   3668  CE3 TRP B 162     -53.144 -23.944 -51.645  1.00 30.55           C
ATOM   3669  CZ2 TRP B 162     -53.917 -21.221 -51.847  1.00 36.89           C
ATOM   3670  CZ3 TRP B 162     -52.458 -23.058 -52.453  1.00 34.66           C
ATOM   3671  CH2 TRP B 162     -52.844 -21.711 -52.545  1.00 36.37           C
ATOM   3672  N   VAL B 163     -54.610 -28.607 -50.866  1.00 29.21           N
ATOM   3673  CA  VAL B 163     -54.159 -29.966 -50.608  1.00 30.80           C
ATOM   3674  C   VAL B 163     -52.633 -29.935 -50.662  1.00 30.41           C
ATOM   3675  O   VAL B 163     -52.059 -29.233 -51.496  1.00 31.51           O
ATOM   3676  CB  VAL B 163     -54.746 -30.971 -51.638  1.00 26.90           C
ATOM   3677  CG1 VAL B 163     -54.246 -32.378 -51.381  1.00 29.42           C
ATOM   3678  CG2 VAL B 163     -56.287 -30.967 -51.621  1.00 26.77           C
ATOM   3679  N   ARG B 164     -51.974 -30.672 -49.767  1.00 30.76           N
ATOM   3680  CA  ARG B 164     -50.516 -30.635 -49.670  1.00 33.68           C
ATOM   3681  C   ARG B 164     -49.929 -32.037 -49.705  1.00 34.20           C
ATOM   3682  O   ARG B 164     -50.593 -33.023 -49.386  1.00 39.24           O
ATOM   3683  CB  ARG B 164     -50.027 -29.932 -48.390  1.00 33.50           C
ATOM   3684  CG  ARG B 164     -50.244 -30.719 -47.096  1.00 36.20           C
ATOM   3685  CD  ARG B 164     -49.745 -29.926 -45.862  1.00 35.30           C
ATOM   3686  NE  ARG B 164     -50.112 -30.575 -44.606  1.00 36.18           N
ATOM   3687  CZ  ARG B 164     -49.910 -30.064 -43.392  1.00 38.87           C
ATOM   3688  NH1 ARG B 164     -49.313 -28.878 -43.245  1.00 32.43           N
ATOM   3689  NH2 ARG B 164     -50.312 -30.746 -42.316  1.00 32.61           N
ATOM   3690  N   GLN B 165     -48.646 -32.110 -50.035  1.00 37.01           N
ATOM   3691  CA  GLN B 165     -47.958 -33.391 -50.128  1.00 36.72           C
ATOM   3692  C   GLN B 165     -46.569 -33.220 -49.530  1.00 35.48           C
ATOM   3693  O   GLN B 165     -45.688 -32.604 -50.134  1.00 38.46           O
ATOM   3694  CB  GLN B 165     -47.897 -33.871 -51.578  1.00 36.80           C
ATOM   3695  CG  GLN B 165     -47.308 -35.251 -51.727  1.00 38.65           C
ATOM   3696  CD  GLN B 165     -47.574 -35.848 -53.088  1.00 40.38           C
ATOM   3697  OE1 GLN B 165     -47.523 -35.164 -54.112  1.00 46.59           O
```

[2245]

```
ATOM   3698  NE2 GLN B 165     -47.912 -37.125 -53.100  1.00 33.05           N
ATOM   3699  N   ALA B 166     -46.383 -33.777 -48.341  1.00 35.95           N
ATOM   3700  CA  ALA B 166     -45.080 -33.798 -47.715  1.00 34.77           C
ATOM   3701  C   ALA B 166     -44.157 -34.717 -48.510  1.00 37.37           C
ATOM   3702  O   ALA B 166     -44.620 -35.681 -49.133  1.00 36.44           O
ATOM   3703  CB  ALA B 166     -45.181 -34.254 -46.260  1.00 33.07           C
ATOM   3704  N   PRO B 167     -42.846 -34.393 -48.565  1.00 40.00           N
ATOM   3705  CA  PRO B 167     -41.906 -35.224 -49.328  1.00 35.21           C
ATOM   3706  C   PRO B 167     -42.055 -36.707 -49.060  1.00 34.60           C
ATOM   3707  O   PRO B 167     -42.055 -37.151 -47.907  1.00 38.33           O
ATOM   3708  CB  PRO B 167     -40.536 -34.716 -48.856  1.00 37.87           C
ATOM   3709  CG  PRO B 167     -40.772 -33.269 -48.551  1.00 35.41           C
ATOM   3710  CD  PRO B 167     -42.182 -33.217 -47.963  1.00 35.12           C
ATOM   3711  N   GLY B 168     -42.253 -37.474 -50.124  1.00 34.80           N
ATOM   3712  CA  GLY B 168     -42.372 -38.900 -49.986  1.00 36.17           C
ATOM   3713  C   GLY B 168     -43.681 -39.379 -49.412  1.00 37.81           C
ATOM   3714  O   GLY B 168     -43.820 -40.577 -49.169  1.00 43.97           O
ATOM   3715  N   LYS B 169     -44.639 -38.502 -49.175  1.00 32.65           N
ATOM   3716  CA  LYS B 169     -45.874 -38.908 -48.525  1.00 37.93           C
ATOM   3717  C   LYS B 169     -47.056 -38.734 -49.482  1.00 34.05           C
ATOM   3718  O   LYS B 169     -46.899 -38.371 -50.652  1.00 35.57           O
ATOM   3719  CB  LYS B 169     -46.069 -38.112 -47.228  1.00 39.46           C
ATOM   3720  N   GLY B 170     -48.254 -39.024 -48.979  1.00 33.98           N
ATOM   3721  CA  GLY B 170     -49.449 -38.972 -49.788  1.00 35.65           C
ATOM   3722  C   GLY B 170     -50.113 -37.598 -49.774  1.00 35.01           C
ATOM   3723  O   GLY B 170     -49.740 -36.687 -49.039  1.00 33.18           O
ATOM   3724  N   LEU B 171     -51.157 -37.475 -50.584  1.00 35.71           N
ATOM   3725  CA  LEU B 171     -51.950 -36.256 -50.589  1.00 33.55           C
ATOM   3726  C   LEU B 171     -52.678 -36.092 -49.265  1.00 33.19           C
ATOM   3727  O   LEU B 171     -53.244 -37.047 -48.732  1.00 32.90           O
ATOM   3728  CB  LEU B 171     -52.957 -36.301 -51.728  1.00 32.79           C
ATOM   3729  CG  LEU B 171     -52.244 -36.348 -53.067  1.00 36.07           C
ATOM   3730  CD1 LEU B 171     -53.245 -36.554 -54.195  1.00 31.05           C
ATOM   3731  CD2 LEU B 171     -51.472 -35.032 -53.212  1.00 33.69           C
ATOM   3732  N   GLU B 172     -52.673 -34.867 -48.738  1.00 33.70           N
ATOM   3733  CA  GLU B 172     -53.325 -34.566 -47.467  1.00 36.33           C
ATOM   3734  C   GLU B 172     -54.163 -33.302 -47.608  1.00 32.49           C
ATOM   3735  O   GLU B 172     -53.628 -32.219 -47.876  1.00 30.21           O
ATOM   3736  CB  GLU B 172     -52.303 -34.396 -46.333  1.00 35.05           C
ATOM   3737  CG  GLU B 172     -52.969 -34.013 -45.005  1.00 35.75           C
ATOM   3738  CD  GLU B 172     -51.970 -33.723 -43.878  1.00 44.32           C
ATOM   3739  OE1 GLU B 172     -50.871 -33.202 -44.165  1.00 45.68           O
ATOM   3740  OE2 GLU B 172     -52.295 -33.983 -42.700  1.00 50.76           O
ATOM   3741  N   TRP B 173     -55.468 -33.442 -47.404  1.00 35.07           N
ATOM   3742  CA  TRP B 173     -56.366 -32.302 -47.460  1.00 29.35           C
ATOM   3743  C   TRP B 173     -56.015 -31.304 -46.369  1.00 26.93           C
ATOM   3744  O   TRP B 173     -55.884 -31.670 -45.201  1.00 29.92           O
ATOM   3745  CB  TRP B 173     -57.804 -32.788 -47.285  1.00 27.28           C
ATOM   3746  CG  TRP B 173     -58.818 -31.694 -47.299  1.00 30.89           C
ATOM   3747  CD1 TRP B 173     -59.207 -30.954 -48.378  1.00 29.91           C
ATOM   3748  CD2 TRP B 173     -59.617 -31.245 -46.196  1.00 31.38           C
ATOM   3749  NE1 TRP B 173     -60.174 -30.051 -48.009  1.00 32.45           N
ATOM   3750  CE2 TRP B 173     -60.458 -30.225 -46.678  1.00 31.86           C
ATOM   3751  CE3 TRP B 173     -59.707 -31.611 -44.852  1.00 30.02           C
ATOM   3752  CZ2 TRP B 173     -61.370 -29.556 -45.859  1.00 32.11           C
ATOM   3753  CZ3 TRP B 173     -60.627 -30.947 -44.041  1.00 31.86           C
ATOM   3754  CH2 TRP B 173     -61.441 -29.933 -44.551  1.00 30.77           C
ATOM   3755  N   VAL B 174     -55.916 -30.032 -46.741  1.00 28.98           N
ATOM   3756  CA  VAL B 174     -55.575 -28.980 -45.791  1.00 30.42           C
ATOM   3757  C   VAL B 174     -56.817 -28.178 -45.435  1.00 31.84           C
ATOM   3758  O   VAL B 174     -57.196 -28.091 -44.261  1.00 30.87           O
ATOM   3759  CB  VAL B 174     -54.479 -28.056 -46.350  1.00 32.79           C
ATOM   3760  CG1 VAL B 174     -54.172 -26.917 -45.365  1.00 27.43           C
ATOM   3761  CG2 VAL B 174     -53.225 -28.859 -46.682  1.00 27.65           C
ATOM   3762  N   SER B 175     -57.488 -27.618 -46.442  1.00 31.66           N
ATOM   3763  CA  SER B 175     -58.512 -26.623 -46.146  1.00 30.95           C
ATOM   3764  C   SER B 175     -59.460 -26.483 -47.334  1.00 32.09           C
ATOM   3765  O   SER B 175     -59.122 -26.832 -48.466  1.00 32.27           O
```

[2246]

```
ATOM   3766  CB  SER B 175     -57.851 -25.278 -45.806  1.00 30.50           C
ATOM   3767  OG  SER B 175     -58.763 -24.417 -45.156  1.00 35.56           O
ATOM   3768  N   ALA B 176     -60.651 -25.945 -47.069  1.00 30.71           N
ATOM   3769  CA  ALA B 176     -61.616 -25.738 -48.140  1.00 33.00           C
ATOM   3770  C   ALA B 176     -62.471 -24.522 -47.823  1.00 35.88           C
ATOM   3771  O   ALA B 176     -62.697 -24.191 -46.655  1.00 36.40           O
ATOM   3772  CB  ALA B 176     -62.517 -26.976 -48.358  1.00 30.08           C
ATOM   3773  N   ILE B 177     -62.999 -23.896 -48.873  1.00 33.90           N
ATOM   3774  CA  ILE B 177     -63.809 -22.695 -48.704  1.00 36.97           C
ATOM   3775  C   ILE B 177     -64.898 -22.678 -49.771  1.00 31.82           C
ATOM   3776  O   ILE B 177     -64.660 -23.036 -50.928  1.00 32.77           O
ATOM   3777  CB  ILE B 177     -62.912 -21.437 -48.756  1.00 35.06           C
ATOM   3778  CG1 ILE B 177     -63.723 -20.155 -48.519  1.00 36.00           C
ATOM   3779  CG2 ILE B 177     -62.155 -21.373 -50.069  1.00 29.76           C
ATOM   3780  CD1 ILE B 177     -62.834 -18.952 -48.252  1.00 34.60           C
ATOM   3781  N   SER B 178     -66.099 -22.277 -49.366  1.00 34.62           N
ATOM   3782  CA  SER B 178     -67.237 -22.180 -50.275  1.00 36.19           C
ATOM   3783  C   SER B 178     -67.065 -21.012 -51.247  1.00 35.34           C
ATOM   3784  O   SER B 178     -66.223 -20.126 -51.059  1.00 38.29           O
ATOM   3785  CB  SER B 178     -68.539 -22.005 -49.493  1.00 37.36           C
ATOM   3786  OG  SER B 178     -68.557 -20.751 -48.833  1.00 39.20           O
ATOM   3787  N   GLY B 179     -67.884 -21.032 -52.304  1.00 33.81           N
ATOM   3788  CA  GLY B 179     -67.788 -20.020 -53.348  1.00 34.09           C
ATOM   3789  C   GLY B 179     -67.911 -18.596 -52.831  1.00 37.36           C
ATOM   3790  O   GLY B 179     -67.192 -17.698 -53.278  1.00 37.90           O
ATOM   3791  N   SER B 180     -68.831 -18.367 -51.901  1.00 38.53           N
ATOM   3792  CA  SER B 180     -69.047 -17.042 -51.337  1.00 37.09           C
ATOM   3793  C   SER B 180     -68.047 -16.684 -50.250  1.00 41.51           C
ATOM   3794  O   SER B 180     -67.952 -15.508 -49.889  1.00 45.57           O
ATOM   3795  CB  SER B 180     -70.466 -16.952 -50.780  1.00 42.46           C
ATOM   3796  OG  SER B 180     -70.674 -17.902 -49.738  1.00 46.38           O
ATOM   3797  N   GLY B 181     -67.289 -17.653 -49.728  1.00 40.36           N
ATOM   3798  CA  GLY B 181     -66.432 -17.394 -48.597  1.00 38.80           C
ATOM   3799  C   GLY B 181     -67.119 -17.490 -47.254  1.00 38.65           C
ATOM   3800  O   GLY B 181     -66.470 -17.256 -46.227  1.00 39.55           O
ATOM   3801  N   GLY B 182     -68.409 -17.833 -47.226  1.00 39.38           N
ATOM   3802  CA  GLY B 182     -69.143 -17.896 -45.978  1.00 40.55           C
ATOM   3803  C   GLY B 182     -68.905 -19.135 -45.143  1.00 40.52           C
ATOM   3804  O   GLY B 182     -69.255 -19.139 -43.961  1.00 42.88           O
ATOM   3805  N   SER B 183     -68.344 -20.191 -45.727  1.00 42.16           N
ATOM   3806  CA  SER B 183     -68.066 -21.439 -45.025  1.00 37.09           C
ATOM   3807  C   SER B 183     -66.613 -21.853 -45.260  1.00 39.79           C
ATOM   3808  O   SER B 183     -66.163 -21.897 -46.408  1.00 38.73           O
ATOM   3809  CB  SER B 183     -69.013 -22.538 -45.503  1.00 40.96           C
ATOM   3810  OG  SER B 183     -70.355 -22.222 -45.174  1.00 44.65           O
ATOM   3811  N   THR B 184     -65.889 -22.176 -44.182  1.00 36.32           N
ATOM   3812  CA  THR B 184     -64.507 -22.636 -44.267  1.00 36.93           C
ATOM   3813  C   THR B 184     -64.353 -23.950 -43.512  1.00 34.95           C
ATOM   3814  O   THR B 184     -65.063 -24.221 -42.543  1.00 34.34           O
ATOM   3815  CB  THR B 184     -63.508 -21.623 -43.688  1.00 39.35           C
ATOM   3816  OG1 THR B 184     -63.831 -21.360 -42.316  1.00 34.28           O
ATOM   3817  CG2 THR B 184     -63.534 -20.321 -44.481  1.00 37.86           C
ATOM   3818  N   TYR B 185     -63.408 -24.762 -43.960  1.00 32.63           N
ATOM   3819  CA  TYR B 185     -63.226 -26.096 -43.410  1.00 36.47           C
ATOM   3820  C   TYR B 185     -61.733 -26.359 -43.284  1.00 32.41           C
ATOM   3821  O   TYR B 185     -60.954 -25.925 -44.129  1.00 36.12           O
ATOM   3822  CB  TYR B 185     -63.872 -27.172 -44.305  1.00 32.48           C
ATOM   3823  CG  TYR B 185     -65.238 -26.816 -44.860  1.00 34.43           C
ATOM   3824  CD1 TYR B 185     -65.355 -25.921 -45.927  1.00 36.39           C
ATOM   3825  CD2 TYR B 185     -66.394 -27.412 -44.377  1.00 34.52           C
ATOM   3826  CE1 TYR B 185     -66.567 -25.595 -46.464  1.00 35.27           C
ATOM   3827  CE2 TYR B 185     -67.642 -27.082 -44.916  1.00 36.44           C
ATOM   3828  CZ  TYR B 185     -67.708 -26.176 -45.965  1.00 38.44           C
ATOM   3829  OH  TYR B 185     -68.895 -25.829 -46.539  1.00 35.95           O
ATOM   3830  N   TYR B 186     -61.348 -27.112 -42.249  1.00 31.73           N
ATOM   3831  CA  TYR B 186     -59.945 -27.279 -41.901  1.00 33.72           C
ATOM   3832  C   TYR B 186     -59.629 -28.710 -41.493  1.00 34.00           C
ATOM   3833  O   TYR B 186     -60.391 -29.349 -40.766  1.00 33.94           O
```

[2247]

```
ATOM   3834  CB  TYR B 186     -59.550 -26.330 -40.763  1.00 35.40           C
ATOM   3835  CG  TYR B 186     -59.609 -24.878 -41.166  1.00 32.07           C
ATOM   3836  CD1 TYR B 186     -58.591 -24.313 -41.907  1.00 32.51           C
ATOM   3837  CD2 TYR B 186     -60.691 -24.076 -40.815  1.00 38.39           C
ATOM   3838  CE1 TYR B 186     -58.638 -22.977 -42.302  1.00 34.45           C
ATOM   3839  CE2 TYR B 186     -60.746 -22.745 -41.206  1.00 35.11           C
ATOM   3840  CZ  TYR B 186     -59.706 -22.204 -41.939  1.00 33.61           C
ATOM   3841  OH  TYR B 186     -59.745 -20.879 -42.326  1.00 36.67           O
ATOM   3842  N   ALA B 187     -58.485 -29.200 -41.950  1.00 33.63           N
ATOM   3843  CA  ALA B 187     -57.930 -30.427 -41.387  1.00 37.62           C
ATOM   3844  C   ALA B 187     -57.610 -30.249 -39.899  1.00 36.43           C
ATOM   3845  O   ALA B 187     -57.384 -29.134 -39.418  1.00 35.22           O
ATOM   3846  CB  ALA B 187     -56.671 -30.828 -42.153  1.00 31.43           C
ATOM   3847  N   ASP B 188     -57.682 -31.354 -39.146  1.00 35.17           N
ATOM   3848  CA  ASP B 188     -57.357 -31.301 -37.717  1.00 39.97           C
ATOM   3849  C   ASP B 188     -55.939 -30.764 -37.483  1.00 39.79           C
ATOM   3850  O   ASP B 188     -55.693 -30.021 -36.529  1.00 43.36           O
ATOM   3851  CB  ASP B 188     -57.489 -32.691 -37.077  1.00 41.26           C
ATOM   3852  CG  ASP B 188     -58.930 -33.159 -36.950  1.00 39.80           C
ATOM   3853  OD1 ASP B 188     -59.836 -32.333 -37.119  1.00 39.40           O
ATOM   3854  OD2 ASP B 188     -59.156 -34.343 -36.636  1.00 39.56           O
ATOM   3855  N   SER B 189     -54.996 -31.140 -38.340  1.00 36.71           N
ATOM   3856  CA  SER B 189     -53.593 -30.810 -38.138  1.00 44.34           C
ATOM   3857  C   SER B 189     -53.261 -29.353 -38.412  1.00 46.98           C
ATOM   3858  O   SER B 189     -52.125 -28.947 -38.146  1.00 44.32           O
ATOM   3859  CB  SER B 189     -52.732 -31.673 -39.054  1.00 44.79           C
ATOM   3860  OG  SER B 189     -53.137 -31.476 -40.403  1.00 45.15           O
ATOM   3861  N   VAL B 190     -54.178 -28.575 -38.988  1.00 41.89           N
ATOM   3862  CA  VAL B 190     -53.899 -27.176 -39.288  1.00 39.13           C
ATOM   3863  C   VAL B 190     -54.875 -26.228 -38.634  1.00 42.25           C
ATOM   3864  O   VAL B 190     -54.662 -25.007 -38.702  1.00 42.08           O
ATOM   3865  CB  VAL B 190     -53.844 -26.913 -40.807  1.00 37.39           C
ATOM   3866  CG1 VAL B 190     -52.843 -27.864 -41.455  1.00 38.85           C
ATOM   3867  CG2 VAL B 190     -55.222 -27.035 -41.432  1.00 36.60           C
ATOM   3868  N   LYS B 191     -55.922 -26.746 -37.995  1.00 38.44           N
ATOM   3869  CA  LYS B 191     -56.908 -25.902 -37.350  1.00 38.62           C
ATOM   3870  C   LYS B 191     -56.216 -25.033 -36.312  1.00 45.37           C
ATOM   3871  O   LYS B 191     -55.395 -25.520 -35.528  1.00 43.25           O
ATOM   3872  CB  LYS B 191     -57.995 -26.777 -36.712  1.00 41.17           C
ATOM   3873  CG  LYS B 191     -59.027 -26.054 -35.861  1.00 45.43           C
ATOM   3874  CD  LYS B 191     -59.966 -25.193 -36.690  1.00 44.94           C
ATOM   3875  N   GLY B 192     -56.523 -23.733 -36.343  1.00 47.14           N
ATOM   3876  CA  GLY B 192     -55.952 -22.756 -35.440  1.00 45.38           C
ATOM   3877  C   GLY B 192     -54.640 -22.146 -35.880  1.00 44.57           C
ATOM   3878  O   GLY B 192     -54.198 -21.163 -35.271  1.00 50.68           O
ATOM   3879  N   ARG B 193     -54.007 -22.684 -36.914  1.00 43.58           N
ATOM   3880  CA  ARG B 193     -52.755 -22.155 -37.438  1.00 41.26           C
ATOM   3881  C   ARG B 193     -52.885 -21.586 -38.840  1.00 42.64           C
ATOM   3882  O   ARG B 193     -52.239 -20.583 -39.151  1.00 38.59           O
ATOM   3883  CB  ARG B 193     -51.682 -23.251 -37.430  1.00 40.75           C
ATOM   3884  CG  ARG B 193     -51.537 -23.929 -36.083  1.00 44.31           C
ATOM   3885  CD  ARG B 193     -50.310 -24.832 -35.995  1.00 42.61           C
ATOM   3886  NE  ARG B 193     -50.396 -25.974 -36.905  1.00 42.09           N
ATOM   3887  CZ  ARG B 193     -49.591 -26.174 -37.947  1.00 43.35           C
ATOM   3888  NH1 ARG B 193     -48.601 -25.328 -38.215  1.00 40.86           N
ATOM   3889  NH2 ARG B 193     -49.762 -27.237 -38.720  1.00 43.37           N
ATOM   3890  N   PHE B 194     -53.691 -22.223 -39.696  1.00 44.40           N
ATOM   3891  CA  PHE B 194     -53.904 -21.812 -41.077  1.00 37.52           C
ATOM   3892  C   PHE B 194     -55.274 -21.164 -41.217  1.00 35.89           C
ATOM   3893  O   PHE B 194     -56.228 -21.540 -40.532  1.00 39.67           O
ATOM   3894  CB  PHE B 194     -53.815 -22.992 -42.061  1.00 39.93           C
ATOM   3895  CG  PHE B 194     -52.466 -23.673 -42.110  1.00 37.50           C
ATOM   3896  CD1 PHE B 194     -51.464 -23.374 -41.194  1.00 39.01           C
ATOM   3897  CD2 PHE B 194     -52.187 -24.579 -43.127  1.00 32.84           C
ATOM   3898  CE1 PHE B 194     -50.217 -24.002 -41.257  1.00 37.30           C
ATOM   3899  CE2 PHE B 194     -50.950 -25.197 -43.210  1.00 37.46           C
ATOM   3900  CZ  PHE B 194     -49.957 -24.909 -42.268  1.00 37.58           C
ATOM   3901  N   THR B 195     -55.368 -20.199 -42.127  1.00 36.04           N
```

[2248]

```
ATOM   3902  CA  THR B 195     -56.616 -19.509 -42.428  1.00 34.68           C
ATOM   3903  C   THR B 195     -56.772 -19.460 -43.941  1.00 38.24           C
ATOM   3904  O   THR B 195     -55.875 -18.978 -44.641  1.00 35.46           O
ATOM   3905  CB  THR B 195     -56.633 -18.090 -41.835  1.00 39.64           C
ATOM   3906  OG1 THR B 195     -56.506 -18.160 -40.412  1.00 39.52           O
ATOM   3907  CG2 THR B 195     -57.957 -17.389 -42.138  1.00 36.86           C
ATOM   3908  N   ILE B 196     -57.897 -19.991 -44.448  1.00 37.14           N
ATOM   3909  CA  ILE B 196     -58.237 -19.935 -45.868  1.00 37.79           C
ATOM   3910  C   ILE B 196     -59.186 -18.760 -46.094  1.00 37.99           C
ATOM   3911  O   ILE B 196     -60.098 -18.517 -45.292  1.00 29.42           O
ATOM   3912  CB  ILE B 196     -58.851 -21.269 -46.352  1.00 34.38           C
ATOM   3913  CG1 ILE B 196     -58.861 -21.353 -47.880  1.00 33.67           C
ATOM   3914  CG2 ILE B 196     -60.249 -21.490 -45.786  1.00 30.35           C
ATOM   3915  CD1 ILE B 196     -59.372 -22.710 -48.429  1.00 30.01           C
ATOM   3916  N   SER B 197     -58.967 -18.022 -47.180  1.00 31.67           N
ATOM   3917  CA  SER B 197     -59.829 -16.906 -47.535  1.00 34.72           C
ATOM   3918  C   SER B 197     -59.743 -16.720 -49.036  1.00 37.21           C
ATOM   3919  O   SER B 197     -58.875 -17.297 -49.702  1.00 38.12           O
ATOM   3920  CB  SER B 197     -59.426 -15.609 -46.807  1.00 37.39           C
ATOM   3921  OG  SER B 197     -58.125 -15.198 -47.205  1.00 37.26           O
ATOM   3922  N   ARG B 198     -60.631 -15.882 -49.567  1.00 35.36           N
ATOM   3923  CA  ARG B 198     -60.636 -15.633 -50.999  1.00 38.27           C
ATOM   3924  C   ARG B 198     -61.078 -14.201 -51.272  1.00 40.19           C
ATOM   3925  O   ARG B 198     -61.802 -13.591 -50.479  1.00 39.55           O
ATOM   3926  CB  ARG B 198     -61.552 -16.629 -51.725  1.00 36.85           C
ATOM   3927  CG  ARG B 198     -63.011 -16.493 -51.334  1.00 38.15           C
ATOM   3928  CD  ARG B 198     -63.850 -17.697 -51.785  1.00 34.32           C
ATOM   3929  NE  ARG B 198     -63.883 -17.832 -53.238  1.00 31.82           N
ATOM   3930  CZ  ARG B 198     -64.150 -18.973 -53.856  1.00 33.42           C
ATOM   3931  NH1 ARG B 198     -64.401 -20.065 -53.138  1.00 33.66           N
ATOM   3932  NH2 ARG B 198     -64.146 -19.030 -55.173  1.00 32.53           N
ATOM   3933  N   ASP B 199     -60.629 -13.672 -52.404  1.00 42.16           N
ATOM   3934  CA  ASP B 199     -61.061 -12.369 -52.905  1.00 44.81           C
ATOM   3935  C   ASP B 199     -61.730 -12.602 -54.255  1.00 42.25           C
ATOM   3936  O   ASP B 199     -61.052 -12.781 -55.271  1.00 44.39           O
ATOM   3937  CB  ASP B 199     -59.897 -11.387 -53.035  1.00 48.23           C
ATOM   3938  CG  ASP B 199     -60.373  -9.947 -53.327  1.00 54.48           C
ATOM   3939  OD1 ASP B 199     -61.497  -9.784 -53.876  1.00 45.28           O
ATOM   3940  OD2 ASP B 199     -59.618  -8.989 -53.022  1.00 53.45           O
ATOM   3941  N   ASN B 200     -63.061 -12.606 -54.265  1.00 44.07           N
ATOM   3942  CA  ASN B 200     -63.777 -12.976 -55.482  1.00 47.55           C
ATOM   3943  C   ASN B 200     -63.669 -11.907 -56.563  1.00 46.29           C
ATOM   3944  O   ASN B 200     -63.739 -12.231 -57.754  1.00 46.18           O
ATOM   3945  CB  ASN B 200     -65.227 -13.295 -55.145  1.00 36.90           C
ATOM   3946  CG  ASN B 200     -65.375 -14.701 -54.601  1.00 37.77           C
ATOM   3947  OD1 ASN B 200     -64.532 -15.558 -54.877  1.00 36.66           O
ATOM   3948  ND2 ASN B 200     -66.422 -14.945 -53.810  1.00 33.95           N
ATOM   3949  N   SER B 201     -63.466 -10.644 -56.180  1.00 47.93           N
ATOM   3950  CA  SER B 201     -63.266  -9.599 -57.179  1.00 50.63           C
ATOM   3951  C   SER B 201     -61.884  -9.656 -57.815  1.00 49.52           C
ATOM   3952  O   SER B 201     -61.706  -9.135 -58.919  1.00 54.86           O
ATOM   3953  CB  SER B 201     -63.490  -8.218 -56.559  1.00 51.34           C
ATOM   3954  OG  SER B 201     -62.449  -7.901 -55.649  1.00 52.84           O
ATOM   3955  N   LYS B 202     -60.903 -10.269 -57.156  1.00 48.95           N
ATOM   3956  CA  LYS B 202     -59.566 -10.418 -57.724  1.00 48.37           C
ATOM   3957  C   LYS B 202     -59.274 -11.854 -58.148  1.00 47.83           C
ATOM   3958  O   LYS B 202     -58.138 -12.161 -58.529  1.00 47.20           O
ATOM   3959  CB  LYS B 202     -58.507  -9.920 -56.735  1.00 43.88           C
ATOM   3960  N   ASN B 203     -60.275 -12.739 -58.082  1.00 46.75           N
ATOM   3961  CA  ASN B 203     -60.155 -14.124 -58.545  1.00 40.99           C
ATOM   3962  C   ASN B 203     -58.978 -14.841 -57.883  1.00 41.67           C
ATOM   3963  O   ASN B 203     -58.239 -15.603 -58.510  1.00 39.12           O
ATOM   3964  CB  ASN B 203     -60.048 -14.167 -60.069  1.00 44.20           C
ATOM   3965  CG  ASN B 203     -61.414 -14.145 -60.745  1.00 45.86           C
ATOM   3966  OD1 ASN B 203     -62.419 -13.773 -60.133  1.00 50.43           O
ATOM   3967  ND2 ASN B 203     -61.453 -14.536 -62.009  1.00 47.70           N
ATOM   3968  N   THR B 204     -58.819 -14.636 -56.591  1.00 39.50           N
ATOM   3969  CA  THR B 204     -57.634 -15.136 -55.930  1.00 46.15           C
```

[2249]

```
ATOM   3970  C   THR B 204     -58.044 -15.893 -54.680  1.00 38.85           C
ATOM   3971  O   THR B 204     -58.945 -15.471 -53.947  1.00 38.61           O
ATOM   3972  CB  THR B 204     -56.664 -13.972 -55.622  1.00 47.36           C
ATOM   3973  OG1 THR B 204     -56.341 -13.318 -56.854  1.00 46.19           O
ATOM   3974  CG2 THR B 204     -55.359 -14.482 -55.027  1.00 44.07           C
ATOM   3975  N   LEU B 205     -57.387 -17.025 -54.463  1.00 40.27           N
ATOM   3976  CA  LEU B 205     -57.569 -17.839 -53.273  1.00 40.67           C
ATOM   3977  C   LEU B 205     -56.339 -17.694 -52.390  1.00 40.58           C
ATOM   3978  O   LEU B 205     -55.209 -17.724 -52.887  1.00 38.39           O
ATOM   3979  CB  LEU B 205     -57.761 -19.310 -53.659  1.00 37.82           C
ATOM   3980  CG  LEU B 205     -57.871 -20.301 -52.499  1.00 38.39           C
ATOM   3981  CD1 LEU B 205     -59.242 -20.182 -51.895  1.00 35.29           C
ATOM   3982  CD2 LEU B 205     -57.599 -21.737 -52.944  1.00 36.85           C
ATOM   3983  N   TYR B 206     -56.546 -17.567 -51.081  1.00 38.74           N
ATOM   3984  CA  TYR B 206     -55.427 -17.394 -50.166  1.00 39.07           C
ATOM   3985  C   TYR B 206     -55.395 -18.492 -49.114  1.00 41.81           C
ATOM   3986  O   TYR B 206     -56.431 -19.055 -48.734  1.00 39.81           O
ATOM   3987  CB  TYR B 206     -55.472 -16.039 -49.445  1.00 41.96           C
ATOM   3988  CG  TYR B 206     -55.423 -14.837 -50.357  1.00 42.35           C
ATOM   3989  CD1 TYR B 206     -54.241 -14.457 -50.973  1.00 44.99           C
ATOM   3990  CD2 TYR B 206     -56.558 -14.067 -50.582  1.00 44.76           C
ATOM   3991  CE1 TYR B 206     -54.191 -13.347 -51.807  1.00 48.43           C
ATOM   3992  CE2 TYR B 206     -56.522 -12.954 -51.407  1.00 47.43           C
ATOM   3993  CZ  TYR B 206     -55.334 -12.598 -52.018  1.00 52.22           C
ATOM   3994  OH  TYR B 206     -55.286 -11.493 -52.842  1.00 54.27           O
ATOM   3995  N   LEU B 207     -54.185 -18.768 -48.631  1.00 39.54           N
ATOM   3996  CA  LEU B 207     -53.969 -19.615 -47.463  1.00 36.78           C
ATOM   3997  C   LEU B 207     -52.926 -18.927 -46.595  1.00 38.16           C
ATOM   3998  O   LEU B 207     -51.755 -18.828 -46.990  1.00 40.39           O
ATOM   3999  CB  LEU B 207     -53.506 -21.014 -47.862  1.00 32.99           C
ATOM   4000  CG  LEU B 207     -53.190 -21.953 -46.703  1.00 37.04           C
ATOM   4001  CD1 LEU B 207     -54.445 -22.287 -45.938  1.00 37.64           C
ATOM   4002  CD2 LEU B 207     -52.521 -23.219 -47.216  1.00 36.02           C
ATOM   4003  N   GLN B 208     -53.355 -18.434 -45.434  1.00 34.08           N
ATOM   4004  CA  GLN B 208     -52.462 -17.818 -44.462  1.00 39.38           C
ATOM   4005  C   GLN B 208     -51.959 -18.884 -43.492  1.00 40.16           C
ATOM   4006  O   GLN B 208     -52.745 -19.444 -42.721  1.00 37.77           O
ATOM   4007  CB  GLN B 208     -53.185 -16.692 -43.719  1.00 37.43           C
ATOM   4008  CG  GLN B 208     -52.319 -15.935 -42.700  1.00 37.91           C
ATOM   4009  CD  GLN B 208     -51.090 -15.284 -43.330  1.00 40.14           C
ATOM   4010  OE1 GLN B 208     -51.180 -14.584 -44.341  1.00 44.38           O
ATOM   4011  NE2 GLN B 208     -49.934 -15.515 -42.728  1.00 39.43           N
ATOM   4012  N   MET B 209     -50.649 -19.118 -43.489  1.00 36.10           N
ATOM   4013  CA  MET B 209     -50.018 -20.158 -42.663  1.00 44.07           C
ATOM   4014  C   MET B 209     -49.252 -19.510 -41.505  1.00 42.59           C
ATOM   4015  O   MET B 209     -48.118 -19.055 -41.687  1.00 41.47           O
ATOM   4016  CB  MET B 209     -49.068 -21.012 -43.511  1.00 38.34           C
ATOM   4017  CG  MET B 209     -49.745 -21.760 -44.673  1.00 37.59           C
ATOM   4018  SD  MET B 209     -48.560 -22.361 -45.893  1.00 46.91           S
ATOM   4019  CE  MET B 209     -47.934 -23.817 -45.070  1.00 40.41           C
ATOM   4020  N   ASN B 210     -49.854 -19.523 -40.310  1.00 35.34           N
ATOM   4021  CA  ASN B 210     -49.205 -19.079 -39.081  1.00 39.42           C
ATOM   4022  C   ASN B 210     -48.747 -20.288 -38.253  1.00 43.48           C
ATOM   4023  O   ASN B 210     -49.112 -21.439 -38.521  1.00 38.95           O
ATOM   4024  CB  ASN B 210     -50.139 -18.192 -38.244  1.00 39.57           C
ATOM   4025  CG  ASN B 210     -50.567 -16.915 -38.973  1.00 45.19           C
ATOM   4026  OD1 ASN B 210     -49.829 -16.353 -39.798  1.00 42.74           O
ATOM   4027  ND2 ASN B 210     -51.764 -16.452 -38.661  1.00 42.77           N
ATOM   4028  N   SER B 211     -47.930 -20.004 -37.233  1.00 40.66           N
ATOM   4029  CA  SER B 211     -47.379 -21.019 -36.327  1.00 39.99           C
ATOM   4030  C   SER B 211     -46.786 -22.196 -37.100  1.00 37.36           C
ATOM   4031  O   SER B 211     -47.100 -23.358 -36.843  1.00 42.28           O
ATOM   4032  CB  SER B 211     -48.436 -21.521 -35.340  1.00 38.02           C
ATOM   4033  OG  SER B 211     -49.038 -20.466 -34.615  1.00 43.12           O
ATOM   4034  N   LEU B 212     -45.935 -21.887 -38.067  1.00 35.38           N
ATOM   4035  CA  LEU B 212     -45.409 -22.929 -38.938  1.00 36.89           C
ATOM   4036  C   LEU B 212     -44.568 -23.929 -38.152  1.00 37.92           C
ATOM   4037  O   LEU B 212     -43.845 -23.568 -37.215  1.00 40.64           O
```

[2250]

```
ATOM   4038  CB  LEU B 212     -44.590 -22.301 -40.068  1.00 34.68           C
ATOM   4039  CG  LEU B 212     -45.444 -21.767 -41.220  1.00 38.53           C
ATOM   4040  CD1 LEU B 212     -44.625 -21.023 -42.266  1.00 39.10           C
ATOM   4041  CD2 LEU B 212     -46.237 -22.910 -41.864  1.00 39.78           C
ATOM   4042  N   ARG B 213     -44.680 -25.198 -38.529  1.00 35.91           N
ATOM   4043  CA  ARG B 213     -43.927 -26.285 -37.915  1.00 37.54           C
ATOM   4044  C   ARG B 213     -43.174 -27.036 -38.996  1.00 39.93           C
ATOM   4045  O   ARG B 213     -43.557 -27.019 -40.169  1.00 37.51           O
ATOM   4046  CB  ARG B 213     -44.827 -27.271 -37.159  1.00 37.37           C
ATOM   4047  CG  ARG B 213     -45.669 -26.663 -36.053  1.00 41.63           C
ATOM   4048  CD  ARG B 213     -46.720 -27.665 -35.581  1.00 43.90           C
ATOM   4049  NE  ARG B 213     -47.587 -27.122 -34.539  1.00 44.72           N
ATOM   4050  CZ  ARG B 213     -48.801 -27.590 -34.271  1.00 49.05           C
ATOM   4051  NH1 ARG B 213     -49.295 -28.597 -34.984  1.00 48.93           N
ATOM   4052  NH2 ARG B 213     -49.530 -27.040 -33.310  1.00 51.49           N
ATOM   4053  N   ALA B 214     -42.105 -27.716 -38.575  1.00 38.47           N
ATOM   4054  CA  ALA B 214     -41.322 -28.525 -39.508  1.00 40.96           C
ATOM   4055  C   ALA B 214     -42.205 -29.474 -40.318  1.00 39.50           C
ATOM   4056  O   ALA B 214     -42.012 -29.632 -41.530  1.00 40.02           O
ATOM   4057  CB  ALA B 214     -40.266 -29.318 -38.738  1.00 39.37           C
ATOM   4058  N   GLU B 215     -43.208 -30.080 -39.672  1.00 38.46           N
ATOM   4059  CA  GLU B 215     -44.126 -30.998 -40.340  1.00 40.10           C
ATOM   4060  C   GLU B 215     -44.999 -30.324 -41.405  1.00 43.49           C
ATOM   4061  O   GLU B 215     -45.732 -31.020 -42.114  1.00 39.92           O
ATOM   4062  CB  GLU B 215     -45.021 -31.674 -39.294  1.00 40.57           C
ATOM   4063  N   ASP B 216     -44.963 -29.001 -41.533  1.00 40.12           N
ATOM   4064  CA  ASP B 216     -45.747 -28.329 -42.561  1.00 38.78           C
ATOM   4065  C   ASP B 216     -45.041 -28.288 -43.911  1.00 39.83           C
ATOM   4066  O   ASP B 216     -45.627 -27.805 -44.890  1.00 37.94           O
ATOM   4067  CB  ASP B 216     -46.097 -26.911 -42.100  1.00 33.67           C
ATOM   4068  CG  ASP B 216     -47.074 -26.905 -40.942  1.00 35.86           C
ATOM   4069  OD1 ASP B 216     -47.945 -27.805 -40.879  1.00 41.93           O
ATOM   4070  OD2 ASP B 216     -46.990 -25.996 -40.092  1.00 38.10           O
ATOM   4071  N   THR B 217     -43.818 -28.808 -43.992  1.00 35.60           N
ATOM   4072  CA  THR B 217     -43.061 -28.815 -45.240  1.00 36.05           C
ATOM   4073  C   THR B 217     -43.738 -29.728 -46.252  1.00 38.91           C
ATOM   4074  O   THR B 217     -44.018 -30.893 -45.948  1.00 31.24           O
ATOM   4075  CB  THR B 217     -41.633 -29.306 -44.989  1.00 37.68           C
ATOM   4076  OG1 THR B 217     -40.958 -28.414 -44.093  1.00 41.61           O
ATOM   4077  CG2 THR B 217     -40.861 -29.382 -46.300  1.00 39.09           C
ATOM   4078  N   ALA B 218     -43.980 -29.207 -47.460  1.00 37.00           N
ATOM   4079  CA  ALA B 218     -44.862 -29.866 -48.424  1.00 36.08           C
ATOM   4080  C   ALA B 218     -45.002 -29.006 -49.671  1.00 38.33           C
ATOM   4081  O   ALA B 218     -44.814 -27.783 -49.636  1.00 39.05           O
ATOM   4082  CB  ALA B 218     -46.256 -30.119 -47.835  1.00 34.56           C
ATOM   4083  N   VAL B 219     -45.345 -29.665 -50.773  1.00 33.23           N
ATOM   4084  CA  VAL B 219     -45.871 -28.983 -51.948  1.00 34.05           C
ATOM   4085  C   VAL B 219     -47.349 -28.716 -51.716  1.00 36.10           C
ATOM   4086  O   VAL B 219     -48.100 -29.627 -51.347  1.00 34.22           O
ATOM   4087  CB  VAL B 219     -45.658 -29.823 -53.217  1.00 38.29           C
ATOM   4088  CG1 VAL B 219     -46.346 -29.161 -54.401  1.00 35.89           C
ATOM   4089  CG2 VAL B 219     -44.166 -30.062 -53.482  1.00 29.69           C
ATOM   4090  N   TYR B 220     -47.762 -27.460 -51.891  1.00 37.02           N
ATOM   4091  CA  TYR B 220     -49.133 -27.037 -51.628  1.00 34.29           C
ATOM   4092  C   TYR B 220     -49.852 -26.819 -52.946  1.00 38.55           C
ATOM   4093  O   TYR B 220     -49.371 -26.061 -53.799  1.00 39.32           O
ATOM   4094  CB  TYR B 220     -49.177 -25.772 -50.776  1.00 34.39           C
ATOM   4095  CG  TYR B 220     -48.914 -26.069 -49.328  1.00 35.93           C
ATOM   4096  CD1 TYR B 220     -47.628 -26.360 -48.889  1.00 34.77           C
ATOM   4097  CD2 TYR B 220     -49.946 -26.101 -48.406  1.00 30.07           C
ATOM   4098  CE1 TYR B 220     -47.369 -26.643 -47.567  1.00 32.75           C
ATOM   4099  CE2 TYR B 220     -49.695 -26.392 -47.069  1.00 32.36           C
ATOM   4100  CZ  TYR B 220     -48.393 -26.670 -46.667  1.00 32.38           C
ATOM   4101  OH  TYR B 220     -48.106 -26.962 -45.355  1.00 34.93           O
ATOM   4102  N   TYR B 221     -50.984 -27.503 -53.113  1.00 33.13           N
ATOM   4103  CA  TYR B 221     -51.787 -27.431 -54.321  1.00 33.32           C
ATOM   4104  C   TYR B 221     -53.103 -26.710 -54.079  1.00 35.15           C
ATOM   4105  O   TYR B 221     -53.821 -27.004 -53.112  1.00 34.03           O
```

[2251]

```
ATOM   4106  CB  TYR B 221     -52.125 -28.812 -54.849  1.00 35.77           C
ATOM   4107  CG  TYR B 221     -50.969 -29.651 -55.284  1.00 33.19           C
ATOM   4108  CD1 TYR B 221     -50.431 -29.513 -56.564  1.00 36.74           C
ATOM   4109  CD2 TYR B 221     -50.443 -30.622 -54.437  1.00 31.60           C
ATOM   4110  CE1 TYR B 221     -49.374 -30.308 -56.980  1.00 38.09           C
ATOM   4111  CE2 TYR B 221     -49.392 -31.417 -54.842  1.00 38.07           C
ATOM   4112  CZ  TYR B 221     -48.867 -31.259 -56.113  1.00 37.57           C
ATOM   4113  OH  TYR B 221     -47.832 -32.050 -56.515  1.00 43.02           O
ATOM   4114  N   CYS B 222     -53.431 -25.831 -55.021  1.00 32.94           N
ATOM   4115  CA  CYS B 222     -54.727 -25.182 -55.170  1.00 38.85           C
ATOM   4116  C   CYS B 222     -55.627 -26.095 -56.000  1.00 35.81           C
ATOM   4117  O   CYS B 222     -55.144 -26.806 -56.888  1.00 38.89           O
ATOM   4118  CB  CYS B 222     -54.514 -23.823 -55.863  1.00 34.39           C
ATOM   4119  SG  CYS B 222     -55.920 -22.788 -56.211  1.00 63.90           S
ATOM   4120  N   ALA B 223     -56.924 -26.107 -55.688  1.00 34.74           N
ATOM   4121  CA  ALA B 223     -57.858 -27.026 -56.333  1.00 35.20           C
ATOM   4122  C   ALA B 223     -59.249 -26.414 -56.430  1.00 30.60           C
ATOM   4123  O   ALA B 223     -59.724 -25.792 -55.483  1.00 34.30           O
ATOM   4124  CB  ALA B 223     -57.938 -28.355 -55.582  1.00 34.20           C
ATOM   4125  N   ARG B 224     -59.895 -26.592 -57.578  1.00 34.04           N
ATOM   4126  CA  ARG B 224     -61.281 -26.171 -57.786  1.00 36.72           C
ATOM   4127  C   ARG B 224     -62.212 -27.374 -57.607  1.00 34.36           C
ATOM   4128  O   ARG B 224     -61.966 -28.433 -58.188  1.00 34.72           O
ATOM   4129  CB  ARG B 224     -61.462 -25.562 -59.183  1.00 32.92           C
ATOM   4130  CG  ARG B 224     -62.852 -24.974 -59.435  1.00 35.84           C
ATOM   4131  CD  ARG B 224     -63.095 -24.569 -60.890  1.00 34.09           C
ATOM   4132  NE  ARG B 224     -63.148 -25.724 -61.786  1.00 37.88           N
ATOM   4133  CZ  ARG B 224     -63.775 -25.738 -62.959  1.00 36.97           C
ATOM   4134  NH1 ARG B 224     -63.741 -26.813 -63.720  1.00 36.61           N
ATOM   4135  NH2 ARG B 224     -64.440 -24.675 -63.371  1.00 43.92           N
ATOM   4136  N   ASP B 225     -63.263 -27.217 -56.794  1.00 30.23           N
ATOM   4137  CA  ASP B 225     -64.204 -28.296 -56.505  1.00 34.06           C
ATOM   4138  C   ASP B 225     -65.581 -28.028 -57.128  1.00 35.42           C
ATOM   4139  O   ASP B 225     -66.127 -26.922 -57.012  1.00 34.04           O
ATOM   4140  CB  ASP B 225     -64.373 -28.482 -54.992  1.00 32.01           C
ATOM   4141  CG  ASP B 225     -63.047 -28.703 -54.263  1.00 46.30           C
ATOM   4142  OD1 ASP B 225     -62.132 -29.330 -54.837  1.00 44.42           O
ATOM   4143  OD2 ASP B 225     -62.923 -28.255 -53.097  1.00 49.41           O
ATOM   4144  N   LEU B 226     -66.182 -29.062 -57.728  1.00 33.98           N
ATOM   4145  CA  LEU B 226     -67.521 -28.905 -58.313  1.00 32.97           C
ATOM   4146  C   LEU B 226     -68.588 -28.799 -57.225  1.00 33.80           C
ATOM   4147  O   LEU B 226     -69.561 -28.043 -57.357  1.00 33.95           O
ATOM   4148  CB  LEU B 226     -67.831 -30.083 -59.241  1.00 31.50           C
ATOM   4149  CG  LEU B 226     -66.821 -30.426 -60.335  1.00 32.36           C
ATOM   4150  CD1 LEU B 226     -67.215 -31.731 -61.041  1.00 29.84           C
ATOM   4151  CD2 LEU B 226     -66.693 -29.268 -61.327  1.00 32.57           C
ATOM   4152  N   ILE B 227     -68.450 -29.600 -56.171  1.00 36.39           N
ATOM   4153  CA  ILE B 227     -69.153 -29.422 -54.910  1.00 35.45           C
ATOM   4154  C   ILE B 227     -68.120 -29.682 -53.818  1.00 32.94           C
ATOM   4155  O   ILE B 227     -67.011 -30.135 -54.091  1.00 35.50           O
ATOM   4156  CB  ILE B 227     -70.373 -30.366 -54.755  1.00 31.99           C
ATOM   4157  CG1 ILE B 227     -69.940 -31.836 -54.846  1.00 31.51           C
ATOM   4158  CG2 ILE B 227     -71.437 -30.070 -55.794  1.00 29.68           C
ATOM   4159  CD1 ILE B 227     -71.075 -32.839 -54.546  1.00 30.06           C
ATOM   4160  N   HIS B 228     -68.492 -29.392 -52.573  1.00 33.95           N
ATOM   4161  CA  HIS B 228     -67.625 -29.680 -51.435  1.00 31.78           C
ATOM   4162  C   HIS B 228     -67.171 -31.135 -51.460  1.00 32.48           C
ATOM   4163  O   HIS B 228     -67.998 -32.052 -51.511  1.00 34.11           O
ATOM   4164  CB  HIS B 228     -68.371 -29.372 -50.138  1.00 30.85           C
ATOM   4165  CG  HIS B 228     -67.692 -29.902 -48.915  1.00 35.68           C
ATOM   4166  ND1 HIS B 228     -66.641 -29.254 -48.302  1.00 38.66           N
ATOM   4167  CD2 HIS B 228     -67.892 -31.046 -48.214  1.00 36.85           C
ATOM   4168  CE1 HIS B 228     -66.238 -29.968 -47.264  1.00 39.46           C
ATOM   4169  NE2 HIS B 228     -66.988 -31.055 -47.185  1.00 35.02           N
ATOM   4170  N   GLY B 229     -65.855 -31.348 -51.472  1.00 33.73           N
ATOM   4171  CA  GLY B 229     -65.277 -32.681 -51.444  1.00 27.42           C
ATOM   4172  C   GLY B 229     -65.027 -33.312 -52.797  1.00 32.96           C
ATOM   4173  O   GLY B 229     -64.511 -34.431 -52.850  1.00 32.55           O
```

[2252]

```
ATOM   4174  N   VAL B 230     -65.374 -32.647 -53.896  1.00 35.21           N
ATOM   4175  CA  VAL B 230     -65.265 -33.240 -55.228  1.00 33.02           C
ATOM   4176  C   VAL B 230     -64.354 -32.331 -56.046  1.00 35.88           C
ATOM   4177  O   VAL B 230     -64.809 -31.436 -56.758  1.00 32.89           O
ATOM   4178  CB  VAL B 230     -66.629 -33.442 -55.902  1.00 31.59           C
ATOM   4179  CG1 VAL B 230     -66.466 -34.087 -57.302  1.00 29.24           C
ATOM   4180  CG2 VAL B 230     -67.531 -34.330 -55.038  1.00 32.17           C
ATOM   4181  N   THR B 231     -63.050 -32.595 -55.978  1.00 37.70           N
ATOM   4182  CA  THR B 231     -62.056 -31.785 -56.665  1.00 35.71           C
ATOM   4183  C   THR B 231     -62.003 -32.174 -58.134  1.00 35.94           C
ATOM   4184  O   THR B 231     -61.904 -33.360 -58.463  1.00 38.97           O
ATOM   4185  CB  THR B 231     -60.666 -31.965 -56.031  1.00 39.29           C
ATOM   4186  OG1 THR B 231     -60.664 -31.459 -54.696  1.00 39.13           O
ATOM   4187  CG2 THR B 231     -59.620 -31.216 -56.824  1.00 36.05           C
ATOM   4188  N   ARG B 232     -62.076 -31.174 -59.012  1.00 35.91           N
ATOM   4189  CA  ARG B 232     -62.029 -31.372 -60.455  1.00 32.05           C
ATOM   4190  C   ARG B 232     -60.744 -30.879 -61.113  1.00 34.75           C
ATOM   4191  O   ARG B 232     -60.365 -31.407 -62.153  1.00 35.26           O
ATOM   4192  CB  ARG B 232     -63.223 -30.665 -61.105  1.00 33.09           C
ATOM   4193  CG  ARG B 232     -63.371 -30.842 -62.596  1.00 33.32           C
ATOM   4194  CD  ARG B 232     -63.588 -32.308 -62.972  1.00 37.79           C
ATOM   4195  NE  ARG B 232     -63.725 -32.439 -64.418  1.00 38.74           N
ATOM   4196  CZ  ARG B 232     -62.718 -32.338 -65.285  1.00 41.40           C
ATOM   4197  NH1 ARG B 232     -61.482 -32.110 -64.867  1.00 37.33           N
ATOM   4198  NH2 ARG B 232     -62.946 -32.465 -66.584  1.00 43.94           N
ATOM   4199  N   ASN B 233     -60.083 -29.862 -60.565  1.00 33.59           N
ATOM   4200  CA  ASN B 233     -58.921 -29.257 -61.213  1.00 38.98           C
ATOM   4201  C   ASN B 233     -57.845 -28.946 -60.185  1.00 35.51           C
ATOM   4202  O   ASN B 233     -58.147 -28.540 -59.062  1.00 31.65           O
ATOM   4203  CB  ASN B 233     -59.285 -27.960 -61.960  1.00 38.05           C
ATOM   4204  CG  ASN B 233     -60.436 -28.149 -62.919  1.00 34.80           C
ATOM   4205  OD1 ASN B 233     -61.589 -28.066 -62.535  1.00 37.81           O
ATOM   4206  ND2 ASN B 233     -60.123 -28.452 -64.165  1.00 38.41           N
ATOM   4207  N   TRP B 234     -56.593 -29.120 -60.588  1.00 34.85           N
ATOM   4208  CA  TRP B 234     -55.443 -28.955 -59.715  1.00 39.02           C
ATOM   4209  C   TRP B 234     -54.503 -27.920 -60.311  1.00 41.42           C
ATOM   4210  O   TRP B 234     -54.231 -27.942 -61.516  1.00 39.31           O
ATOM   4211  CB  TRP B 234     -54.668 -30.275 -59.536  1.00 35.69           C
ATOM   4212  CG  TRP B 234     -55.394 -31.357 -58.825  1.00 35.48           C
ATOM   4213  CD1 TRP B 234     -56.396 -32.145 -59.331  1.00 39.33           C
ATOM   4214  CD2 TRP B 234     -55.183 -31.792 -57.475  1.00 33.74           C
ATOM   4215  NE1 TRP B 234     -56.813 -33.046 -58.378  1.00 33.29           N
ATOM   4216  CE2 TRP B 234     -56.095 -32.843 -57.227  1.00 36.14           C
ATOM   4217  CE3 TRP B 234     -54.311 -31.400 -56.452  1.00 33.92           C
ATOM   4218  CZ2 TRP B 234     -56.158 -33.506 -55.996  1.00 35.93           C
ATOM   4219  CZ3 TRP B 234     -54.376 -32.062 -55.229  1.00 35.23           C
ATOM   4220  CH2 TRP B 234     -55.294 -33.098 -55.012  1.00 32.25           C
ATOM   4221  N   GLY B 235     -53.979 -27.044 -59.459  1.00 40.10           N
ATOM   4222  CA  GLY B 235     -52.852 -26.225 -59.846  1.00 41.79           C
ATOM   4223  C   GLY B 235     -51.585 -27.065 -59.913  1.00 44.40           C
ATOM   4224  O   GLY B 235     -51.585 -28.280 -59.709  1.00 43.63           O
ATOM   4225  N   CYS B 236     -50.469 -26.385 -60.154  1.00 45.20           N
ATOM   4226  CA  CYS B 236     -49.206 -27.088 -60.287  1.00 46.37           C
ATOM   4227  C   CYS B 236     -48.424 -27.141 -58.980  1.00 45.86           C
ATOM   4228  O   CYS B 236     -47.471 -27.916 -58.877  1.00 45.71           O
ATOM   4229  CB  CYS B 236     -48.363 -26.429 -61.398  1.00 48.67           C
ATOM   4230  SG  CYS B 236     -48.593 -27.190 -63.065  1.00 68.88           S
ATOM   4231  N   GLY B 237     -48.841 -26.400 -57.969  1.00 42.44           N
ATOM   4232  CA  GLY B 237     -48.244 -26.569 -56.660  1.00 42.29           C
ATOM   4233  C   GLY B 237     -47.103 -25.601 -56.423  1.00 45.34           C
ATOM   4234  O   GLY B 237     -46.371 -25.217 -57.328  1.00 43.26           O
ATOM   4235  N   THR B 238     -46.946 -25.206 -55.170  1.00 42.95           N
ATOM   4236  CA  THR B 238     -45.824 -24.382 -54.762  1.00 41.23           C
ATOM   4237  C   THR B 238     -45.178 -25.035 -53.552  1.00 39.83           C
ATOM   4238  O   THR B 238     -45.863 -25.622 -52.710  1.00 38.44           O
ATOM   4239  CB  THR B 238     -46.256 -22.933 -54.457  1.00 45.33           C
ATOM   4240  OG1 THR B 238     -45.097 -22.145 -54.168  1.00 44.22           O
ATOM   4241  CG2 THR B 238     -47.234 -22.870 -53.274  1.00 38.03           C
```

[2253]

```
ATOM   4242  N   LEU B 239     -43.861 -24.956 -53.477  1.00 40.03           N
ATOM   4243  CA  LEU B 239     -43.129 -25.720 -52.481  1.00 41.60           C
ATOM   4244  C   LEU B 239     -42.893 -24.845 -51.252  1.00 42.91           C
ATOM   4245  O   LEU B 239     -42.359 -23.737 -51.364  1.00 44.40           O
ATOM   4246  CB  LEU B 239     -41.816 -26.224 -53.087  1.00 38.00           C
ATOM   4247  CG  LEU B 239     -40.818 -27.061 -52.280  1.00 47.46           C
ATOM   4248  CD1 LEU B 239     -39.800 -26.193 -51.587  1.00 52.70           C
ATOM   4249  CD2 LEU B 239     -41.511 -27.985 -51.282  1.00 42.79           C
ATOM   4250  N   VAL B 240     -43.292 -25.339 -50.083  1.00 39.28           N
ATOM   4251  CA  VAL B 240     -43.079 -24.644 -48.817  1.00 40.84           C
ATOM   4252  C   VAL B 240     -42.172 -25.516 -47.958  1.00 47.08           C
ATOM   4253  O   VAL B 240     -42.552 -26.633 -47.586  1.00 45.09           O
ATOM   4254  CB  VAL B 240     -44.406 -24.343 -48.104  1.00 38.74           C
ATOM   4255  CG1 VAL B 240     -44.169 -23.781 -46.724  1.00 39.95           C
ATOM   4256  CG2 VAL B 240     -45.233 -23.348 -48.931  1.00 39.86           C
ATOM   4257  N   THR B 241     -40.982 -25.005 -47.632  1.00 48.35           N
ATOM   4258  CA  THR B 241     -40.029 -25.718 -46.788  1.00 46.00           C
ATOM   4259  C   THR B 241     -39.891 -24.990 -45.462  1.00 47.23           C
ATOM   4260  O   THR B 241     -39.558 -23.802 -45.432  1.00 48.05           O
ATOM   4261  CB  THR B 241     -38.649 -25.820 -47.445  1.00 52.44           C
ATOM   4262  OG1 THR B 241     -38.784 -26.261 -48.794  1.00 54.07           O
ATOM   4263  CG2 THR B 241     -37.749 -26.828 -46.694  1.00 50.91           C
ATOM   4264  N   VAL B 242     -40.105 -25.710 -44.371  1.00 43.60           N
ATOM   4265  CA  VAL B 242     -39.930 -25.169 -43.034  1.00 47.23           C
ATOM   4266  C   VAL B 242     -38.711 -25.867 -42.453  1.00 51.08           C
ATOM   4267  O   VAL B 242     -38.702 -27.098 -42.307  1.00 50.04           O
ATOM   4268  CB  VAL B 242     -41.166 -25.386 -42.152  1.00 45.46           C
ATOM   4269  CG1 VAL B 242     -40.987 -24.654 -40.829  1.00 44.35           C
ATOM   4270  CG2 VAL B 242     -42.447 -24.929 -42.873  1.00 45.86           C
ATOM   4271  N   SER B 243     -37.667 -25.095 -42.167  1.00 49.46           N
ATOM   4272  CA  SER B 243     -36.409 -25.685 -41.737  1.00 50.97           C
ATOM   4273  C   SER B 243     -35.650 -24.699 -40.866  1.00 55.37           C
ATOM   4274  O   SER B 243     -35.742 -23.479 -41.053  1.00 49.99           O
ATOM   4275  CB  SER B 243     -35.552 -26.092 -42.942  1.00 53.15           C
ATOM   4276  N   ALA B 244     -34.895 -25.246 -39.917  1.00 59.75           N
ATOM   4277  CA  ALA B 244     -34.049 -24.449 -39.034  1.00 69.67           C
ATOM   4278  C   ALA B 244     -32.727 -24.106 -39.729  1.00 65.63           C
ATOM   4279  O   ALA B 244     -32.344 -22.941 -39.813  1.00 65.23           O
ATOM   4280  CB  ALA B 244     -33.792 -25.193 -37.716  1.00 65.93           C
TER
ATOM   4281  N   ARG C  20     -73.076  13.729 -61.096  1.00 92.41           N
ATOM   4282  CA  ARG C  20     -74.280  14.123 -61.820  1.00 95.04           C
ATOM   4283  C   ARG C  20     -75.519  13.874 -60.965  1.00 98.35           C
ATOM   4284  O   ARG C  20     -75.982  12.741 -60.832  1.00 96.40           O
ATOM   4285  CB  ARG C  20     -74.384  13.369 -63.148  1.00 91.05           C
ATOM   4286  N   THR C  21     -76.052  14.950 -60.395  1.00 99.76           N
ATOM   4287  CA  THR C  21     -77.144  14.869 -59.437  1.00103.31           C
ATOM   4288  C   THR C  21     -78.490  15.088 -60.123  1.00102.75           C
ATOM   4289  O   THR C  21     -78.624  15.956 -60.991  1.00 98.82           O
ATOM   4290  CB  THR C  21     -76.943  15.908 -58.330  1.00100.57           C
ATOM   4291  OG1 THR C  21     -76.939  17.221 -58.908  1.00 97.36           O
ATOM   4292  CG2 THR C  21     -75.614  15.682 -57.613  1.00 90.52           C
ATOM   4293  N   VAL C  22     -79.489  14.287 -59.730  1.00102.74           N
ATOM   4294  CA  VAL C  22     -80.868  14.469 -60.173  1.00105.00           C
ATOM   4295  C   VAL C  22     -81.821  14.167 -59.021  1.00104.85           C
ATOM   4296  O   VAL C  22     -81.452  13.559 -58.013  1.00100.52           O
ATOM   4297  CB  VAL C  22     -81.242  13.593 -61.391  1.00104.42           C
ATOM   4298  CG1 VAL C  22     -80.423  13.972 -62.621  1.00104.18           C
ATOM   4299  CG2 VAL C  22     -81.096  12.116 -61.052  1.00107.84           C
ATOM   4300  N   MET C  23     -83.069  14.594 -59.199  1.00107.77           N
ATOM   4301  CA  MET C  23     -84.109  14.491 -58.187  1.00108.31           C
ATOM   4302  C   MET C  23     -84.879  13.180 -58.331  1.00107.05           C
ATOM   4303  O   MET C  23     -84.880  12.541 -59.387  1.00106.11           O
ATOM   4304  CB  MET C  23     -85.080  15.676 -58.288  1.00108.52           C
ATOM   4305  CG  MET C  23     -84.507  17.046 -57.902  1.00101.80           C
ATOM   4306  SD  MET C  23     -84.485  17.357 -56.119  1.00113.38           S
ATOM   4307  CE  MET C  23     -84.183  19.126 -56.066  1.00 96.03           C
ATOM   4308  N   VAL C  24     -85.546  12.788 -57.247  1.00106.65           N
```

[2254]

```
ATOM   4309  CA  VAL C  24     -86.377  11.588 -57.240  1.00103.15           C
ATOM   4310  C   VAL C  24     -87.352  11.687 -56.074  1.00103.40           C
ATOM   4311  O   VAL C  24     -86.971  12.053 -54.959  1.00102.80           O
ATOM   4312  CB  VAL C  24     -85.517  10.305 -57.152  1.00 96.58           C
ATOM   4313  N   ASN C  25     -88.615  11.354 -56.344  1.00101.20           N
ATOM   4314  CA  ASN C  25     -89.663  11.324 -55.334  1.00101.38           C
ATOM   4315  C   ASN C  25     -89.726   9.935 -54.691  1.00104.98           C
ATOM   4316  O   ASN C  25     -88.852   9.089 -54.902  1.00103.60           O
ATOM   4317  CB  ASN C  25     -91.001  11.725 -55.956  1.00102.73           C
ATOM   4318  CG  ASN C  25     -91.287  10.988 -57.258  1.00102.21           C
ATOM   4319  OD1 ASN C  25     -90.421  10.886 -58.128  1.00102.40           O
ATOM   4320  ND2 ASN C  25     -92.504  10.470 -57.394  1.00 97.24           N
ATOM   4321  N   LEU C  26     -90.766   9.687 -53.895  1.00101.80           N
ATOM   4322  CA  LEU C  26     -90.969   8.388 -53.247  1.00100.33           C
ATOM   4323  C   LEU C  26     -91.143   7.274 -54.278  1.00 99.59           C
ATOM   4324  O   LEU C  26     -90.617   6.171 -54.112  1.00 96.52           O
ATOM   4325  CB  LEU C  26     -92.189   8.435 -52.316  1.00102.47           C
ATOM   4326  CG  LEU C  26     -92.976   7.134 -52.088  1.00102.83           C
ATOM   4327  CD1 LEU C  26     -92.263   6.197 -51.115  1.00 97.25           C
ATOM   4328  CD2 LEU C  26     -94.404   7.413 -51.627  1.00 96.99           C
ATOM   4329  N   ALA C  36     -92.217  -9.453 -44.777  1.00 76.29           N
ATOM   4330  CA  ALA C  36     -91.499 -10.699 -45.003  1.00 77.74           C
ATOM   4331  C   ALA C  36     -91.941 -11.345 -46.306  1.00 76.69           C
ATOM   4332  O   ALA C  36     -93.136 -11.592 -46.510  1.00 72.99           O
ATOM   4333  CB  ALA C  36     -91.710 -11.672 -43.831  1.00 72.36           C
ATOM   4334  N   PRO C  37     -90.982 -11.627 -47.193  1.00 73.16           N
ATOM   4335  CA  PRO C  37     -91.304 -12.469 -48.353  1.00 70.41           C
ATOM   4336  C   PRO C  37     -91.770 -13.851 -47.945  1.00 68.19           C
ATOM   4337  O   PRO C  37     -92.405 -14.540 -48.752  1.00 68.12           O
ATOM   4338  CB  PRO C  37     -89.987 -12.515 -49.140  1.00 70.85           C
ATOM   4339  CG  PRO C  37     -88.930 -12.167 -48.150  1.00 69.11           C
ATOM   4340  CD  PRO C  37     -89.563 -11.234 -47.162  1.00 69.65           C
ATOM   4341  N   ALA C  38     -91.498 -14.264 -46.702  1.00 67.65           N
ATOM   4342  CA  ALA C  38     -92.033 -15.500 -46.151  1.00 63.04           C
ATOM   4343  C   ALA C  38     -93.547 -15.468 -46.007  1.00 66.38           C
ATOM   4344  O   ALA C  38     -94.136 -16.485 -45.617  1.00 68.53           O
ATOM   4345  CB  ALA C  38     -91.386 -15.792 -44.796  1.00 59.38           C
ATOM   4346  N   ARG C  39     -94.191 -14.341 -46.318  1.00 70.56           N
ATOM   4347  CA  ARG C  39     -95.647 -14.233 -46.316  1.00 64.43           C
ATOM   4348  C   ARG C  39     -96.254 -14.436 -47.695  1.00 61.07           C
ATOM   4349  O   ARG C  39     -97.346 -15.005 -47.816  1.00 60.28           O
ATOM   4350  CB  ARG C  39     -96.074 -12.866 -45.775  1.00 67.10           C
ATOM   4351  N   SER C  40     -95.577 -13.976 -48.743  1.00 60.78           N
ATOM   4352  CA  SER C  40     -96.064 -14.195 -50.094  1.00 58.86           C
ATOM   4353  C   SER C  40     -95.515 -15.466 -50.724  1.00 54.71           C
ATOM   4354  O   SER C  40     -96.113 -15.970 -51.684  1.00 53.36           O
ATOM   4355  CB  SER C  40     -95.713 -13.002 -50.990  1.00 60.37           C
ATOM   4356  OG  SER C  40     -94.338 -13.024 -51.348  1.00 71.68           O
ATOM   4357  N   SER C  41     -94.404 -16.003 -50.213  1.00 56.96           N
ATOM   4358  CA  SER C  41     -93.730 -17.108 -50.887  1.00 46.03           C
ATOM   4359  C   SER C  41     -93.070 -18.035 -49.885  1.00 46.08           C
ATOM   4360  O   SER C  41     -92.351 -17.567 -49.001  1.00 47.42           O
ATOM   4361  CB  SER C  41     -92.678 -16.597 -51.868  1.00 48.66           C
ATOM   4362  OG  SER C  41     -91.955 -17.690 -52.415  1.00 47.12           O
ATOM   4363  N   ASP C  42     -93.286 -19.349 -50.046  1.00 42.96           N
ATOM   4364  CA  ASP C  42     -92.673 -20.352 -49.179  1.00 38.26           C
ATOM   4365  C   ASP C  42     -91.699 -21.257 -49.927  1.00 33.62           C
ATOM   4366  O   ASP C  42     -91.484 -22.396 -49.521  1.00 38.06           O
ATOM   4367  CB  ASP C  42     -93.733 -21.191 -48.454  1.00 42.77           C
ATOM   4368  CG  ASP C  42     -94.590 -22.056 -49.394  1.00 39.22           C
ATOM   4369  OD1 ASP C  42     -94.454 -21.979 -50.631  1.00 40.36           O
ATOM   4370  OD2 ASP C  42     -95.421 -22.827 -48.870  1.00 39.93           O
ATOM   4371  N   TYR C  43     -91.086 -20.766 -51.010  1.00 31.49           N
ATOM   4372  CA  TYR C  43     -90.011 -21.531 -51.637  1.00 36.19           C
ATOM   4373  C   TYR C  43     -88.865 -21.785 -50.664  1.00 35.20           C
ATOM   4374  O   TYR C  43     -88.235 -22.846 -50.714  1.00 33.01           O
ATOM   4375  CB  TYR C  43     -89.477 -20.826 -52.890  1.00 31.63           C
ATOM   4376  CG  TYR C  43     -90.426 -20.849 -54.068  1.00 36.69           C
```

[2255]

```
ATOM   4377  CD1 TYR C  43     -91.417 -21.831 -54.177  1.00 38.66           C
ATOM   4378  CD2 TYR C  43     -90.354 -19.884 -55.059  1.00 34.38           C
ATOM   4379  CE1 TYR C  43     -92.298 -21.849 -55.251  1.00 35.54           C
ATOM   4380  CE2 TYR C  43     -91.247 -19.886 -56.134  1.00 35.55           C
ATOM   4381  CZ  TYR C  43     -92.210 -20.874 -56.224  1.00 33.68           C
ATOM   4382  OH  TYR C  43     -93.081 -20.886 -57.289  1.00 36.00           O
ATOM   4383  N   TYR C  44     -88.600 -20.843 -49.756  1.00 31.57           N
ATOM   4384  CA  TYR C  44     -87.500 -21.022 -48.817  1.00 35.60           C
ATOM   4385  C   TYR C  44     -87.664 -22.283 -47.982  1.00 38.37           C
ATOM   4386  O   TYR C  44     -86.661 -22.818 -47.492  1.00 35.93           O
ATOM   4387  CB  TYR C  44     -87.374 -19.799 -47.907  1.00 33.49           C
ATOM   4388  CG  TYR C  44     -88.514 -19.681 -46.945  1.00 39.42           C
ATOM   4389  CD1 TYR C  44     -89.755 -19.219 -47.365  1.00 39.55           C
ATOM   4390  CD2 TYR C  44     -88.369 -20.055 -45.624  1.00 41.66           C
ATOM   4391  CE1 TYR C  44     -90.818 -19.125 -46.489  1.00 43.53           C
ATOM   4392  CE2 TYR C  44     -89.428 -19.972 -44.742  1.00 45.74           C
ATOM   4393  CZ  TYR C  44     -90.654 -19.506 -45.181  1.00 46.79           C
ATOM   4394  OH  TYR C  44     -91.715 -19.415 -44.302  1.00 46.01           O
ATOM   4395  N   ASN C  45     -88.904 -22.770 -47.812  1.00 37.58           N
ATOM   4396  CA  ASN C  45     -89.173 -24.011 -47.090  1.00 34.93           C
ATOM   4397  C   ASN C  45     -89.203 -25.233 -47.998  1.00 33.35           C
ATOM   4398  O   ASN C  45     -88.831 -26.325 -47.570  1.00 35.69           O
ATOM   4399  CB  ASN C  45     -90.521 -23.938 -46.366  1.00 41.02           C
ATOM   4400  CG  ASN C  45     -90.439 -23.232 -45.041  1.00 51.60           C
ATOM   4401  OD1 ASN C  45     -89.405 -23.267 -44.369  1.00 54.01           O
ATOM   4402  ND2 ASN C  45     -91.538 -22.588 -44.642  1.00 48.69           N
ATOM   4403  N   ARG C  46     -89.701 -25.084 -49.224  1.00 36.59           N
ATOM   4404  CA  ARG C  46     -90.047 -26.218 -50.076  1.00 35.77           C
ATOM   4405  C   ARG C  46     -88.954 -26.561 -51.076  1.00 32.85           C
ATOM   4406  O   ARG C  46     -88.948 -27.676 -51.616  1.00 36.26           O
ATOM   4407  CB  ARG C  46     -91.368 -25.923 -50.816  1.00 33.76           C
ATOM   4408  CG  ARG C  46     -92.579 -25.793 -49.869  1.00 38.04           C
ATOM   4409  CD  ARG C  46     -93.833 -25.149 -50.539  1.00 36.96           C
ATOM   4410  NE  ARG C  46     -94.142 -25.767 -51.825  1.00 38.84           N
ATOM   4411  CZ  ARG C  46     -94.606 -25.110 -52.882  1.00 40.42           C
ATOM   4412  NH1 ARG C  46     -94.827 -23.803 -52.813  1.00 42.49           N
ATOM   4413  NH2 ARG C  46     -94.835 -25.758 -54.016  1.00 39.00           N
ATOM   4414  N   SER C  47     -88.043 -25.629 -51.319  1.00 30.66           N
ATOM   4415  CA  SER C  47     -86.875 -25.862 -52.152  1.00 34.17           C
ATOM   4416  C   SER C  47     -86.069 -27.054 -51.650  1.00 33.00           C
ATOM   4417  O   SER C  47     -85.998 -27.319 -50.448  1.00 32.03           O
ATOM   4418  CB  SER C  47     -85.996 -24.605 -52.160  1.00 33.39           C
ATOM   4419  OG  SER C  47     -84.784 -24.817 -52.856  1.00 30.79           O
ATOM   4420  N   THR C  48     -85.460 -27.785 -52.593  1.00 30.63           N
ATOM   4421  CA  THR C  48     -84.462 -28.769 -52.204  1.00 32.26           C
ATOM   4422  C   THR C  48     -83.209 -28.115 -51.662  1.00 32.36           C
ATOM   4423  O   THR C  48     -82.407 -28.807 -51.038  1.00 31.04           O
ATOM   4424  CB  THR C  48     -84.064 -29.702 -53.363  1.00 32.48           C
ATOM   4425  OG1 THR C  48     -83.456 -28.959 -54.424  1.00 29.67           O
ATOM   4426  CG2 THR C  48     -85.260 -30.451 -53.884  1.00 31.47           C
ATOM   4427  N   SER C  49     -83.029 -26.812 -51.882  1.00 29.55           N
ATOM   4428  CA  SER C  49     -81.977 -26.025 -51.244  1.00 32.47           C
ATOM   4429  C   SER C  49     -82.642 -24.953 -50.379  1.00 32.39           C
ATOM   4430  O   SER C  49     -82.647 -23.767 -50.737  1.00 32.00           O
ATOM   4431  CB  SER C  49     -81.044 -25.404 -52.285  1.00 31.79           C
ATOM   4432  OG  SER C  49     -81.763 -24.644 -53.257  1.00 30.69           O
ATOM   4433  N   PRO C  50     -83.230 -25.342 -49.246  1.00 28.68           N
ATOM   4434  CA  PRO C  50     -83.988 -24.381 -48.435  1.00 31.01           C
ATOM   4435  C   PRO C  50     -83.081 -23.361 -47.756  1.00 33.33           C
ATOM   4436  O   PRO C  50     -81.877 -23.559 -47.611  1.00 31.57           O
ATOM   4437  CB  PRO C  50     -84.687 -25.271 -47.405  1.00 35.49           C
ATOM   4438  CG  PRO C  50     -83.802 -26.477 -47.298  1.00 27.83           C
ATOM   4439  CD  PRO C  50     -83.249 -26.695 -48.664  1.00 29.34           C
ATOM   4440  N   TRP C  51     -83.683 -22.252 -47.332  1.00 34.22           N
ATOM   4441  CA  TRP C  51     -82.904 -21.159 -46.770  1.00 36.56           C
ATOM   4442  C   TRP C  51     -83.701 -20.446 -45.691  1.00 40.02           C
ATOM   4443  O   TRP C  51     -84.929 -20.565 -45.609  1.00 39.01           O
ATOM   4444  CB  TRP C  51     -82.443 -20.169 -47.861  1.00 34.93           C
```

[2256]

```
ATOM   4445  CG  TRP C  51     -83.543 -19.440 -48.648  1.00 38.25           C
ATOM   4446  CD1 TRP C  51     -84.095 -18.230 -48.341  1.00 37.76           C
ATOM   4447  CD2 TRP C  51     -84.154 -19.848 -49.890  1.00 33.99           C
ATOM   4448  NE1 TRP C  51     -85.016 -17.869 -49.292  1.00 35.96           N
ATOM   4449  CE2 TRP C  51     -85.072 -18.841 -50.255  1.00 39.23           C
ATOM   4450  CE3 TRP C  51     -84.019 -20.964 -50.721  1.00 35.60           C
ATOM   4451  CZ2 TRP C  51     -85.862 -18.924 -51.409  1.00 35.33           C
ATOM   4452  CZ3 TRP C  51     -84.802 -21.044 -51.871  1.00 31.66           C
ATOM   4453  CH2 TRP C  51     -85.708 -20.032 -52.203  1.00 30.48           C
ATOM   4454  N   ASN C  52     -82.974 -19.715 -44.849  1.00 40.43           N
ATOM   4455  CA  ASN C  52     -83.544 -18.841 -43.834  1.00 43.12           C
ATOM   4456  C   ASN C  52     -83.483 -17.411 -44.323  1.00 42.99           C
ATOM   4457  O   ASN C  52     -82.630 -17.056 -45.138  1.00 44.03           O
ATOM   4458  CB  ASN C  52     -82.774 -18.925 -42.512  1.00 46.91           C
ATOM   4459  CG  ASN C  52     -82.817 -20.293 -41.891  1.00 50.54           C
ATOM   4460  OD1 ASN C  52     -83.891 -20.872 -41.705  1.00 45.53           O
ATOM   4461  ND2 ASN C  52     -81.641 -20.825 -41.563  1.00 43.77           N
ATOM   4462  N   LEU C  53     -84.358 -16.574 -43.769  1.00 45.38           N
ATOM   4463  CA  LEU C  53     -84.361 -15.142 -44.048  1.00 45.27           C
ATOM   4464  C   LEU C  53     -83.925 -14.391 -42.793  1.00 52.46           C
ATOM   4465  O   LEU C  53     -84.628 -14.408 -41.778  1.00 52.78           O
ATOM   4466  CB  LEU C  53     -85.736 -14.689 -44.515  1.00 46.74           C
ATOM   4467  CG  LEU C  53     -86.156 -15.207 -45.886  1.00 44.68           C
ATOM   4468  CD1 LEU C  53     -87.583 -14.778 -46.181  1.00 58.38           C
ATOM   4469  CD2 LEU C  53     -85.208 -14.729 -46.988  1.00 45.24           C
ATOM   4470  N   HIS C  54     -82.761 -13.746 -42.859  1.00 51.31           N
ATOM   4471  CA  HIS C  54     -82.207 -12.978 -41.747  1.00 57.91           C
ATOM   4472  C   HIS C  54     -82.394 -11.492 -42.045  1.00 61.84           C
ATOM   4473  O   HIS C  54     -81.777 -10.953 -42.972  1.00 57.63           O
ATOM   4474  CB  HIS C  54     -80.731 -13.311 -41.520  1.00 61.85           C
ATOM   4475  CG  HIS C  54     -80.469 -14.759 -41.217  1.00 68.67           C
ATOM   4476  ND1 HIS C  54     -80.781 -15.338 -40.004  1.00 70.81           N
ATOM   4477  CD2 HIS C  54     -79.915 -15.741 -41.970  1.00 65.04           C
ATOM   4478  CE1 HIS C  54     -80.437 -16.614 -40.027  1.00 71.18           C
ATOM   4479  NE2 HIS C  54     -79.909 -16.885 -41.208  1.00 65.74           N
ATOM   4480  N   ARG C  55     -83.233 -10.834 -41.245  1.00 62.81           N
ATOM   4481  CA  ARG C  55     -83.523  -9.417 -41.440  1.00 67.47           C
ATOM   4482  C   ARG C  55     -82.254  -8.582 -41.307  1.00 63.79           C
ATOM   4483  O   ARG C  55     -81.530  -8.668 -40.310  1.00 66.25           O
ATOM   4484  CB  ARG C  55     -84.570  -8.944 -40.429  1.00 63.27           C
ATOM   4485  N   ASN C  56     -81.977  -7.783 -42.325  1.00 58.61           N
ATOM   4486  CA  ASN C  56     -80.844  -6.874 -42.326  1.00 64.88           C
ATOM   4487  C   ASN C  56     -81.393  -5.452 -42.282  1.00 66.29           C
ATOM   4488  O   ASN C  56     -82.009  -4.990 -43.248  1.00 63.91           O
ATOM   4489  CB  ASN C  56     -79.972  -7.106 -43.552  1.00 64.32           C
ATOM   4490  CG  ASN C  56     -78.835  -6.129 -43.638  1.00 66.49           C
ATOM   4491  OD1 ASN C  56     -79.050  -4.937 -43.857  1.00 65.20           O
ATOM   4492  ND2 ASN C  56     -77.612  -6.621 -43.474  1.00 65.99           N
ATOM   4493  N   ALA C  57     -81.174  -4.767 -41.160  1.00 69.76           N
ATOM   4494  CA  ALA C  57     -81.682  -3.423 -40.929  1.00 65.99           C
ATOM   4495  C   ALA C  57     -80.535  -2.425 -40.954  1.00 72.35           C
ATOM   4496  O   ALA C  57     -79.429  -2.716 -40.481  1.00 66.01           O
ATOM   4497  CB  ALA C  57     -82.415  -3.323 -39.590  1.00 63.21           C
ATOM   4498  N   ASP C  58     -80.808  -1.248 -41.506  1.00 73.22           N
ATOM   4499  CA  ASP C  58     -79.823  -0.180 -41.592  1.00 76.47           C
ATOM   4500  C   ASP C  58     -80.545   1.130 -41.873  1.00 78.30           C
ATOM   4501  O   ASP C  58     -81.071   1.329 -42.977  1.00 75.71           O
ATOM   4502  CB  ASP C  58     -78.786  -0.474 -42.678  1.00 74.22           C
ATOM   4503  CG  ASP C  58     -77.709   0.593 -42.767  1.00 79.12           C
ATOM   4504  OD1 ASP C  58     -77.662   1.496 -41.904  1.00 78.64           O
ATOM   4505  OD2 ASP C  58     -76.901   0.527 -43.713  1.00 81.00           O
ATOM   4506  N   PRO C  59     -80.596   2.039 -40.895  1.00 80.71           N
ATOM   4507  CA  PRO C  59     -81.258   3.331 -41.135  1.00 81.13           C
ATOM   4508  C   PRO C  59     -80.509   4.206 -42.124  1.00 81.60           C
ATOM   4509  O   PRO C  59     -81.130   5.058 -42.772  1.00 82.98           O
ATOM   4510  CB  PRO C  59     -81.298   3.962 -39.738  1.00 80.80           C
ATOM   4511  CG  PRO C  59     -80.102   3.374 -39.043  1.00 78.91           C
ATOM   4512  CD  PRO C  59     -79.993   1.959 -39.553  1.00 78.77           C
```

[2257]

```
ATOM   4513  N   ALA C  60     -79.194   4.012 -42.262  1.00 82.36           N
ATOM   4514  CA  ALA C  60     -78.399   4.742 -43.242  1.00 84.00           C
ATOM   4515  C   ALA C  60     -78.680   4.313 -44.678  1.00 84.20           C
ATOM   4516  O   ALA C  60     -78.186   4.964 -45.604  1.00 84.24           O
ATOM   4517  CB  ALA C  60     -76.909   4.569 -42.940  1.00 79.31           C
ATOM   4518  N   ARG C  61     -79.451   3.248 -44.887  1.00 80.34           N
ATOM   4519  CA  ARG C  61     -79.756   2.739 -46.216  1.00 79.03           C
ATOM   4520  C   ARG C  61     -81.223   2.957 -46.555  1.00 76.02           C
ATOM   4521  O   ARG C  61     -82.080   3.025 -45.670  1.00 77.21           O
ATOM   4522  CB  ARG C  61     -79.453   1.239 -46.327  1.00 79.19           C
ATOM   4523  CG  ARG C  61     -78.034   0.863 -46.719  1.00 78.89           C
ATOM   4524  CD  ARG C  61     -77.997  -0.530 -47.359  1.00 75.62           C
ATOM   4525  NE  ARG C  61     -78.142  -1.634 -46.407  1.00 71.40           N
ATOM   4526  CZ  ARG C  61     -79.303  -2.168 -46.026  1.00 70.63           C
ATOM   4527  NH1 ARG C  61     -80.458  -1.707 -46.495  1.00 65.75           N
ATOM   4528  NH2 ARG C  61     -79.311  -3.168 -45.162  1.00 65.98           N
ATOM   4529  N   TYR C  62     -81.506   3.042 -47.852  1.00 74.24           N
ATOM   4530  CA  TYR C  62     -82.870   2.930 -48.351  1.00 74.23           C
ATOM   4531  C   TYR C  62     -82.879   1.863 -49.438  1.00 77.18           C
ATOM   4532  O   TYR C  62     -82.133   1.991 -50.431  1.00 78.06           O
ATOM   4533  CB  TYR C  62     -83.410   4.251 -48.891  1.00 73.83           C
ATOM   4534  CG  TYR C  62     -84.858   4.138 -49.290  1.00 71.76           C
ATOM   4535  CD1 TYR C  62     -85.867   4.314 -48.357  1.00 71.75           C
ATOM   4536  CD2 TYR C  62     -85.217   3.829 -50.593  1.00 75.45           C
ATOM   4537  CE1 TYR C  62     -87.192   4.199 -48.713  1.00 73.07           C
ATOM   4538  CE2 TYR C  62     -86.538   3.712 -50.961  1.00 78.26           C
ATOM   4539  CZ  TYR C  62     -87.524   3.896 -50.016  1.00 80.49           C
ATOM   4540  OH  TYR C  62     -88.848   3.778 -50.382  1.00 87.96           O
ATOM   4541  N   PRO C  63     -83.696   0.800 -49.308  1.00 77.15           N
ATOM   4542  CA  PRO C  63     -84.563   0.590 -48.141  1.00 73.59           C
ATOM   4543  C   PRO C  63     -83.790   0.117 -46.916  1.00 71.63           C
ATOM   4544  O   PRO C  63     -82.740  -0.515 -47.035  1.00 73.04           O
ATOM   4545  CB  PRO C  63     -85.548  -0.480 -48.619  1.00 70.68           C
ATOM   4546  CG  PRO C  63     -84.798  -1.233 -49.652  1.00 72.93           C
ATOM   4547  CD  PRO C  63     -83.888  -0.245 -50.330  1.00 75.19           C
ATOM   4548  N   SER C  64     -84.324   0.451 -45.742  1.00 71.23           N
ATOM   4549  CA  SER C  64     -83.611   0.211 -44.493  1.00 72.10           C
ATOM   4550  C   SER C  64     -83.463  -1.278 -44.220  1.00 68.60           C
ATOM   4551  O   SER C  64     -82.379  -1.751 -43.857  1.00 68.38           O
ATOM   4552  CB  SER C  64     -84.352   0.898 -43.347  1.00 70.98           C
ATOM   4553  OG  SER C  64     -85.751   0.910 -43.606  1.00 66.31           O
ATOM   4554  N   VAL C  65     -84.547  -2.030 -44.389  1.00 65.89           N
ATOM   4555  CA  VAL C  65     -84.573  -3.462 -44.125  1.00 63.58           C
ATOM   4556  C   VAL C  65     -84.527  -4.206 -45.452  1.00 64.54           C
ATOM   4557  O   VAL C  65     -85.335  -3.948 -46.355  1.00 69.78           O
ATOM   4558  CB  VAL C  65     -85.817  -3.855 -43.310  1.00 59.29           C
ATOM   4559  N   ILE C  66     -83.577  -5.127 -45.570  1.00 64.55           N
ATOM   4560  CA  ILE C  66     -83.433  -5.994 -46.733  1.00 62.52           C
ATOM   4561  C   ILE C  66     -83.323  -7.425 -46.231  1.00 61.19           C
ATOM   4562  O   ILE C  66     -82.466  -7.726 -45.391  1.00 60.53           O
ATOM   4563  CB  ILE C  66     -82.196  -5.626 -47.574  1.00 63.36           C
ATOM   4564  CG1 ILE C  66     -82.392  -4.273 -48.249  1.00 62.59           C
ATOM   4565  CG2 ILE C  66     -81.913  -6.704 -48.603  1.00 60.25           C
ATOM   4566  CD1 ILE C  66     -81.226  -3.856 -49.077  1.00 63.50           C
ATOM   4567  N   TRP C  67     -84.175  -8.304 -46.749  1.00 58.13           N
ATOM   4568  CA  TRP C  67     -84.189  -9.700 -46.333  1.00 59.64           C
ATOM   4569  C   TRP C  67     -83.118 -10.481 -47.080  1.00 52.98           C
ATOM   4570  O   TRP C  67     -83.093 -10.484 -48.315  1.00 52.15           O
ATOM   4571  CB  TRP C  67     -85.564 -10.309 -46.576  1.00 56.68           C
ATOM   4572  CG  TRP C  67     -86.608  -9.707 -45.714  1.00 65.46           C
ATOM   4573  CD1 TRP C  67     -87.457  -8.687 -46.035  1.00 66.02           C
ATOM   4574  CD2 TRP C  67     -86.911 -10.074 -44.365  1.00 69.95           C
ATOM   4575  NE1 TRP C  67     -88.283  -8.407 -44.970  1.00 70.81           N
ATOM   4576  CE2 TRP C  67     -87.968  -9.243 -43.932  1.00 70.80           C
ATOM   4577  CE3 TRP C  67     -86.395 -11.029 -43.482  1.00 65.59           C
ATOM   4578  CZ2 TRP C  67     -88.519  -9.338 -42.655  1.00 72.68           C
ATOM   4579  CZ3 TRP C  67     -86.945 -11.126 -42.215  1.00 70.47           C
ATOM   4580  CH2 TRP C  67     -87.997 -10.284 -41.813  1.00 76.27           C
```

[2258]

```
ATOM   4581  N   GLU C  68     -82.245 -11.150 -46.328  1.00 51.52           N
ATOM   4582  CA  GLU C  68     -81.079 -11.836 -46.869  1.00 48.46           C
ATOM   4583  C   GLU C  68     -81.159 -13.341 -46.613  1.00 48.84           C
ATOM   4584  O   GLU C  68     -81.360 -13.778 -45.475  1.00 47.16           O
ATOM   4585  CB  GLU C  68     -79.801 -11.255 -46.263  1.00 50.68           C
ATOM   4586  CG  GLU C  68     -79.549  -9.806 -46.664  1.00 58.62           C
ATOM   4587  CD  GLU C  68     -78.182  -9.301 -46.228  1.00 64.83           C
ATOM   4588  OE1 GLU C  68     -77.913  -9.277 -45.006  1.00 67.48           O
ATOM   4589  OE2 GLU C  68     -77.373  -8.938 -47.110  1.00 63.51           O
ATOM   4590  N   ALA C  69     -80.959 -14.133 -47.665  1.00 42.34           N
ATOM   4591  CA  ALA C  69     -81.078 -15.583 -47.575  1.00 42.47           C
ATOM   4592  C   ALA C  69     -79.799 -16.233 -47.053  1.00 42.64           C
ATOM   4593  O   ALA C  69     -78.691 -15.865 -47.449  1.00 40.04           O
ATOM   4594  CB  ALA C  69     -81.418 -16.166 -48.946  1.00 42.91           C
ATOM   4595  N   LYS C  70     -79.960 -17.225 -46.183  1.00 39.77           N
ATOM   4596  CA  LYS C  70     -78.848 -18.068 -45.757  1.00 40.54           C
ATOM   4597  C   LYS C  70     -79.279 -19.518 -45.905  1.00 38.06           C
ATOM   4598  O   LYS C  70     -80.291 -19.924 -45.318  1.00 35.22           O
ATOM   4599  CB  LYS C  70     -78.431 -17.767 -44.313  1.00 39.34           C
ATOM   4600  N   CYS C  71     -78.527 -20.292 -46.696  1.00 36.56           N
ATOM   4601  CA  CYS C  71     -78.913 -21.681 -46.948  1.00 38.09           C
ATOM   4602  C   CYS C  71     -78.882 -22.469 -45.647  1.00 39.47           C
ATOM   4603  O   CYS C  71     -77.974 -22.308 -44.823  1.00 37.89           O
ATOM   4604  CB  CYS C  71     -77.993 -22.349 -47.985  1.00 32.50           C
ATOM   4605  SG  CYS C  71     -77.705 -21.436 -49.543  1.00 45.95           S
ATOM   4606  N   ARG C  72     -79.901 -23.309 -45.459  1.00 36.76           N
ATOM   4607  CA  ARG C  72     -80.021 -24.100 -44.239  1.00 34.35           C
ATOM   4608  C   ARG C  72     -79.006 -25.231 -44.182  1.00 37.12           C
ATOM   4609  O   ARG C  72     -78.611 -25.644 -43.089  1.00 41.16           O
ATOM   4610  CB  ARG C  72     -81.433 -24.682 -44.116  1.00 40.30           C
ATOM   4611  CG  ARG C  72     -82.434 -23.792 -43.432  1.00 39.87           C
ATOM   4612  CD  ARG C  72     -83.827 -24.358 -43.538  1.00 39.98           C
ATOM   4613  NE  ARG C  72     -84.813 -23.284 -43.551  1.00 45.36           N
ATOM   4614  CZ  ARG C  72     -86.112 -23.455 -43.767  1.00 44.59           C
ATOM   4615  NH1 ARG C  72     -86.603 -24.674 -43.995  1.00 44.82           N
ATOM   4616  NH2 ARG C  72     -86.916 -22.405 -43.761  1.00 44.58           N
ATOM   4617  N   HIS C  73     -78.567 -25.739 -45.331  1.00 36.34           N
ATOM   4618  CA  HIS C  73     -77.781 -26.962 -45.375  1.00 35.22           C
ATOM   4619  C   HIS C  73     -76.591 -26.802 -46.313  1.00 36.72           C
ATOM   4620  O   HIS C  73     -76.508 -25.856 -47.106  1.00 32.35           O
ATOM   4621  CB  HIS C  73     -78.645 -28.147 -45.817  1.00 31.94           C
ATOM   4622  CG  HIS C  73     -79.796 -28.417 -44.906  1.00 37.31           C
ATOM   4623  ND1 HIS C  73     -81.107 -28.183 -45.269  1.00 38.71           N
ATOM   4624  CD2 HIS C  73     -79.836 -28.882 -43.635  1.00 39.26           C
ATOM   4625  CE1 HIS C  73     -81.903 -28.507 -44.267  1.00 37.17           C
ATOM   4626  NE2 HIS C  73     -81.159 -28.935 -43.265  1.00 41.37           N
ATOM   4627  N   LEU C  74     -75.646 -27.736 -46.198  1.00 32.32           N
ATOM   4628  CA  LEU C  74     -74.644 -27.844 -47.249  1.00 32.19           C
ATOM   4629  C   LEU C  74     -75.160 -28.697 -48.397  1.00 29.55           C
ATOM   4630  O   LEU C  74     -74.975 -28.347 -49.567  1.00 33.85           O
ATOM   4631  CB  LEU C  74     -73.341 -28.428 -46.707  1.00 26.51           C
ATOM   4632  CG  LEU C  74     -72.273 -28.706 -47.764  1.00 27.68           C
ATOM   4633  CD1 LEU C  74     -71.863 -27.433 -48.517  1.00 28.91           C
ATOM   4634  CD2 LEU C  74     -71.022 -29.354 -47.133  1.00 31.18           C
ATOM   4635  N   GLY C  75     -75.794 -29.818 -48.086  1.00 27.99           N
ATOM   4636  CA  GLY C  75     -76.342 -30.683 -49.103  1.00 32.27           C
ATOM   4637  C   GLY C  75     -77.684 -30.164 -49.579  1.00 32.40           C
ATOM   4638  O   GLY C  75     -78.119 -29.063 -49.232  1.00 30.03           O
ATOM   4639  N   CYS C  76     -78.362 -30.999 -50.375  1.00 32.97           N
ATOM   4640  CA  CYS C  76     -79.708 -30.719 -50.855  1.00 30.51           C
ATOM   4641  C   CYS C  76     -80.649 -31.853 -50.465  1.00 35.42           C
ATOM   4642  O   CYS C  76     -80.231 -32.999 -50.271  1.00 32.95           O
ATOM   4643  CB  CYS C  76     -79.741 -30.530 -52.377  1.00 31.40           C
ATOM   4644  SG  CYS C  76     -78.643 -29.237 -53.114  1.00 35.09           S
ATOM   4645  N   ILE C  77     -81.938 -31.527 -50.363  1.00 34.86           N
ATOM   4646  CA  ILE C  77     -82.938 -32.529 -50.031  1.00 32.27           C
ATOM   4647  C   ILE C  77     -83.146 -33.437 -51.231  1.00 32.96           C
ATOM   4648  O   ILE C  77     -83.297 -32.964 -52.364  1.00 34.55           O
```

[2259]

```
ATOM   4649  CB  ILE C  77     -84.254 -31.864 -49.616  1.00 34.70           C
ATOM   4650  CG1 ILE C  77     -84.018 -30.882 -48.459  1.00 35.60           C
ATOM   4651  CG2 ILE C  77     -85.277 -32.934 -49.277  1.00 39.58           C
ATOM   4652  CD1 ILE C  77     -83.622 -31.529 -47.153  1.00 35.93           C
ATOM   4653  N   ASN C  78     -83.158 -34.745 -50.992  1.00 32.87           N
ATOM   4654  CA  ASN C  78     -83.352 -35.705 -52.063  1.00 36.38           C
ATOM   4655  C   ASN C  78     -84.796 -36.209 -52.070  1.00 39.23           C
ATOM   4656  O   ASN C  78     -85.626 -35.806 -51.248  1.00 33.70           O
ATOM   4657  CB  ASN C  78     -82.357 -36.865 -51.944  1.00 35.17           C
ATOM   4658  CG  ASN C  78     -82.537 -37.689 -50.681  1.00 34.15           C
ATOM   4659  OD1 ASN C  78     -83.570 -37.635 -50.034  1.00 30.31           O
ATOM   4660  ND2 ASN C  78     -81.495 -38.462 -50.317  1.00 33.57           N
ATOM   4661  N   ALA C  79     -85.062 -37.159 -52.979  1.00 38.89           N
ATOM   4662  CA  ALA C  79     -86.410 -37.669 -53.200  1.00 40.67           C
ATOM   4663  C   ALA C  79     -86.993 -38.332 -51.966  1.00 44.20           C
ATOM   4664  O   ALA C  79     -88.216 -38.495 -51.887  1.00 39.12           O
ATOM   4665  CB  ALA C  79     -86.421 -38.667 -54.364  1.00 37.19           C
ATOM   4666  N   ASP C  80     -86.161 -38.730 -51.009  1.00 39.00           N
ATOM   4667  CA  ASP C  80     -86.677 -39.288 -49.766  1.00 40.15           C
ATOM   4668  C   ASP C  80     -86.903 -38.234 -48.695  1.00 40.40           C
ATOM   4669  O   ASP C  80     -87.313 -38.579 -47.582  1.00 41.88           O
ATOM   4670  CB  ASP C  80     -85.726 -40.366 -49.230  1.00 42.45           C
ATOM   4671  CG  ASP C  80     -85.630 -41.577 -50.153  1.00 48.01           C
ATOM   4672  OD1 ASP C  80     -86.580 -41.852 -50.919  1.00 50.18           O
ATOM   4673  OD2 ASP C  80     -84.592 -42.263 -50.106  1.00 58.75           O
ATOM   4674  N   GLY C  81     -86.639 -36.963 -48.994  1.00 37.02           N
ATOM   4675  CA  GLY C  81     -86.738 -35.933 -47.978  1.00 35.97           C
ATOM   4676  C   GLY C  81     -85.523 -35.776 -47.085  1.00 37.88           C
ATOM   4677  O   GLY C  81     -85.619 -35.090 -46.063  1.00 37.79           O
ATOM   4678  N   ASN C  82     -84.388 -36.392 -47.427  1.00 32.75           N
ATOM   4679  CA  ASN C  82     -83.189 -36.365 -46.595  1.00 37.83           C
ATOM   4680  C   ASN C  82     -82.137 -35.423 -47.159  1.00 33.10           C
ATOM   4681  O   ASN C  82     -81.954 -35.348 -48.377  1.00 33.26           O
ATOM   4682  CB  ASN C  82     -82.560 -37.754 -46.491  1.00 36.80           C
ATOM   4683  CG  ASN C  82     -83.425 -38.720 -45.763  1.00 35.64           C
ATOM   4684  OD1 ASN C  82     -84.099 -38.363 -44.800  1.00 37.59           O
ATOM   4685  ND2 ASN C  82     -83.412 -39.964 -46.211  1.00 37.44           N
ATOM   4686  N   VAL C  83     -81.412 -34.751 -46.261  1.00 34.49           N
ATOM   4687  CA  VAL C  83     -80.230 -33.996 -46.660  1.00 34.64           C
ATOM   4688  C   VAL C  83     -79.244 -34.944 -47.321  1.00 35.93           C
ATOM   4689  O   VAL C  83     -78.958 -36.032 -46.810  1.00 34.46           O
ATOM   4690  CB  VAL C  83     -79.604 -33.288 -45.452  1.00 36.91           C
ATOM   4691  CG1 VAL C  83     -78.331 -32.553 -45.862  1.00 35.49           C
ATOM   4692  CG2 VAL C  83     -80.600 -32.329 -44.816  1.00 34.24           C
ATOM   4693  N   ASP C  84     -78.726 -34.535 -48.473  1.00 33.50           N
ATOM   4694  CA  ASP C  84     -77.985 -35.420 -49.356  1.00 30.55           C
ATOM   4695  C   ASP C  84     -76.761 -34.666 -49.850  1.00 33.32           C
ATOM   4696  O   ASP C  84     -76.898 -33.583 -50.429  1.00 31.46           O
ATOM   4697  CB  ASP C  84     -78.890 -35.847 -50.511  1.00 32.95           C
ATOM   4698  CG  ASP C  84     -78.297 -36.915 -51.352  1.00 32.98           C
ATOM   4699  OD1 ASP C  84     -77.084 -36.840 -51.662  1.00 37.66           O
ATOM   4700  OD2 ASP C  84     -79.054 -37.842 -51.710  1.00 37.25           O
ATOM   4701  N   TYR C  85     -75.566 -35.225 -49.633  1.00 30.92           N
ATOM   4702  CA  TYR C  85     -74.337 -34.501 -49.953  1.00 32.23           C
ATOM   4703  C   TYR C  85     -73.741 -34.903 -51.305  1.00 33.03           C
ATOM   4704  O   TYR C  85     -72.568 -34.597 -51.580  1.00 26.82           O
ATOM   4705  CB  TYR C  85     -73.308 -34.665 -48.828  1.00 34.26           C
ATOM   4706  CG  TYR C  85     -73.789 -34.104 -47.505  1.00 30.30           C
ATOM   4707  CD1 TYR C  85     -73.485 -32.788 -47.130  1.00 30.56           C
ATOM   4708  CD2 TYR C  85     -74.571 -34.875 -46.646  1.00 30.54           C
ATOM   4709  CE1 TYR C  85     -73.946 -32.260 -45.924  1.00 32.54           C
ATOM   4710  CE2 TYR C  85     -75.045 -34.359 -45.437  1.00 30.85           C
ATOM   4711  CZ  TYR C  85     -74.723 -33.049 -45.080  1.00 35.94           C
ATOM   4712  OH  TYR C  85     -75.171 -32.533 -43.877  1.00 36.45           O
ATOM   4713  N   HIS C  86     -74.536 -35.546 -52.168  1.00 28.18           N
ATOM   4714  CA  HIS C  86     -74.204 -35.618 -53.589  1.00 30.21           C
ATOM   4715  C   HIS C  86     -74.448 -34.293 -54.312  1.00 29.97           C
ATOM   4716  O   HIS C  86     -74.168 -34.174 -55.509  1.00 30.13           O
```

[2260]

```
ATOM   4717  CB  HIS C  86     -75.001 -36.744 -54.242  1.00 27.42           C
ATOM   4718  CG  HIS C  86     -74.660 -38.102 -53.709  1.00 29.38           C
ATOM   4719  ND1 HIS C  86     -75.448 -38.764 -52.796  1.00 32.49           N
ATOM   4720  CD2 HIS C  86     -73.601 -38.914 -53.947  1.00 30.73           C
ATOM   4721  CE1 HIS C  86     -74.898 -39.932 -52.504  1.00 31.26           C
ATOM   4722  NE2 HIS C  86     -73.778 -40.046 -53.190  1.00 30.88           N
ATOM   4723  N  AMET C  87     -74.962 -33.296 -53.606  0.59 30.45           N
ATOM   4724  CA AMET C  87     -75.228 -31.979 -54.164  0.59 31.53           C
ATOM   4725  C  AMET C  87     -74.978 -30.967 -53.065  0.59 30.48           C
ATOM   4726  O  AMET C  87     -74.812 -31.329 -51.897  0.59 30.30           O
ATOM   4727  CB AMET C  87     -76.666 -31.842 -54.674  0.59 29.58           C
ATOM   4728  CG AMET C  87     -77.052 -32.812 -55.775  0.59 31.75           C
ATOM   4729  SD AMET C  87     -77.662 -34.364 -55.097  0.59 34.96           S
ATOM   4730  CE AMET C  87     -79.101 -33.800 -54.188  0.59 32.81           C
ATOM   4731  N  BMET C  87     -74.958 -33.293 -53.602  0.41 30.10           N
ATOM   4732  CA BMET C  87     -75.266 -31.985 -54.162  0.41 31.71           C
ATOM   4733  C  BMET C  87     -75.069 -30.962 -53.056  0.41 30.50           C
ATOM   4734  O  BMET C  87     -75.005 -31.314 -51.876  0.41 30.28           O
ATOM   4735  CB BMET C  87     -76.700 -31.919 -54.707  0.41 29.46           C
ATOM   4736  CG BMET C  87     -76.962 -32.784 -55.947  0.41 31.71           C
ATOM   4737  SD BMET C  87     -78.685 -32.765 -56.496  0.41 36.26           S
ATOM   4738  CE BMET C  87     -78.639 -34.007 -57.795  0.41 35.70           C
ATOM   4739  N   ASN C  88     -74.970 -29.690 -53.443  1.00 27.26           N
ATOM   4740  CA  ASN C  88     -74.754 -28.611 -52.492  1.00 28.40           C
ATOM   4741  C   ASN C  88     -75.783 -27.509 -52.688  1.00 28.93           C
ATOM   4742  O   ASN C  88     -75.991 -27.046 -53.812  1.00 30.30           O
ATOM   4743  CB  ASN C  88     -73.357 -27.979 -52.632  1.00 26.98           C
ATOM   4744  CG  ASN C  88     -72.229 -28.797 -51.991  1.00 33.06           C
ATOM   4745  OD1 ASN C  88     -71.092 -28.319 -51.935  1.00 34.49           O
ATOM   4746  ND2 ASN C  88     -72.517 -30.016 -51.536  1.00 27.56           N
ATOM   4747  N   SER C  89     -76.366 -27.042 -51.588  1.00 29.65           N
ATOM   4748  CA  SER C  89     -77.062 -25.760 -51.601  1.00 29.25           C
ATOM   4749  C   SER C  89     -76.056 -24.629 -51.743  1.00 29.05           C
ATOM   4750  O   SER C  89     -75.062 -24.584 -51.016  1.00 34.30           O
ATOM   4751  CB  SER C  89     -77.857 -25.572 -50.319  1.00 26.30           C
ATOM   4752  OG  SER C  89     -78.799 -26.615 -50.152  1.00 34.44           O
ATOM   4753  N   VAL C  90     -76.297 -23.718 -52.675  1.00 32.53           N
ATOM   4754  CA  VAL C  90     -75.463 -22.523 -52.773  1.00 34.25           C
ATOM   4755  C   VAL C  90     -76.359 -21.293 -52.834  1.00 35.42           C
ATOM   4756  O   VAL C  90     -77.497 -21.373 -53.319  1.00 32.79           O
ATOM   4757  CB  VAL C  90     -74.520 -22.580 -53.988  1.00 35.97           C
ATOM   4758  CG1 VAL C  90     -73.552 -23.741 -53.859  1.00 30.67           C
ATOM   4759  CG2 VAL C  90     -75.306 -22.668 -55.282  1.00 30.77           C
ATOM   4760  N   PRO C  91     -75.913 -20.142 -52.338  1.00 37.42           N
ATOM   4761  CA  PRO C  91     -76.755 -18.940 -52.416  1.00 35.47           C
ATOM   4762  C   PRO C  91     -76.609 -18.225 -53.745  1.00 37.41           C
ATOM   4763  O   PRO C  91     -75.511 -18.094 -54.286  1.00 44.64           O
ATOM   4764  CB  PRO C  91     -76.232 -18.068 -51.269  1.00 38.21           C
ATOM   4765  CG  PRO C  91     -74.803 -18.474 -51.144  1.00 38.40           C
ATOM   4766  CD  PRO C  91     -74.777 -19.959 -51.419  1.00 35.50           C
ATOM   4767  N   ILE C  92     -77.734 -17.763 -54.273  1.00 37.28           N
ATOM   4768  CA  ILE C  92     -77.736 -16.891 -55.441  1.00 43.12           C
ATOM   4769  C   ILE C  92     -77.534 -15.460 -54.950  1.00 47.75           C
ATOM   4770  O   ILE C  92     -78.395 -14.902 -54.261  1.00 44.68           O
ATOM   4771  CB  ILE C  92     -79.038 -17.027 -56.238  1.00 47.50           C
ATOM   4772  CG1 ILE C  92     -79.260 -18.483 -56.663  1.00 42.24           C
ATOM   4773  CG2 ILE C  92     -79.040 -16.071 -57.437  1.00 45.62           C
ATOM   4774  CD1 ILE C  92     -80.716 -18.774 -57.023  1.00 42.05           C
ATOM   4775  N   GLN C  93     -76.390 -14.870 -55.295  1.00 49.50           N
ATOM   4776  CA  GLN C  93     -76.031 -13.513 -54.900  1.00 49.27           C
ATOM   4777  C   GLN C  93     -76.312 -12.569 -56.061  1.00 53.71           C
ATOM   4778  O   GLN C  93     -75.919 -12.847 -57.198  1.00 56.89           O
ATOM   4779  CB  GLN C  93     -74.554 -13.433 -54.491  1.00 47.16           C
ATOM   4780  CG  GLN C  93     -74.160 -14.411 -53.366  1.00 51.17           C
ATOM   4781  CD  GLN C  93     -72.687 -14.306 -52.930  1.00 60.35           C
ATOM   4782  OE1 GLN C  93     -71.769 -14.414 -53.746  1.00 60.57           O
ATOM   4783  NE2 GLN C  93     -72.466 -14.106 -51.634  1.00 59.56           N
ATOM   4784  N   GLN C  94     -76.996 -11.459 -55.774  1.00 57.74           N
```

[2261]

```
ATOM   4785  CA  GLN C  94     -77.288 -10.420 -56.759  1.00 58.43           C
ATOM   4786  C   GLN C  94     -76.846  -9.065 -56.222  1.00 56.75           C
ATOM   4787  O   GLN C  94     -77.114  -8.735 -55.061  1.00 56.29           O
ATOM   4788  CB  GLN C  94     -78.785 -10.375 -57.104  1.00 50.57           C
ATOM   4789  N   GLU C  95     -76.172  -8.285 -57.064  1.00 54.80           N
ATOM   4790  CA  GLU C  95     -75.942  -6.879 -56.760  1.00 61.39           C
ATOM   4791  C   GLU C  95     -77.220  -6.092 -57.024  1.00 62.86           C
ATOM   4792  O   GLU C  95     -77.829  -6.226 -58.091  1.00 64.51           O
ATOM   4793  CB  GLU C  95     -74.792  -6.324 -57.598  1.00 60.54           C
ATOM   4794  N   ILE C  96     -77.649  -5.296 -56.043  1.00 62.02           N
ATOM   4795  CA  ILE C  96     -78.833  -4.460 -56.202  1.00 66.98           C
ATOM   4796  C   ILE C  96     -78.500  -3.041 -55.772  1.00 67.72           C
ATOM   4797  O   ILE C  96     -77.506  -2.792 -55.087  1.00 66.90           O
ATOM   4798  CB  ILE C  96     -80.058  -4.974 -55.413  1.00 68.74           C
ATOM   4799  CG1 ILE C  96     -79.698  -5.245 -53.951  1.00 67.60           C
ATOM   4800  CG2 ILE C  96     -80.641  -6.204 -56.070  1.00 68.56           C
ATOM   4801  CD1 ILE C  96     -80.911  -5.511 -53.093  1.00 63.45           C
ATOM   4802  N   LEU C  97     -79.360  -2.105 -56.181  1.00 72.82           N
ATOM   4803  CA  LEU C  97     -79.149  -0.682 -55.933  1.00 74.20           C
ATOM   4804  C   LEU C  97     -79.807  -0.275 -54.625  1.00 73.19           C
ATOM   4805  O   LEU C  97     -81.028  -0.381 -54.481  1.00 72.98           O
ATOM   4806  CB  LEU C  97     -79.710   0.172 -57.068  1.00 72.90           C
ATOM   4807  CG  LEU C  97     -78.945   0.209 -58.385  1.00 75.34           C
ATOM   4808  CD1 LEU C  97     -79.621   1.158 -59.364  1.00 75.49           C
ATOM   4809  CD2 LEU C  97     -77.505   0.611 -58.138  1.00 70.57           C
ATOM   4810  N   VAL C  98     -79.003   0.217 -53.691  1.00 75.21           N
ATOM   4811  CA  VAL C  98     -79.502   0.806 -52.461  1.00 79.25           C
ATOM   4812  C   VAL C  98     -79.317   2.321 -52.546  1.00 84.23           C
ATOM   4813  O   VAL C  98     -78.681   2.843 -53.461  1.00 83.01           O
ATOM   4814  CB  VAL C  98     -78.798   0.223 -51.217  1.00 76.87           C
ATOM   4815  N   ALA C  99     -79.888   3.032 -51.574  1.00 85.79           N
ATOM   4816  CA  ALA C  99     -79.672   4.469 -51.413  1.00 87.00           C
ATOM   4817  C   ALA C  99     -79.078   4.703 -50.025  1.00 87.32           C
ATOM   4818  O   ALA C  99     -79.808   4.706 -49.029  1.00 88.40           O
ATOM   4819  CB  ALA C  99     -80.970   5.249 -51.610  1.00 78.96           C
ATOM   4820  N   ALA C 100     -77.758   4.876 -49.956  1.00 87.19           N
ATOM   4821  CA  ALA C 100     -77.058   5.209 -48.721  1.00 92.98           C
ATOM   4822  C   ALA C 100     -76.818   6.715 -48.639  1.00101.30           C
ATOM   4823  O   ALA C 100     -76.798   7.421 -49.649  1.00102.36           O
ATOM   4824  CB  ALA C 100     -75.724   4.462 -48.619  1.00 86.97           C
ATOM   4825  N   ARG C 101     -76.623   7.202 -47.416  1.00102.29           N
ATOM   4826  CA  ARG C 101     -76.532   8.639 -47.186  1.00104.31           C
ATOM   4827  C   ARG C 101     -75.164   9.176 -47.594  1.00106.84           C
ATOM   4828  O   ARG C 101     -74.128   8.586 -47.267  1.00105.87           O
ATOM   4829  CB  ARG C 101     -76.820   8.956 -45.719  1.00101.90           C
ATOM   4830  CG  ARG C 101     -78.230   8.588 -45.314  1.00 96.57           C
ATOM   4831  CD  ARG C 101     -78.502   8.858 -43.851  1.00 97.10           C
ATOM   4832  NE  ARG C 101     -79.672   8.115 -43.396  1.00 90.78           N
ATOM   4833  CZ  ARG C 101     -80.928   8.458 -43.664  1.00 94.38           C
ATOM   4834  NH1 ARG C 101     -81.189   9.541 -44.386  1.00 96.66           N
ATOM   4835  NH2 ARG C 101     -81.928   7.714 -43.209  1.00 98.36           N
ATOM   4836  N   GLU C 102     -75.166  10.303 -48.321  1.00106.26           N
ATOM   4837  CA  GLU C 102     -73.898  10.916 -48.714  1.00106.41           C
ATOM   4838  C   GLU C 102     -73.194  11.564 -47.528  1.00108.17           C
ATOM   4839  O   GLU C 102     -71.974  11.365 -47.380  1.00110.86           O
ATOM   4840  CB  GLU C 102     -74.126  11.900 -49.867  1.00105.55           C
ATOM   4841  N   PRO C 103     -73.858  12.338 -46.667  1.00108.59           N
ATOM   4842  CA  PRO C 103     -73.256  12.676 -45.371  1.00109.32           C
ATOM   4843  C   PRO C 103     -73.771  11.748 -44.283  1.00109.78           C
ATOM   4844  O   PRO C 103     -74.991  11.624 -44.092  1.00109.45           O
ATOM   4845  CB  PRO C 103     -73.708  14.130 -45.137  1.00102.43           C
ATOM   4846  CG  PRO C 103     -74.728  14.442 -46.251  1.00 95.98           C
ATOM   4847  CD  PRO C 103     -75.074  13.138 -46.899  1.00106.60           C
ATOM   4848  N   PRO C 104     -72.877  11.077 -43.553  1.00108.67           N
ATOM   4849  CA  PRO C 104     -73.316  10.050 -42.593  1.00108.50           C
ATOM   4850  C   PRO C 104     -74.287  10.600 -41.556  1.00109.76           C
ATOM   4851  O   PRO C 104     -74.026  11.617 -40.909  1.00111.46           O
ATOM   4852  CB  PRO C 104     -72.005   9.588 -41.948  1.00109.19           C
```

[2262]

```
ATOM   4853  CG  PRO C 104     -70.958   9.890 -42.973  1.00109.06           C
ATOM   4854  CD  PRO C 104     -71.409  11.155 -43.648  1.00106.88           C
ATOM   4855  N   HIS C 105     -75.419   9.906 -41.408  1.00110.53           N
ATOM   4856  CA  HIS C 105     -76.490  10.273 -40.476  1.00112.06           C
ATOM   4857  C   HIS C 105     -77.088  11.643 -40.799  1.00110.99           C
ATOM   4858  O   HIS C 105     -77.595  12.333 -39.911  1.00110.90           O
ATOM   4859  CB  HIS C 105     -76.011  10.223 -39.019  1.00108.76           C
ATOM   4860  N   SER C 106     -77.050  12.041 -42.067  1.00106.92           N
ATOM   4861  CA  SER C 106     -77.648  13.303 -42.511  1.00106.26           C
ATOM   4862  C   SER C 106     -78.705  13.025 -43.570  1.00105.92           C
ATOM   4863  O   SER C 106     -78.353  12.640 -44.702  1.00103.86           O
ATOM   4864  CB  SER C 106     -76.582  14.251 -43.058  1.00107.47           C
ATOM   4865  N   PRO C 107     -80.003  13.236 -43.270  1.00107.42           N
ATOM   4866  CA  PRO C 107     -81.068  12.823 -44.198  1.00103.09           C
ATOM   4867  C   PRO C 107     -81.178  13.702 -45.435  1.00105.65           C
ATOM   4868  O   PRO C 107     -82.106  13.539 -46.237  1.00101.06           O
ATOM   4869  CB  PRO C 107     -82.330  12.928 -43.337  1.00103.94           C
ATOM   4870  CG  PRO C 107     -82.016  14.035 -42.388  1.00101.20           C
ATOM   4871  CD  PRO C 107     -80.547  13.899 -42.071  1.00106.16           C
ATOM   4872  N   ASN C 108     -80.248  14.645 -45.587  1.00105.02           N
ATOM   4873  CA  ASN C 108     -80.184  15.468 -46.787  1.00101.02           C
ATOM   4874  C   ASN C 108     -79.785  14.603 -47.978  1.00100.93           C
ATOM   4875  O   ASN C 108     -78.594  14.456 -48.272  1.00 96.23           O
ATOM   4876  CB  ASN C 108     -79.205  16.631 -46.595  1.00 81.25           C
ATOM   4877  N   SER C 109     -80.782  14.004 -48.638  1.00102.81           N
ATOM   4878  CA  SER C 109     -80.600  13.193 -49.841  1.00104.58           C
ATOM   4879  C   SER C 109     -79.820  11.909 -49.566  1.00104.13           C
ATOM   4880  O   SER C 109     -79.730  11.464 -48.416  1.00102.07           O
ATOM   4881  CB  SER C 109     -79.918  14.019 -50.935  1.00102.82           C
ATOM   4882  N   PHE C 110     -79.267  11.299 -50.615  1.00105.24           N
ATOM   4883  CA  PHE C 110     -78.539  10.043 -50.477  1.00105.51           C
ATOM   4884  C   PHE C 110     -77.678   9.813 -51.715  1.00104.95           C
ATOM   4885  O   PHE C 110     -77.908  10.406 -52.773  1.00105.64           O
ATOM   4886  CB  PHE C 110     -79.498   8.864 -50.261  1.00 98.39           C
ATOM   4887  N   ARG C 111     -76.679   8.941 -51.564  1.00102.00           N
ATOM   4888  CA  ARG C 111     -75.816   8.497 -52.652  1.00 98.22           C
ATOM   4889  C   ARG C 111     -76.160   7.062 -53.042  1.00 97.20           C
ATOM   4890  O   ARG C 111     -76.564   6.251 -52.202  1.00 94.25           O
ATOM   4891  CB  ARG C 111     -74.338   8.587 -52.256  1.00 97.42           C
ATOM   4892  N   LEU C 112     -75.992   6.743 -54.323  1.00 95.78           N
ATOM   4893  CA  LEU C 112     -76.403   5.445 -54.845  1.00 87.73           C
ATOM   4894  C   LEU C 112     -75.250   4.450 -54.795  1.00 84.70           C
ATOM   4895  O   LEU C 112     -74.146   4.746 -55.262  1.00 80.07           O
ATOM   4896  CB  LEU C 112     -76.915   5.578 -56.276  1.00 83.13           C
ATOM   4897  CG  LEU C 112     -78.193   4.777 -56.489  1.00 82.79           C
ATOM   4898  CD1 LEU C 112     -79.268   5.263 -55.530  1.00 86.60           C
ATOM   4899  CD2 LEU C 112     -78.661   4.877 -57.930  1.00 83.03           C
ATOM   4900  N   GLU C 113     -75.516   3.269 -54.236  1.00 80.29           N
ATOM   4901  CA  GLU C 113     -74.519   2.216 -54.118  1.00 77.96           C
ATOM   4902  C   GLU C 113     -75.102   0.890 -54.591  1.00 76.53           C
ATOM   4903  O   GLU C 113     -76.318   0.681 -54.574  1.00 74.29           O
ATOM   4904  CB  GLU C 113     -74.009   2.076 -52.671  1.00 75.63           C
ATOM   4905  N   LYS C 114     -74.219  -0.004 -55.026  1.00 76.78           N
ATOM   4906  CA  LYS C 114     -74.585  -1.366 -55.391  1.00 70.55           C
ATOM   4907  C   LYS C 114     -74.105  -2.301 -54.293  1.00 69.84           C
ATOM   4908  O   LYS C 114     -72.940  -2.235 -53.885  1.00 71.32           O
ATOM   4909  CB  LYS C 114     -73.980  -1.762 -56.740  1.00 65.15           C
ATOM   4910  N   ILE C 115     -74.999  -3.156 -53.800  1.00 65.71           N
ATOM   4911  CA  ILE C 115     -74.664  -4.050 -52.699  1.00 64.52           C
ATOM   4912  C   ILE C 115     -74.974  -5.487 -53.093  1.00 60.12           C
ATOM   4913  O   ILE C 115     -75.942  -5.760 -53.812  1.00 61.25           O
ATOM   4914  CB  ILE C 115     -75.404  -3.671 -51.399  1.00 62.34           C
ATOM   4915  CG1 ILE C 115     -76.918  -3.722 -51.598  1.00 58.91           C
ATOM   4916  CG2 ILE C 115     -74.963  -2.293 -50.912  1.00 65.31           C
ATOM   4917  CD1 ILE C 115     -77.681  -3.803 -50.291  1.00 59.90           C
ATOM   4918  N   LEU C 116     -74.134  -6.405 -52.611  1.00 55.95           N
ATOM   4919  CA  LEU C 116     -74.241  -7.829 -52.905  1.00 54.78           C
[2263] ATOM   4920  C   LEU C 116     -75.102  -8.506 -51.839  1.00 51.54           C
```

```
ATOM   4921  O   LEU C 116     -74.736  -8.517 -50.659  1.00 50.60           O
ATOM   4922  CB  LEU C 116     -72.844  -8.458 -52.943  1.00 56.24           C
ATOM   4923  CG  LEU C 116     -72.606  -9.800 -53.644  1.00 48.53           C
ATOM   4924  CD1 LEU C 116     -72.653  -9.628 -55.154  1.00 51.05           C
ATOM   4925  CD2 LEU C 116     -71.288 -10.413 -53.221  1.00 55.61           C
ATOM   4926  N   VAL C 117     -76.237  -9.073 -52.245  1.00 49.15           N
ATOM   4927  CA  VAL C 117     -77.143  -9.724 -51.307  1.00 52.74           C
ATOM   4928  C   VAL C 117     -77.531 -11.102 -51.826  1.00 52.81           C
ATOM   4929  O   VAL C 117     -77.562 -11.350 -53.036  1.00 48.77           O
ATOM   4930  CB  VAL C 117     -78.417  -8.884 -51.035  1.00 54.81           C
ATOM   4931  CG1 VAL C 117     -78.053  -7.504 -50.478  1.00 56.08           C
ATOM   4932  CG2 VAL C 117     -79.256  -8.751 -52.295  1.00 55.75           C
ATOM   4933  N   SER C 118     -77.847 -11.998 -50.890  1.00 50.57           N
ATOM   4934  CA  SER C 118     -78.352 -13.329 -51.203  1.00 48.18           C
ATOM   4935  C   SER C 118     -79.874 -13.294 -51.257  1.00 44.84           C
ATOM   4936  O   SER C 118     -80.527 -12.970 -50.262  1.00 48.16           O
ATOM   4937  CB  SER C 118     -77.888 -14.349 -50.161  1.00 43.10           C
ATOM   4938  OG  SER C 118     -76.484 -14.493 -50.160  1.00 44.45           O
ATOM   4939  N   VAL C 119     -80.437 -13.658 -52.409  1.00 46.09           N
ATOM   4940  CA  VAL C 119     -81.881 -13.626 -52.598  1.00 41.56           C
ATOM   4941  C   VAL C 119     -82.537 -14.980 -52.347  1.00 43.40           C
ATOM   4942  O   VAL C 119     -83.750 -15.042 -52.114  1.00 42.00           O
ATOM   4943  CB  VAL C 119     -82.218 -13.167 -54.028  1.00 46.76           C
ATOM   4944  CG1 VAL C 119     -83.573 -12.483 -54.062  1.00 52.63           C
ATOM   4945  CG2 VAL C 119     -81.120 -12.258 -54.567  1.00 50.61           C
ATOM   4946  N   GLY C 120     -81.776 -16.058 -52.407  1.00 40.30           N
ATOM   4947  CA  GLY C 120     -82.321 -17.390 -52.248  1.00 38.28           C
ATOM   4948  C   GLY C 120     -81.215 -18.388 -52.499  1.00 38.27           C
ATOM   4949  O   GLY C 120     -80.050 -18.012 -52.682  1.00 35.17           O
ATOM   4950  N   CYS C 121     -81.574 -19.665 -52.513  1.00 35.20           N
ATOM   4951  CA  CYS C 121     -80.568 -20.693 -52.747  1.00 35.76           C
ATOM   4952  C   CYS C 121     -81.013 -21.619 -53.872  1.00 33.15           C
ATOM   4953  O   CYS C 121     -82.210 -21.791 -54.137  1.00 32.47           O
ATOM   4954  CB  CYS C 121     -80.256 -21.484 -51.460  1.00 34.56           C
ATOM   4955  SG  CYS C 121     -79.466 -20.482 -50.139  1.00 39.86           S
ATOM   4956  N   THR C 122     -80.029 -22.169 -54.568  1.00 27.88           N
ATOM   4957  CA  THR C 122     -80.250 -23.186 -55.577  1.00 28.39           C
ATOM   4958  C   THR C 122     -79.377 -24.396 -55.249  1.00 34.77           C
ATOM   4959  O   THR C 122     -78.451 -24.331 -54.423  1.00 30.57           O
ATOM   4960  CB  THR C 122     -79.960 -22.649 -56.988  1.00 29.74           C
ATOM   4961  OG1 THR C 122     -80.640 -23.468 -57.949  1.00 33.12           O
ATOM   4962  CG2 THR C 122     -78.446 -22.664 -57.293  1.00 30.25           C
ATOM   4963  N   CYS C 123     -79.679 -25.513 -55.909  1.00 29.92           N
ATOM   4964  CA  CYS C 123     -78.945 -26.751 -55.714  1.00 28.15           C
ATOM   4965  C   CYS C 123     -77.996 -26.985 -56.883  1.00 30.20           C
ATOM   4966  O   CYS C 123     -78.392 -26.897 -58.045  1.00 33.28           O
ATOM   4967  CB  CYS C 123     -79.901 -27.936 -55.562  1.00 28.74           C
ATOM   4968  SG  CYS C 123     -79.013 -29.462 -55.133  1.00 33.47           S
ATOM   4969  N   VAL C 124     -76.752 -27.303 -56.577  1.00 26.46           N
ATOM   4970  CA  VAL C 124     -75.735 -27.522 -57.595  1.00 31.58           C
ATOM   4971  C   VAL C 124     -75.301 -28.982 -57.561  1.00 32.70           C
ATOM   4972  O   VAL C 124     -75.162 -29.589 -56.489  1.00 32.19           O
ATOM   4973  CB  VAL C 124     -74.545 -26.558 -57.402  1.00 32.24           C
ATOM   4974  CG1 VAL C 124     -73.372 -27.000 -58.210  1.00 36.65           C
ATOM   4975  CG2 VAL C 124     -74.961 -25.175 -57.850  1.00 33.27           C
ATOM   4976  N   THR C 125     -75.121 -29.552 -58.745  1.00 35.08           N
ATOM   4977  CA  THR C 125     -74.717 -30.931 -58.910  1.00 32.78           C
ATOM   4978  C   THR C 125     -73.400 -30.995 -59.676  1.00 28.09           C
ATOM   4979  O   THR C 125     -73.136 -30.143 -60.525  1.00 30.14           O
ATOM   4980  CB  THR C 125     -75.801 -31.731 -59.661  1.00 27.73           C
ATOM   4981  OG1 THR C 125     -75.324 -33.050 -59.925  1.00 37.45           O
ATOM   4982  CG2 THR C 125     -76.115 -31.082 -60.977  1.00 33.49           C
ATOM   4983  N   PRO C 126     -72.548 -31.980 -59.382  1.00 27.47           N
ATOM   4984  CA  PRO C 126     -71.323 -32.193 -60.170  1.00 30.33           C
ATOM   4985  C   PRO C 126     -71.520 -32.998 -61.446  1.00 34.63           C
ATOM   4986  O   PRO C 126     -70.553 -33.189 -62.192  1.00 36.44           O
ATOM   4987  CB  PRO C 126     -70.428 -32.974 -59.197  1.00 30.62           C
ATOM   4988  CG  PRO C 126     -71.405 -33.775 -58.401  1.00 28.72           C
```

[2264]

```
ATOM   4989  CD  PRO C 126     -72.609 -32.863 -58.205  1.00 28.21           C
ATOM   4990  N   ILE C 127     -72.715 -33.501 -61.704  1.00 34.75           N
ATOM   4991  CA  ILE C 127     -72.956 -34.374 -62.844  1.00 39.17           C
ATOM   4992  C   ILE C 127     -73.321 -33.519 -64.043  1.00 40.91           C
ATOM   4993  O   ILE C 127     -74.172 -32.624 -63.941  1.00 38.96           O
ATOM   4994  CB  ILE C 127     -74.068 -35.394 -62.539  1.00 39.89           C
ATOM   4995  CG1 ILE C 127     -73.598 -36.403 -61.502  1.00 39.59           C
ATOM   4996  CG2 ILE C 127     -74.529 -36.109 -63.805  1.00 42.80           C
ATOM   4997  CD1 ILE C 127     -73.953 -35.971 -60.138  1.00 43.80           C
ATOM   4998  N   VAL C 128     -72.686 -33.810 -65.182  1.00 40.32           N
ATOM   4999  CA  VAL C 128     -73.052 -33.172 -66.441  1.00 46.65           C
ATOM   5000  C   VAL C 128     -74.520 -33.441 -66.765  1.00 49.89           C
ATOM   5001  O   VAL C 128     -75.022 -34.566 -66.620  1.00 47.05           O
ATOM   5002  CB  VAL C 128     -72.138 -33.678 -67.570  1.00 50.41           C
ATOM   5003  CG1 VAL C 128     -72.399 -32.896 -68.856  1.00 53.15           C
ATOM   5004  CG2 VAL C 128     -70.672 -33.578 -67.147  1.00 54.79           C
ATOM   5005  N   HIS C 129     -75.216 -32.398 -67.206  1.00 49.32           N
ATOM   5006  CA  HIS C 129     -76.612 -32.511 -67.608  1.00 43.64           C
ATOM   5007  C   HIS C 129     -76.707 -33.204 -68.968  1.00 46.88           C
ATOM   5008  O   HIS C 129     -76.196 -32.691 -69.969  1.00 48.43           O
ATOM   5009  CB  HIS C 129     -77.244 -31.121 -67.675  1.00 44.79           C
ATOM   5010  CG  HIS C 129     -77.200 -30.367 -66.378  1.00 47.42           C
ATOM   5011  ND1 HIS C 129     -77.737 -29.105 -66.235  1.00 36.75           N
ATOM   5012  CD2 HIS C 129     -76.694 -30.698 -65.163  1.00 43.43           C
ATOM   5013  CE1 HIS C 129     -77.558 -28.688 -64.992  1.00 34.48           C
ATOM   5014  NE2 HIS C 129     -76.927 -29.636 -64.322  1.00 37.44           N
ATOM   5015  N   HIS C 130     -77.358 -34.365 -69.011  1.00 44.75           N
ATOM   5016  CA  HIS C 130     -77.628 -35.009 -70.287  1.00 43.51           C
ATOM   5017  C   HIS C 130     -78.603 -34.162 -71.104  1.00 50.47           C
ATOM   5018  O   HIS C 130     -79.570 -33.605 -70.570  1.00 51.77           O
ATOM   5019  CB  HIS C 130     -78.192 -36.411 -70.065  1.00 50.78           C
ATOM   5020  CG  HIS C 130     -77.227 -37.357 -69.414  1.00 55.75           C
ATOM   5021  ND1 HIS C 130     -75.977 -36.966 -68.969  1.00 55.30           N
ATOM   5022  CD2 HIS C 130     -77.331 -38.677 -69.128  1.00 54.58           C
ATOM   5023  CE1 HIS C 130     -75.354 -38.006 -68.442  1.00 53.27           C
ATOM   5024  NE2 HIS C 130     -76.152 -39.056 -68.527  1.00 57.51           N
ATOM   5025  N   VAL C 131     -78.333 -34.046 -72.401  1.00 48.98           N
ATOM   5026  CA  VAL C 131     -79.148 -33.213 -73.287  1.00 56.39           C
ATOM   5027  C   VAL C 131     -80.035 -34.086 -74.176  1.00 55.03           C
ATOM   5028  O   VAL C 131     -79.833 -35.299 -74.273  1.00 56.70           O
ATOM   5029  CB  VAL C 131     -78.267 -32.270 -74.147  1.00 54.66           C
ATOM   5030  CG1 VAL C 131     -79.115 -31.492 -75.122  1.00 52.09           C
ATOM   5031  CG2 VAL C 131     -77.481 -31.307 -73.260  1.00 55.49           C
TER
HETATM 5032 MG    MG M   1     -79.454 -28.400 -69.160  1.00 47.81          Mg
HETATM 5033 CA    CA N   1     -72.028 -20.879 -48.519  1.00 71.08          Ca
HETATM 5034 CL    CL G   1     -19.931 -35.633  -3.479  1.00 67.71          Cl
HETATM 5035  O   HOH S   1     -38.462 -29.338 -10.158  1.00 25.50           O
HETATM 5036  O   HOH S   2     -26.033 -45.682 -12.863  1.00 30.26           O
HETATM 5037  O   HOH S   3     -18.041 -58.148 -19.838  1.00 33.49           O
HETATM 5038  O   HOH S   4     -23.972 -48.598 -21.291  1.00 29.73           O
HETATM 5039  O   HOH S   5     -80.177 -25.580 -47.832  1.00 31.60           O
HETATM 5040  O   HOH S   6     -37.783 -23.285  -2.955  1.00 36.14           O
HETATM 5041  O   HOH S   7     -21.837 -53.393 -30.816  1.00 33.91           O
HETATM 5042  O   HOH S   8     -27.088 -28.796 -19.203  1.00 28.73           O
HETATM 5043  O   HOH S   9     -12.137 -46.607 -32.377  1.00 40.57           O
HETATM 5044  O   HOH S  10     -67.797 -42.172 -49.406  1.00 28.55           O
HETATM 5045  O   HOH S  11     -41.215 -34.233 -18.837  1.00 38.51           O
HETATM 5046  O   HOH S  12     -66.600 -45.409 -64.809  1.00 36.86           O
HETATM 5047  O   HOH S  13     -83.087 -26.259 -55.189  1.00 28.40           O
HETATM 5048  O   HOH S  14     -68.321 -25.404 -56.472  1.00 30.67           O
HETATM 5049  O   HOH S  15     -21.543 -18.872 -10.456  1.00 32.38           O
HETATM 5050  O   HOH S  16     -74.700 -39.641 -59.435  1.00 33.06           O
HETATM 5051  O   HOH S  17     -28.949 -35.556 -13.677  1.00 26.96           O
HETATM 5052  O   HOH S  18      -8.799 -40.112 -27.404  1.00 32.88           O
HETATM 5053  O   HOH S  19     -10.466 -43.385 -13.358  1.00 30.49           O
HETATM 5054  O   HOH S  20     -65.226 -45.522 -57.563  1.00 35.53           O
HETATM 5055  O   HOH S  21     -12.791 -49.297 -12.304  1.00 33.09           O
```

[2265]

```
HETATM 5056  O   HOH S  22     -70.683 -32.162 -50.704  1.00 29.27           O
HETATM 5057  O   HOH S  23     -57.122 -42.066 -45.305  1.00 31.25           O
HETATM 5058  O   HOH S  24     -57.367 -53.585 -53.625  1.00 30.69           O
HETATM 5059  O   HOH S  25     -62.895 -14.938 -47.816  1.00 37.80           O
HETATM 5060  O   HOH S  26     -32.142 -32.983  -5.433  1.00 43.61           O
HETATM 5061  O   HOH S  27     -14.072 -56.962 -20.368  1.00 37.27           O
HETATM 5062  O   HOH S  28     -48.607 -43.408 -15.263  1.00 39.27           O
HETATM 5063  O   HOH S  29     -52.063 -61.164 -63.845  1.00 36.36           O
HETATM 5064  O   HOH S  30     -45.904 -32.290 -10.665  1.00 38.99           O
HETATM 5065  O   HOH S  31     -70.082 -43.124 -53.394  1.00 31.40           O
HETATM 5066  O   HOH S  32     -75.613 -37.865 -48.663  1.00 28.84           O
HETATM 5067  O   HOH S  33     -72.292 -47.271 -48.229  1.00 37.77           O
HETATM 5068  O   HOH S  34     -14.999 -45.622  -9.367  1.00 35.29           O
HETATM 5069  O   HOH S  35     -34.155 -33.921  -6.736  1.00 36.56           O
HETATM 5070  O   HOH S  36     -20.282 -23.420  -4.418  1.00 37.97           O
HETATM 5071  O   HOH S  37     -14.327 -37.722  -7.980  1.00 33.56           O
HETATM 5072  O   HOH S  38     -49.737 -37.044 -62.728  1.00 34.58           O
HETATM 5073  O   HOH S  39     -59.191 -51.893 -72.747  1.00 46.56           O
HETATM 5074  O   HOH S  40     -18.280 -51.320  -7.945  1.00 34.37           O
HETATM 5075  O   HOH S  41     -29.227 -32.611  -6.239  1.00 39.51           O
HETATM 5076  O   HOH S  42     -51.928 -46.823 -49.344  1.00 32.63           O
HETATM 5077  O   HOH S  43     -28.559 -46.667 -16.798  1.00 31.24           O
HETATM 5078  O   HOH S  44     -29.727 -24.356 -14.543  1.00 33.53           O
HETATM 5079  O   HOH S  45     -24.445 -30.723 -12.774  1.00 34.85           O
HETATM 5080  O   HOH S  46     -34.281 -22.588  -9.533  1.00 34.60           O
HETATM 5081  O   HOH S  47     -57.505 -35.858 -66.419  1.00 42.25           O
HETATM 5082  O   HOH S  48     -48.499 -35.374 -46.850  1.00 38.69           O
HETATM 5083  O   HOH S  49     -16.231 -59.923 -24.455  1.00 36.36           O
HETATM 5084  O   HOH S  50     -52.468 -39.679 -48.858  1.00 35.49           O
HETATM 5085  O   HOH S  51     -60.578 -47.793 -43.688  1.00 31.70           O
HETATM 5086  O   HOH S  52     -41.736 -29.839 -17.656  1.00 28.59           O
HETATM 5087  O   HOH S  53     -61.723 -19.407 -41.118  1.00 42.24           O
HETATM 5088  O   HOH S  54     -62.236 -50.253 -66.840  1.00 36.60           O
HETATM 5089  O   HOH S  55     -31.218 -44.354 -23.631  1.00 35.36           O
HETATM 5090  O   HOH S  56     -30.365 -51.192 -11.474  1.00 41.31           O
HETATM 5091  O   HOH S  57     -48.955 -33.531 -44.983  1.00 42.27           O
HETATM 5092  O   HOH S  58     -10.099 -50.000 -14.204  1.00 35.03           O
HETATM 5093  O   HOH S  59      -5.015 -54.400 -22.544  1.00 35.01           O
HETATM 5094  O   HOH S  60      -7.418 -45.990 -12.974  1.00 39.40           O
HETATM 5095  O   HOH S  61     -14.556 -39.834 -10.654  1.00 30.93           O
HETATM 5096  O   HOH S  62      -6.194 -43.076 -20.242  1.00 41.86           O
HETATM 5097  O   HOH S  63     -69.836 -23.030 -52.637  1.00 36.61           O
HETATM 5098  O   HOH S  64     -40.090 -44.512 -10.806  1.00 47.96           O
HETATM 5099  O   HOH S  65      -5.687 -38.785 -12.002  1.00 36.31           O
HETATM 5100  O   HOH S  66     -16.842 -38.842 -30.174  1.00 41.86           O
HETATM 5101  O   HOH S  67     -52.781 -32.169 -13.483  1.00 34.71           O
HETATM 5102  O   HOH S  68     -66.655 -31.587 -65.204  1.00 41.82           O
HETATM 5103  O   HOH S  69     -31.992 -56.957 -15.574  1.00 59.58           O
HETATM 5104  O   HOH S  70     -41.687 -27.640 -35.631  1.00 40.73           O
HETATM 5105  O   HOH S  71     -17.974 -59.188 -34.492  1.00 46.28           O
HETATM 5106  O   HOH S  72     -64.117 -16.242 -45.666  1.00 39.02           O
HETATM 5107  O   HOH S  73      -6.267 -36.839 -10.171  1.00 41.61           O
HETATM 5108  O   HOH S  74     -63.001 -44.946 -38.091  1.00 49.99           O
HETATM 5109  O   HOH S  75     -44.553 -21.488  -3.762  1.00 38.90           O
HETATM 5110  O   HOH S  76     -57.149 -56.397 -57.195  1.00 36.64           O
HETATM 5111  O   HOH S  77     -72.266 -42.355 -53.959  1.00 31.41           O
HETATM 5112  O   HOH S  78     -33.728 -41.700 -11.559  1.00 31.82           O
HETATM 5113  O   HOH S  79     -22.624 -20.084  -8.444  1.00 39.39           O
HETATM 5114  O   HOH S  80     -53.224 -32.622 -11.143  1.00 37.32           O
HETATM 5115  O   HOH S  81     -70.576 -25.767 -51.607  1.00 35.01           O
HETATM 5116  O   HOH S  82      -3.218 -36.498 -17.938  1.00 35.55           O
HETATM 5117  O   HOH S  83     -27.014 -29.127 -12.251  1.00 36.95           O
HETATM 5118  O   HOH S  84     -10.499 -41.116 -29.334  1.00 38.37           O
HETATM 5119  O   HOH S  85     -25.929 -43.490  -5.281  1.00 40.47           O
HETATM 5120  O   HOH S  86     -14.913 -19.968  -8.661  1.00 34.93           O
HETATM 5121  O   HOH S  87     -25.965 -48.377 -28.479  1.00 44.84           O
HETATM 5122  O   HOH S  88     -53.238 -26.720 -19.610  1.00 33.42           O
HETATM 5123  O   HOH S  89     -47.905 -21.744 -12.506  1.00 35.34           O
```

[2266]

```
HETATM 5124  O   HOH S  90     -47.146 -39.768 -55.140  1.00 44.09           O
HETATM 5125  O   HOH S  91     -45.027 -32.626  -8.111  1.00 40.49           O
HETATM 5126  O   HOH S  92     -23.686 -16.084 -14.568  1.00 39.81           O
HETATM 5127  O   HOH S  93     -45.650 -43.273 -65.971  1.00 50.72           O
HETATM 5128  O   HOH S  94     -46.433 -17.698 -36.448  1.00 43.75           O
HETATM 5129  O   HOH S  95       1.644 -26.031 -15.273  1.00 42.45           O
HETATM 5130  O   HOH S  96     -24.897 -44.581  -2.860  1.00 44.13           O
HETATM 5131  O   HOH S  97     -52.877 -27.364 -35.731  1.00 45.75           O
HETATM 5132  O   HOH S  98      -3.648 -41.083 -21.761  1.00 42.78           O
HETATM 5133  O   HOH S  99     -12.796 -38.610  -5.988  1.00 40.59           O
HETATM 5134  O   HOH S 100     -54.203 -18.146 -39.332  1.00 42.05           O
HETATM 5135  O   HOH S 101     -58.843 -33.797 -40.045  1.00 45.60           O
HETATM 5136  O   HOH S 102     -70.969 -36.332 -65.377  1.00 44.71           O
HETATM 5137  O   HOH S 103     -23.374 -53.599 -24.691  1.00 34.88           O
HETATM 5138  O   HOH S 104     -56.061 -37.168 -68.563  1.00 44.06           O
HETATM 5139  O   HOH S 105      -9.668 -19.687 -21.223  1.00 36.12           O
HETATM 5140  O   HOH S 106     -61.510 -32.227 -40.082  1.00 38.85           O
HETATM 5141  O   HOH S 107     -24.412 -54.722 -18.425  1.00 36.67           O
HETATM 5142  O   HOH S 108     -66.247 -27.164 -49.373  1.00 33.77           O
HETATM 5143  O   HOH S 109     -54.739 -46.044 -47.641  1.00 34.41           O
HETATM 5144  O   HOH S 110     -29.030 -29.093 -14.200  1.00 33.39           O
HETATM 5145  O   HOH S 111     -24.976 -17.772 -22.753  1.00 45.06           O
HETATM 5146  O   HOH S 112     -94.178 -28.539 -52.045  1.00 36.29           O
HETATM 5147  O   HOH S 113     -35.819 -24.734  -4.491  1.00 43.67           O
HETATM 5148  O   HOH S 114     -57.358 -55.807 -70.144  1.00 38.59           O
HETATM 5149  O   HOH S 115     -23.827 -18.064 -24.680  1.00 43.22           O
HETATM 5150  O   HOH S 116     -26.602 -24.196 -28.253  1.00 42.46           O
HETATM 5151  O   HOH S 117     -68.616 -34.323 -40.714  1.00 49.20           O
HETATM 5152  O   HOH S 118     -47.084 -30.337  -6.737  1.00 43.62           O
HETATM 5153  O   HOH S 119     -45.277 -23.685  -3.897  1.00 45.89           O
HETATM 5154  O   HOH S 120      -9.359 -23.545   1.961  1.00 45.70           O
HETATM 5155  O   HOH S 121     -21.353 -32.442  -3.795  1.00 38.81           O
HETATM 5156  O   HOH S 122      -4.547 -56.901 -22.325  1.00 37.82           O
HETATM 5157  O   HOH S 123     -28.627 -43.251  -5.053  1.00 45.70           O
HETATM 5158  O   HOH S 124     -65.646 -51.590 -54.582  1.00 39.53           O
HETATM 5159  O   HOH S 125     -33.517 -19.880 -10.597  1.00 41.02           O
HETATM 5160  O   HOH S 126     -81.724 -40.656 -48.462  1.00 46.34           O
HETATM 5161  O   HOH S 127     -22.319 -57.373 -11.468  1.00 43.47           O
HETATM 5162  O   HOH S 128     -14.979 -61.425 -26.626  1.00 37.98           O
HETATM 5163  O   HOH S 129     -61.721 -17.121 -44.089  1.00 44.86           O
HETATM 5164  O   HOH S 130      -2.938 -39.406 -19.297  1.00 43.55           O
HETATM 5165  O   HOH S 131      -5.989 -58.255 -20.288  1.00 34.99           O
HETATM 5166  O   HOH S 132     -64.361 -24.488 -39.305  1.00 43.50           O
HETATM 5167  O   HOH S 133     -15.009 -18.391  -6.216  1.00 41.29           O
HETATM 5168  O   HOH S 134     -72.400 -41.164 -60.207  1.00 36.81           O
HETATM 5169  O   HOH S 135     -56.856 -58.883 -68.115  1.00 39.12           O
HETATM 5170  O   HOH S 136     -29.410 -51.259 -25.208  1.00 41.90           O
HETATM 5171  O   HOH S 137     -51.412 -22.807 -21.190  1.00 38.70           O
HETATM 5172  O   HOH S 138     -67.086 -51.946 -56.492  1.00 43.35           O
HETATM 5173  O   HOH S 139     -24.775 -53.409 -26.826  1.00 44.03           O
HETATM 5174  O   HOH S 140     -45.973 -50.904 -57.230  1.00 32.92           O
HETATM 5175  O   HOH S 141     -29.170 -29.614 -17.725  1.00 37.48           O
HETATM 5176  O   HOH S 142     -22.033 -58.100  -8.957  1.00 49.16           O
HETATM 5177  O   HOH S 143     -12.609 -22.389  -2.830  1.00 41.62           O
HETATM 5178  O   HOH S 144     -44.185 -49.922 -55.021  1.00 42.70           O
HETATM 5179  O   HOH S 145     -58.129 -50.796 -42.759  1.00 39.01           O
HETATM 5180  O   HOH S 146     -64.737 -14.785 -62.275  1.00 46.82           O
HETATM 5181  O   HOH S 147      -1.768 -42.270 -29.696  1.00 48.13           O
HETATM 5182  O   HOH S 148     -55.469 -57.967 -62.132  1.00 34.52           O
HETATM 5183  O   HOH S 149     -30.859 -45.854 -17.055  1.00 36.37           O
HETATM 5184  O   HOH S 150      -6.408 -49.650 -16.813  1.00 43.37           O
HETATM 5185  O   HOH S 151     -56.465 -34.329 -43.681  1.00 34.29           O
HETATM 5186  O   HOH S 152     -65.358 -34.793 -40.237  1.00 44.14           O
HETATM 5187  O   HOH S 153     -92.783 -19.261 -59.040  1.00 40.00           O
HETATM 5188  O   HOH S 154     -56.328 -36.120 -46.636  1.00 34.72           O
HETATM 5189  O   HOH S 155     -28.515 -41.264  -4.041  1.00 48.58           O
HETATM 5190  O   HOH S 156      -3.978 -37.999 -22.380  1.00 47.41           O
HETATM 5191  O   HOH S 157     -58.262 -35.333 -43.679  1.00 35.45           O
```

[2267]

```
HETATM 5192  O   HOH S 158     -20.277 -20.646  -6.786  1.00 41.03           O
HETATM 5193  O   HOH S 159     -16.328 -38.707  -7.589  1.00 42.55           O
HETATM 5194  O   HOH S 160     -16.986 -35.925 -26.146  1.00 38.19           O
HETATM 5195  O   HOH S 161     -73.815 -29.750 -63.348  1.00 40.44           O
HETATM 5196  O   HOH S 162      -5.191 -49.545 -24.483  1.00 46.55           O
HETATM 5197  O   HOH S 163     -46.093 -41.339 -58.460  1.00 54.53           O
HETATM 5198  O   HOH S 164      -7.068 -34.545 -28.024  1.00 49.61           O
HETATM 5199  O   HOH S 165     -34.883 -15.486 -10.603  1.00 47.87           O
HETATM 5200  O   HOH S 166     -51.590 -40.186 -46.180  1.00 41.02           O
HETATM 5201  O   HOH S 167     -82.230 -31.875 -75.704  1.00 45.57           O
HETATM 5202  O   HOH S 168     -30.823 -27.770 -12.923  1.00 38.16           O
HETATM 5203  O   HOH S 169     -13.461 -37.636  -3.260  1.00 40.94           O
HETATM 5204  O   HOH S 170     -83.133 -34.139 -74.142  1.00 53.25           O
HETATM 5205  O   HOH S 171     -42.989 -32.456 -43.922  1.00 42.17           O
HETATM 5206  O   HOH S 172     -54.217 -51.139 -74.190  1.00 51.70           O
HETATM 5207  O   HOH S 173     -67.849 -40.403 -41.790  1.00 39.75           O
HETATM 5208  O   HOH S 174      -1.567 -36.660  -8.830  1.00 41.33           O
HETATM 5209  O   HOH S 175     -74.530 -30.952 -70.506  1.00 53.98           O
HETATM 5210  O   HOH S 176     -80.809 -31.377 -69.992  1.00 51.52           O
HETATM 5211  O   HOH S 177     -56.449 -16.112 -45.160  1.00 39.81           O
HETATM 5212  O   HOH S 178     -28.296 -26.795 -15.748  1.00 38.46           O
HETATM 5213  O   HOH S 179     -73.002 -43.567 -58.681  1.00 38.87           O
HETATM 5214  O   HOH S 180     -51.457 -37.750 -64.606  1.00 45.53           O
HETATM 5215  O   HOH S 181      -4.907 -20.715  -0.358  1.00 45.54           O
HETATM 5216  O   HOH S 182     -73.568 -51.105 -54.338  1.00 46.04           O
HETATM 5217  O   HOH S 183     -65.422 -45.519 -67.883  1.00 45.64           O
HETATM 5218  O   HOH S 184     -74.119 -29.584 -67.399  1.00 49.21           O
HETATM 5219  O   HOH S 185     -67.407 -20.813 -65.220  1.00 43.64           O
HETATM 5220  O   HOH S 186     -67.740 -27.236 -64.539  1.00 39.75           O
HETATM 5221  O   HOH S 187     -32.016 -54.316 -17.584  1.00 43.95           O
HETATM 5222  O   HOH S 188     -45.912 -31.491 -58.345  1.00 42.43           O
HETATM 5223  O   HOH S 189       3.852 -33.166  -7.336  1.00 49.44           O
HETATM 5224  O   HOH S 190     -19.271 -40.157  -1.494  1.00 54.01           O
HETATM 5225  O   HOH S 191       5.570 -33.381  -9.563  1.00 51.94           O
HETATM 5226  O   HOH S 192     -26.812 -30.367 -27.618  1.00 41.02           O
HETATM 5227  O   HOH S 193     -36.309 -38.035 -22.978  1.00 40.72           O
HETATM 5228  O   HOH S 194     -72.404 -23.857 -49.879  1.00 46.35           O
HETATM 5229  O   HOH S 195     -30.061 -51.679 -22.233  1.00 42.31           O
HETATM 5230  O   HOH S 196     -65.549 -33.245 -68.183  1.00 49.20           O
HETATM 5231  O   HOH S 197     -77.127 -11.281 -48.289  1.00 52.61           O
HETATM 5232  O   HOH S 198      -6.043 -17.482  -6.595  1.00 51.78           O
HETATM 5233  O   HOH S 199       3.754 -21.563 -13.867  1.00 40.80           O
HETATM 5234  O   HOH S 200     -14.290 -29.261 -31.110  1.00 55.65           O
HETATM 5235  O   HOH S 201     -52.410 -14.048 -40.013  1.00 50.68           O
HETATM 5236  O   HOH S 202     -25.896 -55.075 -20.284  1.00 45.85           O
HETATM 5237  O   HOH S 203     -78.779 -36.461 -43.932  1.00 48.49           O
HETATM 5238  O   HOH S 204     -51.584 -19.212 -34.785  1.00 46.39           O
HETATM 5239  O   HOH S 205     -64.942 -12.337 -51.598  1.00 47.78           O
HETATM 5240  O   HOH S 206     -65.306 -13.606 -49.556  1.00 58.86           O
HETATM 5241  O   HOH S 207     -66.731 -38.990 -39.841  1.00 50.70           O
HETATM 5242  O   HOH S 208     -64.386 -50.436 -60.995  1.00 38.31           O
HETATM 5243  O   HOH S 209      -4.949 -45.293 -23.941  1.00 49.02           O
HETATM 5244  O   HOH S 210     -53.636 -22.013  -8.162  1.00 52.89           O
HETATM 5245  O   HOH S 211     -78.952 -31.436 -41.329  1.00 47.81           O
HETATM 5246  O   HOH S 212      -7.882 -33.989  -3.710  1.00 47.54           O
HETATM 5247  O   HOH S 213     -56.984 -56.613 -60.040  1.00 38.11           O
HETATM 5248  O   HOH S 214     -24.748 -48.584 -32.235  1.00 44.59           O
HETATM 5249  O   HOH S 215     -54.272 -12.118 -47.007  1.00 56.67           O
HETATM 5250  O   HOH S 216     -33.549  -0.984  -7.526  1.00 67.91           O
HETATM 5251  O   HOH S 217     -82.430 -30.370 -56.512  1.00 39.80           O
HETATM 5252  O   HOH S 218     -21.265 -36.379  -1.909  1.00 50.39           O
HETATM 5253  O   HOH S 219     -23.286 -58.202 -15.849  1.00 48.71           O
HETATM 5254  O   HOH S 220     -73.049 -41.848 -43.118  1.00 38.59           O
HETATM 5255  O   HOH S 221     -57.580 -44.457 -39.413  1.00 49.31           O
HETATM 5256  O   HOH S 222      -1.079 -25.667 -18.955  1.00 34.13           O
HETATM 5257  O   HOH S 223     -35.867 -10.944  -1.941  1.00 60.84           O
HETATM 5258  O   HOH S 224     -51.603 -23.741 -67.615  1.00 60.86           O
HETATM 5259  O   HOH S 225     -49.655 -31.003 -36.576  1.00 52.09           O
```

[2268]

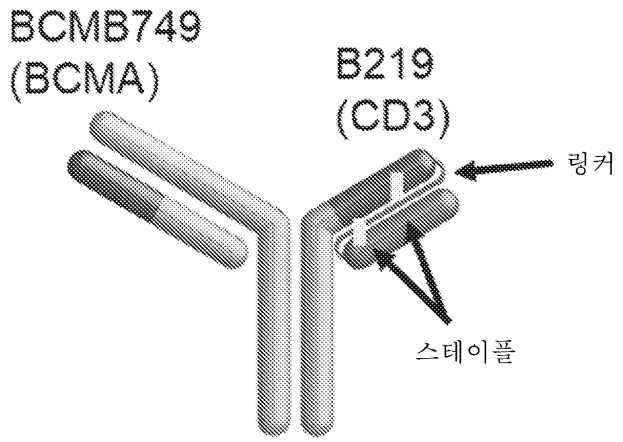
```
HETATM 5260  O   HOH S 226     -82.732  -1.334 -54.833  1.00 72.75           O
HETATM 5261  O   HOH S 227     -50.992 -25.047 -68.716  1.00 64.30           O
HETATM 5262  O   HOH S 228     -10.972 -17.771  -2.119  1.00 47.43           O
HETATM 5263  O   HOH S 229     -52.766 -43.039 -68.195  1.00 39.65           O
HETATM 5264  O   HOH S 230     -11.750 -64.309 -28.786  1.00 41.81           O
HETATM 5265  O   HOH S 231     -51.341 -25.896 -70.709  1.00 64.45           O
HETATM 5266  O   HOH S 232     -41.608  -5.770 -15.737  1.00 61.55           O
HETATM 5267  O   HOH S 233     -24.538 -24.149  -4.615  1.00 42.72           O
HETATM 5268  O   HOH S 234     -58.527 -39.696 -41.929  1.00 44.75           O
HETATM 5269  O   HOH S 235     -77.349 -29.176 -41.237  1.00 44.12           O
HETATM 5270  O   HOH S 236      -6.496 -46.179 -16.776  1.00 39.65           O
HETATM 5271  O   HOH S 237     -37.224  -9.475  -1.809  1.00 65.32           O
HETATM 5272  O   HOH S 238     -76.842 -34.125 -42.435  1.00 54.75           O
HETATM 5273  O   HOH S 239     -54.918 -38.380 -46.013  1.00 40.22           O
HETATM 5274  O   HOH S 240      -4.771 -46.329 -15.969  1.00 51.77           O
HETATM 5275  O   HOH S 241     -40.255 -14.234   1.352  1.00 58.41           O
HETATM 5276  O   HOH S 242     -68.581 -40.347 -67.986  1.00 45.44           O
HETATM 5277  O   HOH S 243     -24.050 -17.240 -11.552  1.00 45.67           O
HETATM 5278  O   HOH S 244     -75.975 -30.033 -43.928  1.00 41.32           O
HETATM 5279  O   HOH S 245     -28.930 -30.406  -7.329  1.00 43.74           O
HETATM 5280  O   HOH S 246     -41.093 -15.845   3.709  1.00 46.26           O
HETATM 5281  O   HOH S 247     -30.198 -60.247 -16.313  1.00 56.82           O
HETATM 5282  O   HOH S 248     -28.237 -60.342 -15.134  1.00 51.30           O
HETATM 5283  O   HOH S 249     -42.886 -38.817 -67.402  1.00 68.29           O
HETATM 5284  O   HOH S 250     -58.183 -22.135 -38.328  1.00 44.81           O
HETATM 5285  O   HOH S 251     -39.309 -39.411  -5.679  1.00 51.34           O
HETATM 5286  O   HOH S 252     -16.595 -12.809 -13.873  1.00 48.41           O
HETATM 5287  O   HOH S 253     -47.546 -50.129 -73.244  1.00 59.61           O
HETATM 5288  O   HOH S 254     -48.265 -47.437 -74.105  1.00 59.65           O
HETATM 5289  O   HOH S 255     -83.010 -38.540 -54.472  1.00 43.21           O
HETATM 5290  O   HOH S 256     -27.803 -44.457 -31.228  1.00 54.05           O
HETATM 5291  O   HOH S 257     -73.280 -54.434 -53.467  1.00 55.85           O
HETATM 5292  O   HOH S 258     -30.799 -45.610  -6.285  1.00 43.06           O
HETATM 5293  O   HOH S 259     -43.963 -53.451 -69.071  1.00 62.94           O
HETATM 5294  O   HOH S 260     -75.399 -29.117 -42.197  1.00 62.62           O
HETATM 5295  O   HOH S 261     -15.928 -43.715  -5.859  1.00 44.38           O
HETATM 5296  O   HOH S 262     -49.108 -14.579 -51.715  1.00 44.98           O
HETATM 5297  O   HOH S 263     -31.700 -47.167 -21.839  1.00 42.43           O
HETATM 5298  O   HOH S 264     -66.139 -14.057 -59.552  1.00 47.65           O
HETATM 5299  O   HOH S 265     -43.852 -29.581 -34.705  1.00 45.89           O
HETATM 5300  O   HOH S 266      -3.604 -56.536 -34.850  1.00 64.60           O
HETATM 5301  O   HOH S 267     -16.620 -26.357  -1.707  1.00 46.08           O
HETATM 5302  O   HOH S 268     -75.649 -19.096 -47.188  1.00 38.00           O
HETATM 5303  O   HOH S 269     -55.216 -26.058 -67.896  1.00 63.80           O
HETATM 5304  O   HOH S 270     -69.524 -31.395 -64.055  1.00 42.38           O
HETATM 5305  O   HOH S 271     -79.756  -5.850 -59.044  1.00 62.85           O
HETATM 5306  O   HOH S 272     -69.506 -56.960 -51.243  1.00 55.52           O
HETATM 5307  O   HOH S 273     -13.237 -34.542 -27.270  1.00 46.46           O
HETATM 5308  O   HOH S 274     -82.457 -29.955 -73.362  1.00 47.87           O
HETATM 5309  O   HOH S 275       0.675 -38.118  -8.332  1.00 54.09           O
HETATM 5310  O   HOH S 276     -24.155 -25.870 -30.263  1.00 62.40           O
HETATM 5311  O   HOH S 277     -71.771   7.176 -47.270  1.00 78.89           O
HETATM 5312  O   HOH S 278     -71.038 -39.661 -41.841  1.00 42.38           O
HETATM 5313  O   HOH S 279     -25.625 -34.861 -28.547  1.00 42.56           O
HETATM 5314  O   HOH S 280     -67.649 -47.673 -68.436  1.00 62.59           O
HETATM 5315  O   HOH S 281     -43.365 -39.198 -64.771  1.00 44.77           O
HETATM 5316  O   HOH S 282     -19.146 -27.104  -0.702  1.00 53.66           O
HETATM 5317  O   HOH S 283     -52.830 -27.782  -8.152  1.00 52.23           O
HETATM 5318  O   HOH S 284     -76.297 -49.712 -46.183  1.00 61.89           O
HETATM 5319  O   HOH S 285     -79.515 -28.215 -39.143  1.00 52.06           O
HETATM 5320  O   HOH S 286     -57.524 -19.370 -69.267  1.00 56.71           O
HETATM 5321  O   HOH S 287     -86.947   1.486 -45.316  1.00 64.06           O
HETATM 5322  O   HOH S 288     -54.142 -34.980 -10.346  1.00 43.46           O
HETATM 5323  O   HOH S 289     -68.881 -12.462 -57.685  1.00 55.99           O
HETATM 5324  O   HOH S 290     -61.000 -15.392 -66.308  1.00 56.55           O
HETATM 5325  O   HOH S 291     -75.952 -51.825 -48.249  1.00 64.84           O
HETATM 5326  O   HOH S 292     -53.887 -11.028 -54.537  1.00 57.37           O
END
```

[2269]

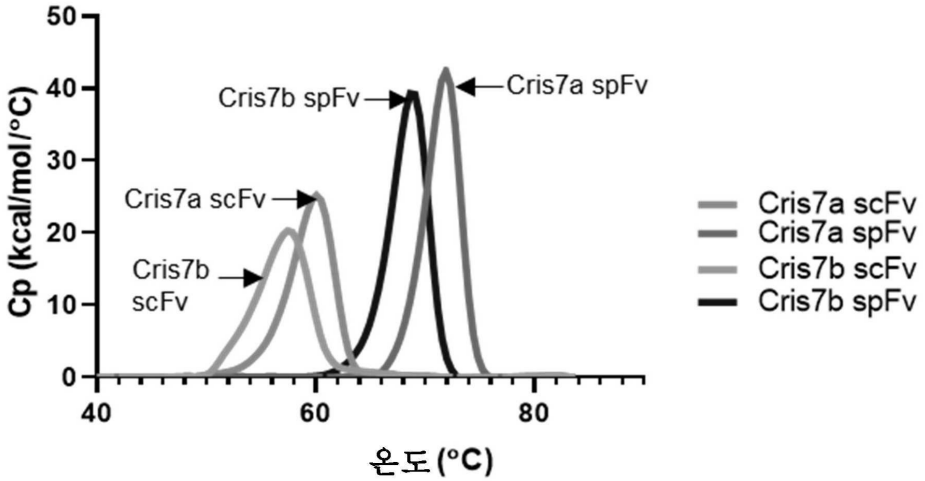
[2270] 당업자는 광범위한 본 발명의 개념으로부터 벗어나지 않고서 전술된 실시 형태에 변경이 이루어질 수 있음을 인식할 것이다. 따라서, 본 발명은 개시된 특정 실시 형태로 제한되는 것이 아니라, 본 명세서에 의해 한정되는 바와 같은 본 발명의 사상 및 범주 내의 변형을 포함하도록 의도됨이 이해된다.

도면

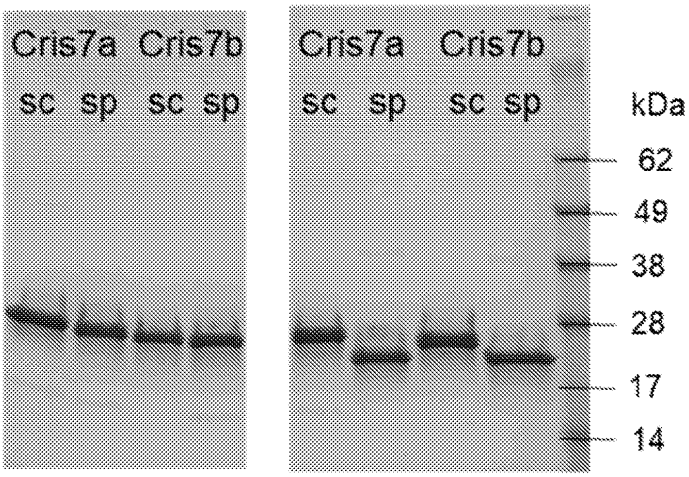
도면1


BCMB749
(BCMA)
B219
(CD3)
링커
스테이플

도면2a

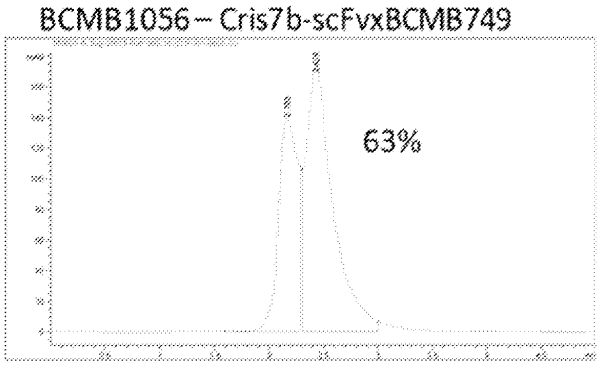

50
40
30
20
10
0
Cp (kcal/mol/°C)
Cris7b spFv
Cris7a spFv
Cris7a scFv
Cris7b
scFv
40
60
80
온도 (°C)
Cris7a scFv
Cris7a spFv
Cris7b scFv
Cris7b spFv

도면2b

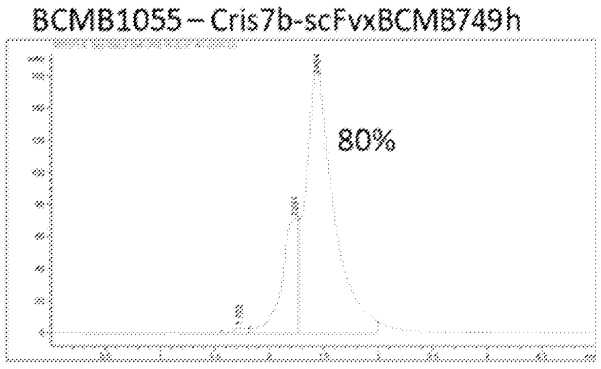


환원성 비환원성

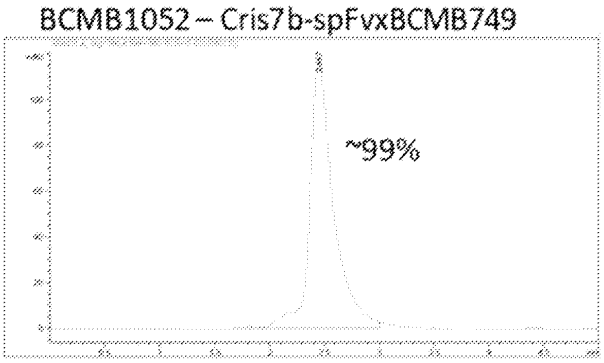
도면3a



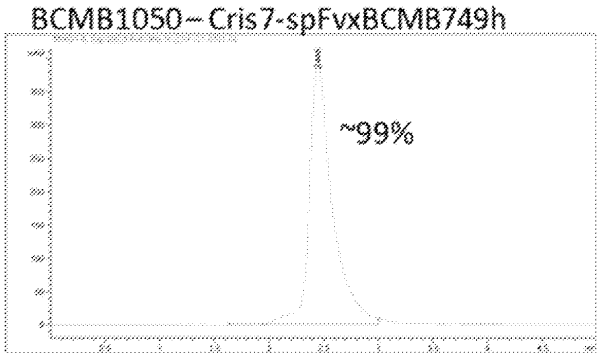
도면3b



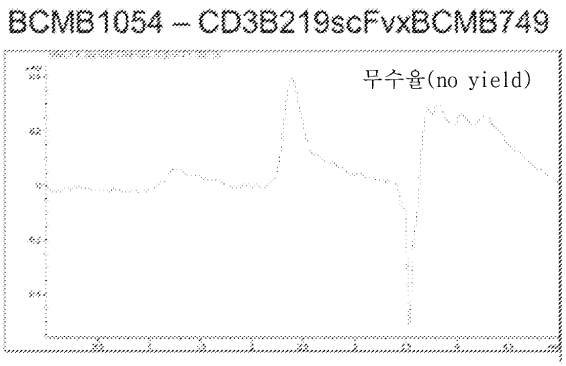
도면3c



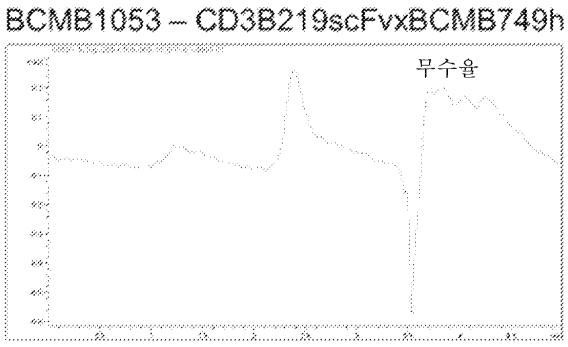
도면3d



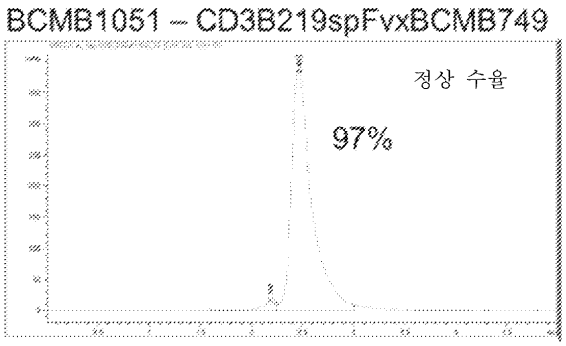
도면4a



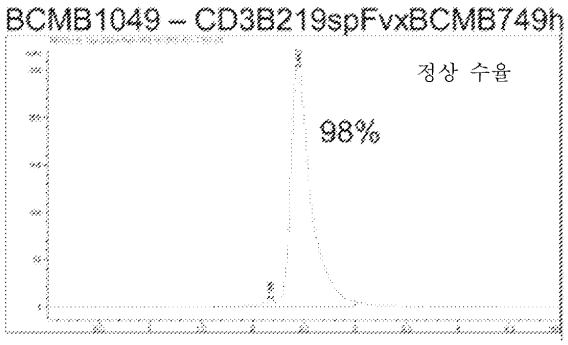
도면4b



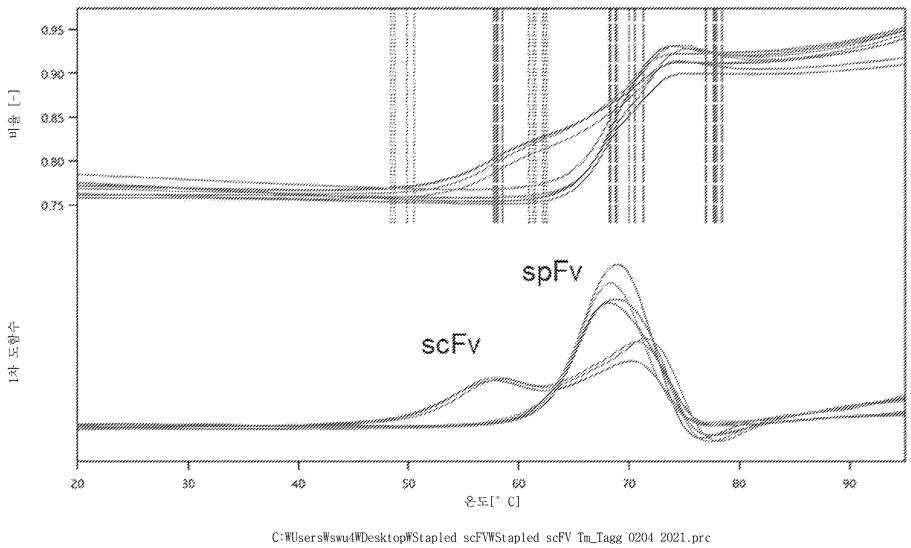
도면4c



도면4d

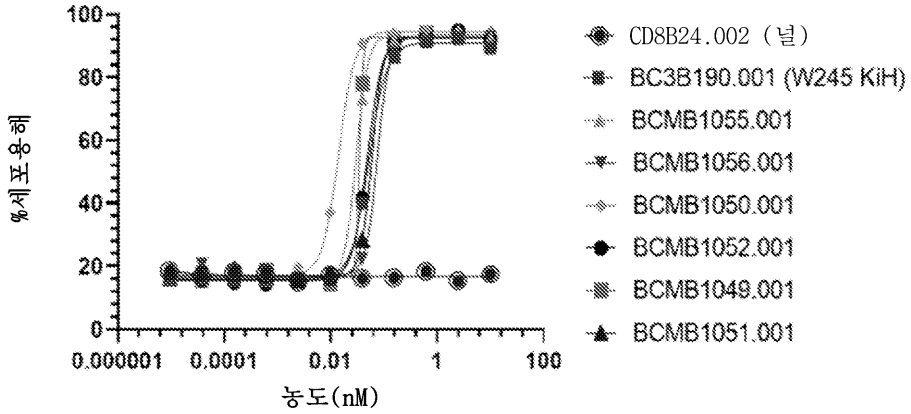


도면5



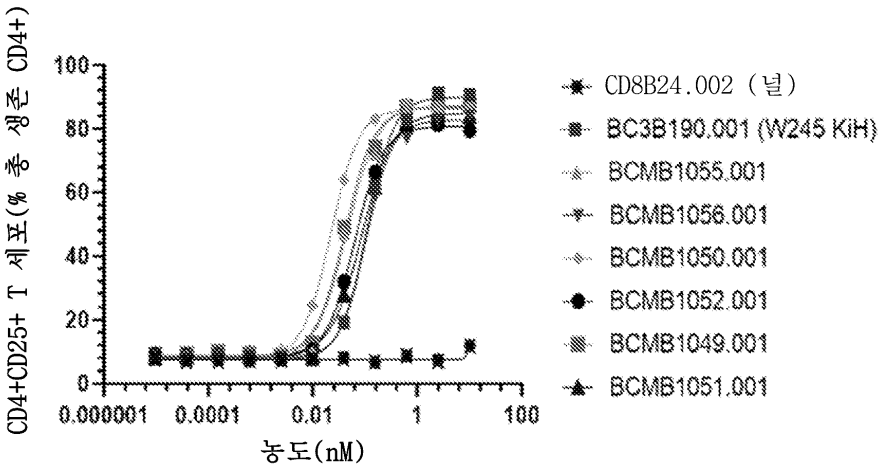
도면6

사멸된 표적 (H929-GFP+)_모든 공여자 조합



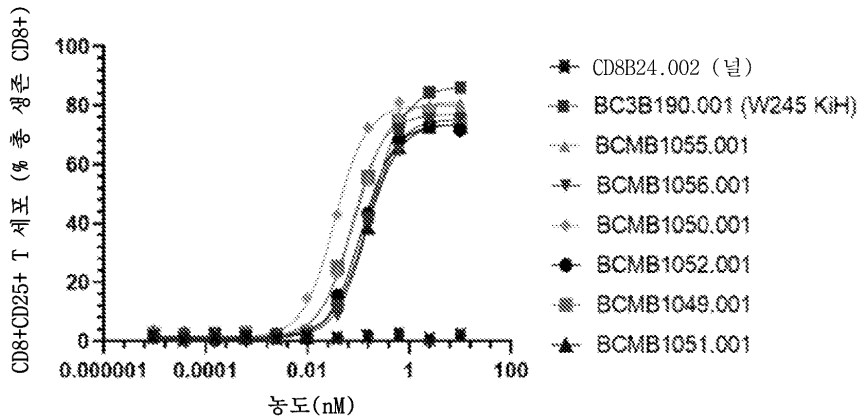
도면7

CD4/CD25+ %CD4+ 이펙터의 활성화_모든 공여자 조합

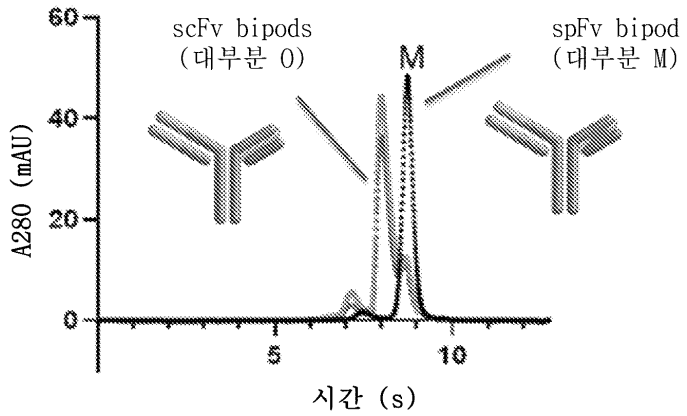


도면8

CD8/CD25+ %CD8+ 이펙터의 활성화_모든 공여자 조합

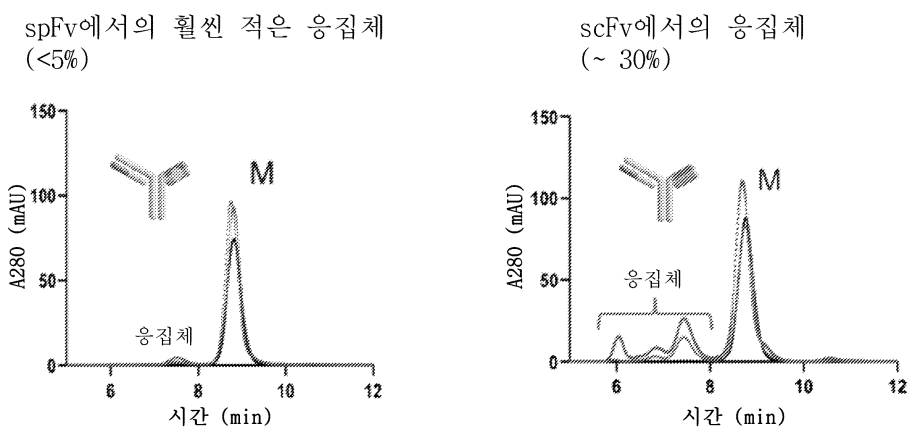


도면9



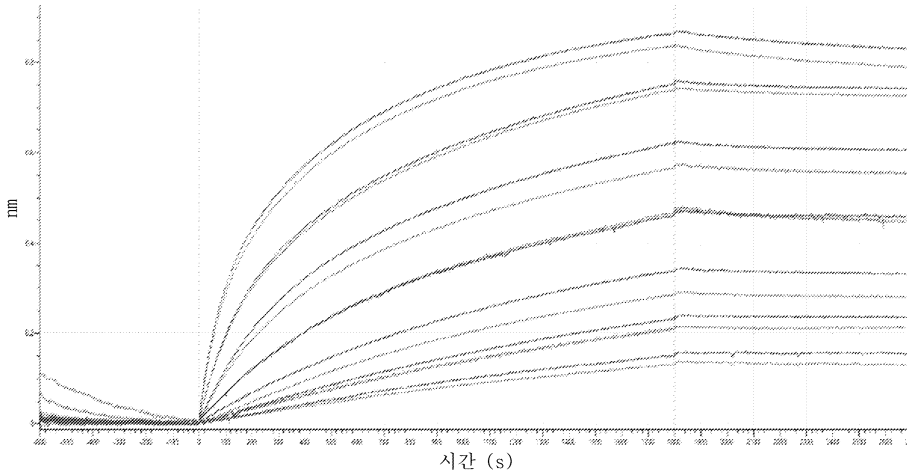
M: Bipod 단량체
O: Bipod 올리고머(응집체)

도면10

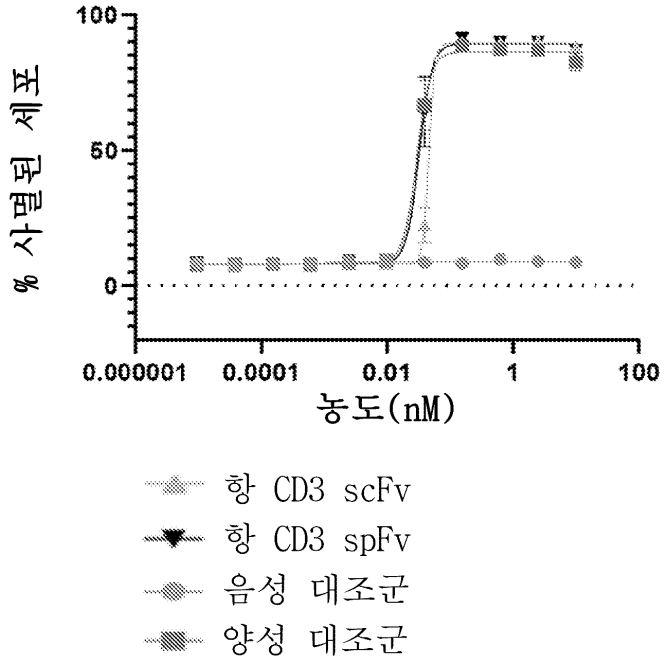


6 wk @40° C 스트레스 연구(순도 >98.5%에서 시작하여 약 60 mg/ml, SEC 분석)

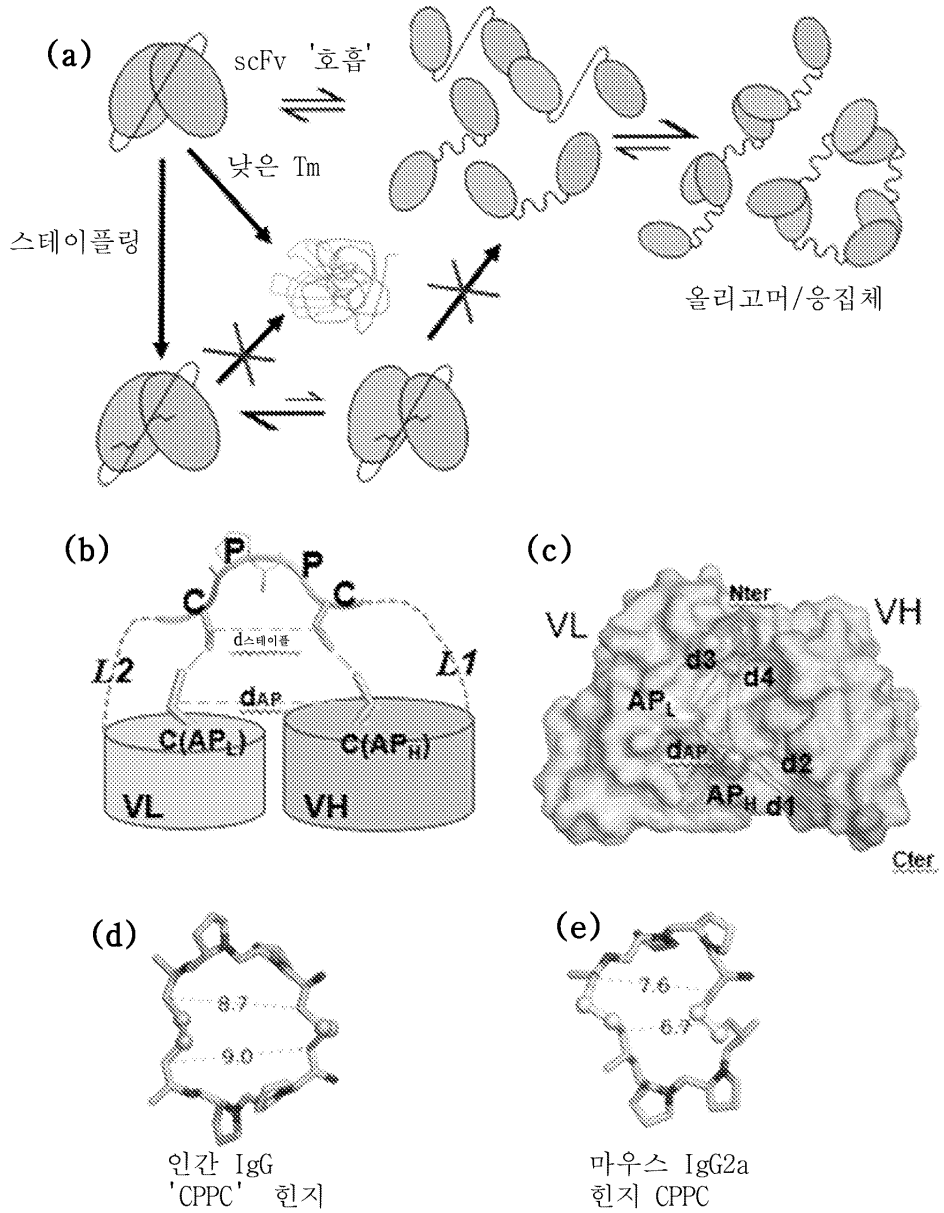
도면11



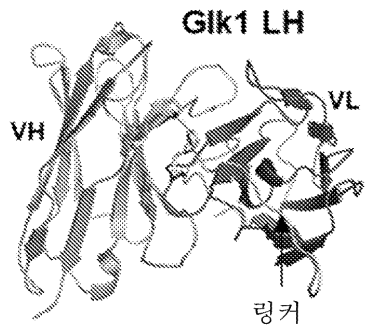
도면12


100
50
0
% 사멸된 세포
0.000001
0.0001
0.01
1
100
농도(nM)
항 CD3 scFv
항 CD3 spFv
음성 대조군
양성 대조군

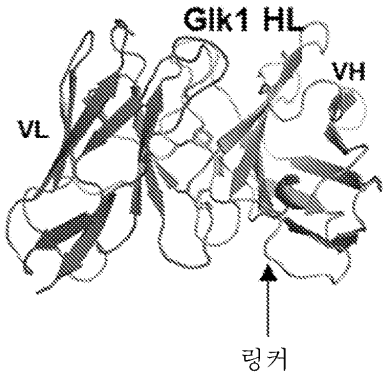
도면13


(a)
scFv '호흡'
낮은 Tm
스테이플링
올리고머/응집체
(b)
P
P
C
C
dAP
L2
L1
C(APL)
C(APH)
VL
VH
(c)
Nter
VL
VH
d3
d4
APL
dAP
d2
APH d1
Cter
(d)
8.7
9.0
인간 IgG
'CPPC' 힌지
(e)
7.6
8.2
마우스 IgG2a
힌지 CPPC

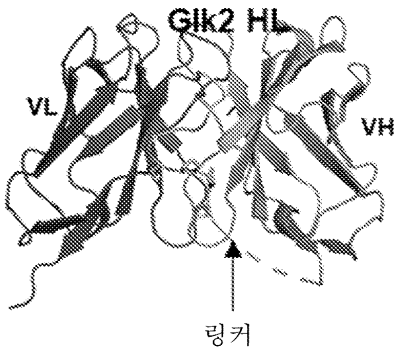
도면14a


Glk1 LH
VH
VL
링커

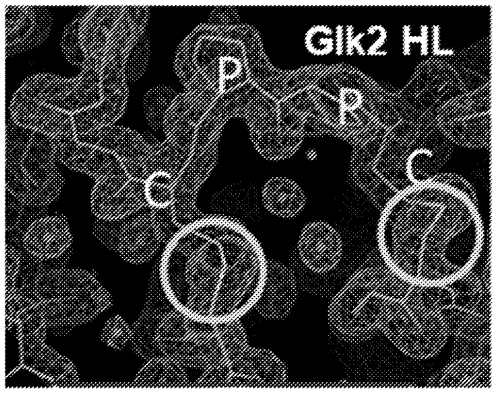
도면14b



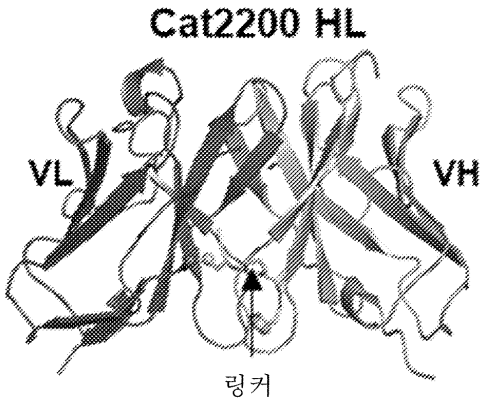
도면14c



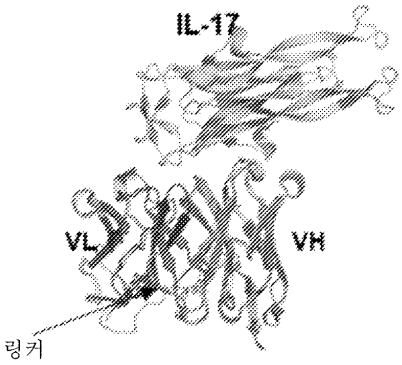
도면14d



도면14e



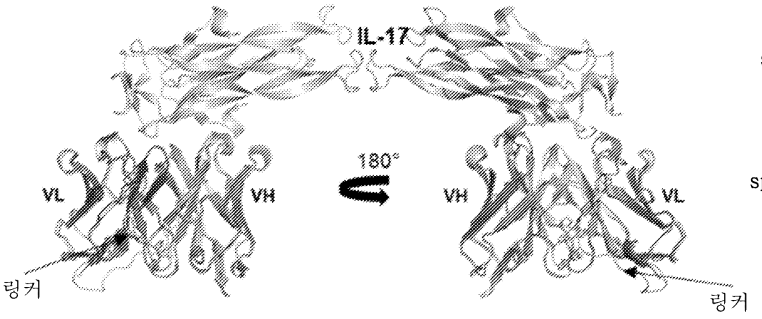
도면14f



scFv LH 결합

spFv HL 비결합

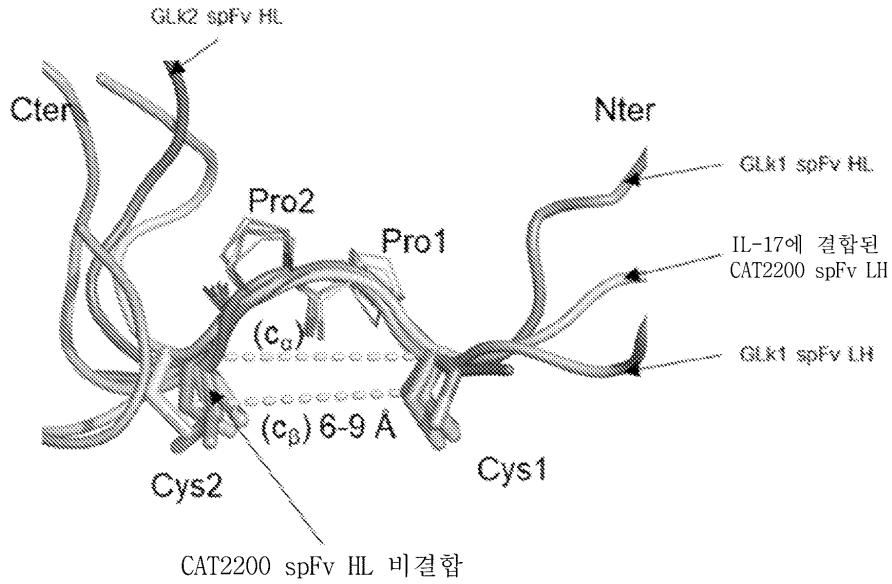
도면14g



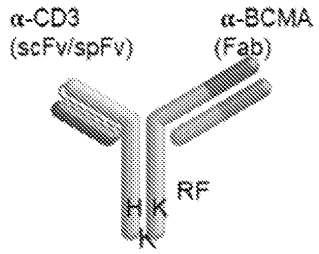
spFv LH 결합

spFv HL 비결합

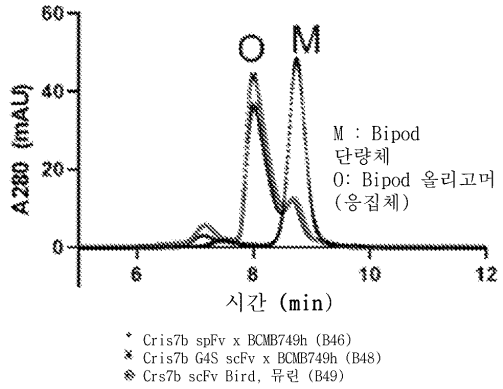
도면15



도면16a

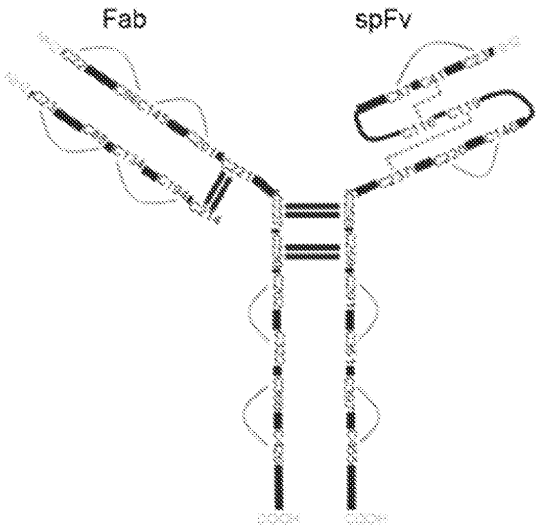


도면16b

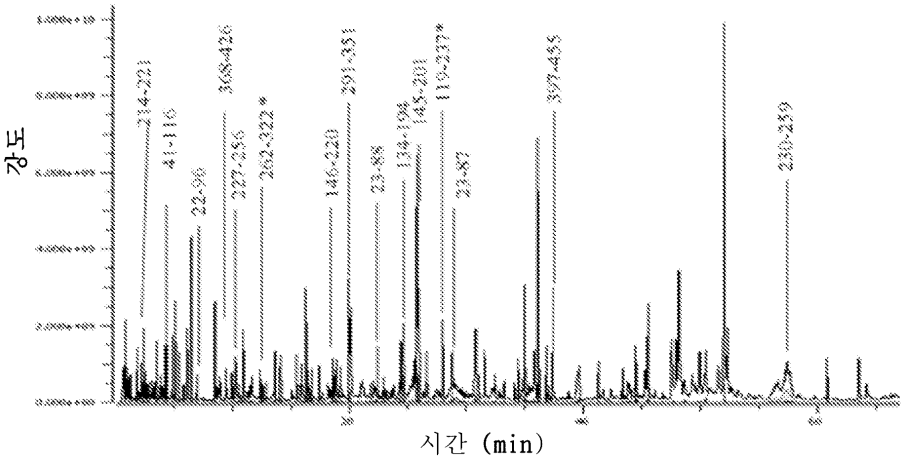


* Cris7b spFv x BCMB749h (B46)
※ Cris7b G4S scFv x BCMB749h (B48)
※ Crs7b scFv Bird, 뮤린 (B49)

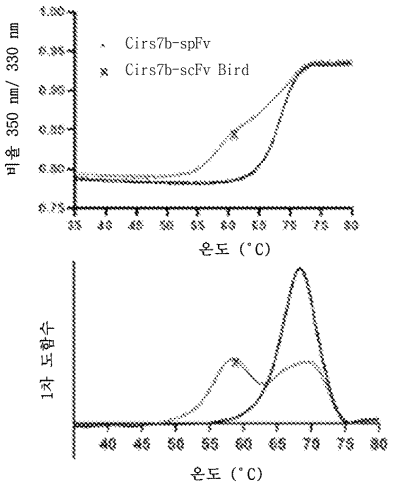
도면16c



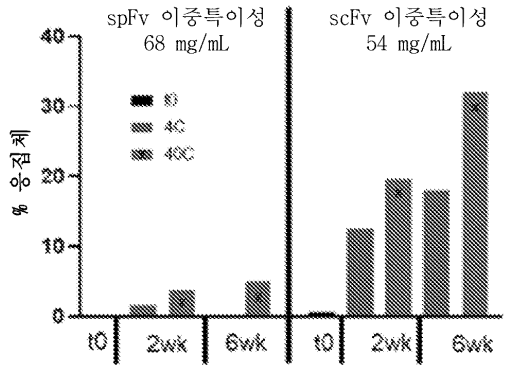
도면16d



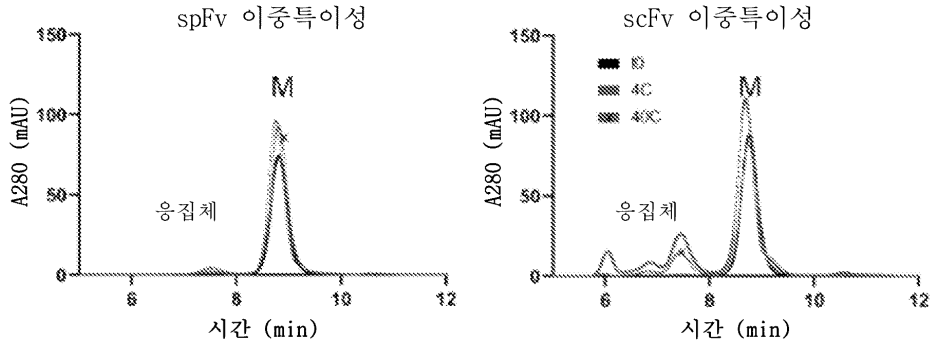
도면17a



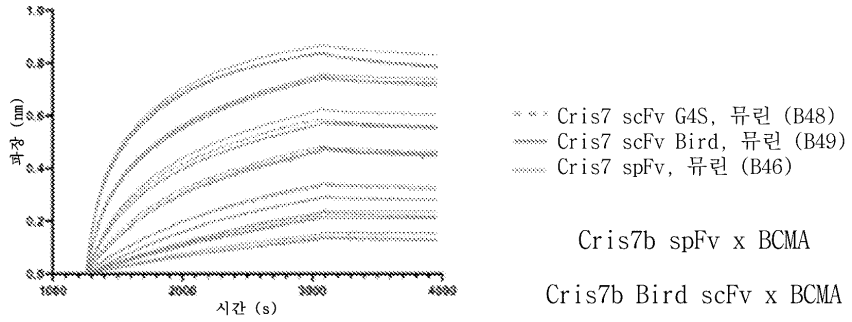
도면17b



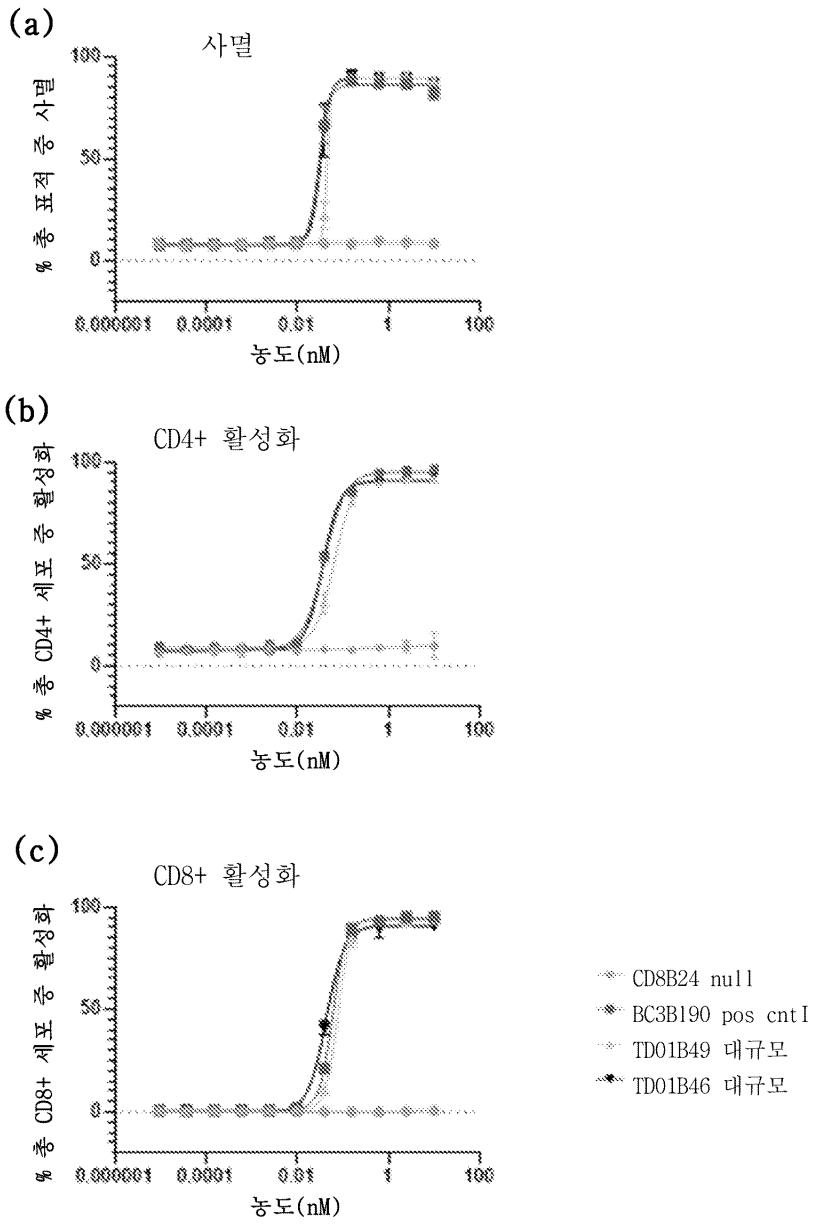
도면17c



도면17d



도면18


(a)
사멸
% 총 표적 중 사멸
100
50
0
0.000001
0.0001
0.01
1
100
농도(nM)
(b)
CD4+ 활성화
% 총 CD4+ 세포 중 활성화
100
50
0
0.000001
0.0001
0.01
1
100
농도(nM)
(c)
CD8+ 활성화
% 총 CD8+ 세포 중 활성화
100
50
0
0.000001
0.0001
0.01
1
100
농도(nM)
CD8B24 null
BC3B190 pos cntl
TD01B49 대규모
TD01B46 대규모

도면19

(a)

LH 배향
VL(42C) - 링커 - VH(105C)
링커: $(X)_nCPPC(X)_m$, X=aa (대부분의 경우 G 또는 S), n=7-9, M=4-5

HL 배향
VH(43C) - 링커 - VL(100C)
링커: $(X)_nCPPC(X)_m$, X=aa (대부분의 경우 G 또는 S), n=7-9, M=4-5

(b)

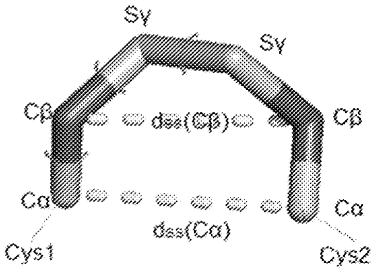
```
VL                  10         20         30abc        40         50         60
Glk1        DIQMTQSPSSLSASVGDRVTITCRASQSIS---SYLNWYQQKPGKAPKLLIYAASSLQSGVPS
Glk2        EIVLTQSPGTLSLSPGERATLSCRASQSVSS--SYLAWYQQKPGQAPRLLIYGASSRATGIPD
CAT2200     MFMLTQPHS-VSESPGKTVTISCTRSSGSLAN-YYVQWYQQRPGSSPTIVIFANNQRPSGVPD
                                                                  1

                  ab  70         80         90      a  100
Glk1        RFSGSG--SGTDFTLTISSLQPEDFATYYCQQSYSTP-LTFGGGTKVEIK
Glk2        RFSGSG--SGTDFTLTISRLEPEDFAVYYCQQDYGFP-WTFGQGTKVEIK
CAT2200     RFSGSIDSSSNSASLTISGLKTEDEADYYCQTYDPYS-VVFGGGTKLTVL
                                                    2

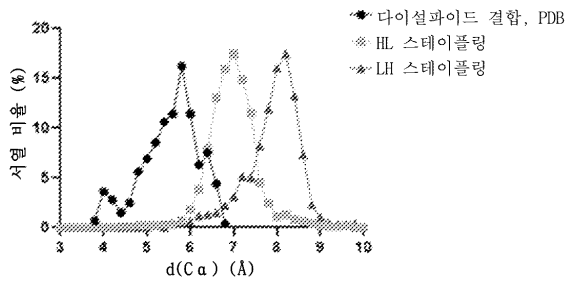
VH                  10         20         30 ab        40         50  abc       60
Glk1        EVQLLESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFTFSS--YAMSWVRQAPGKGLEWVSAISG--SGGSTYYA
Glk2        EVQLVQSGAEVKKPGESLKISCKGSGYSFTS--YWISWVRQMPGKGLEWMGIIDP--SDSDTRYS
CAT2200a    EVQLLESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFGFSS--YAMSWVRQAPGKGLEWVSAISG--SGGSTYYA
                                                    3

                    70         80  abc    90        100abcdef       110
Glk1        DSVKGRFTISRDNSKNTLYLQMNSLRAEDTAVYYCAKYDGIYGEL-----DFWGQGTLVTVSS
Glk2        PSFQGQVTISADKSISTAYLQWSSLKASDTAMYYCARGDGSTDL------DYWGQGTLVTVSS
CAT2200a    DSVKGRFTISRDNSKNTLYLQMNSLRAEDTAVYYCARDLIHGVT------RNWGQGTLVTVSS
                                                              1
```

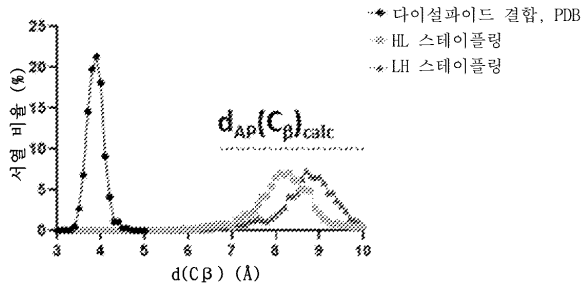
도면20a



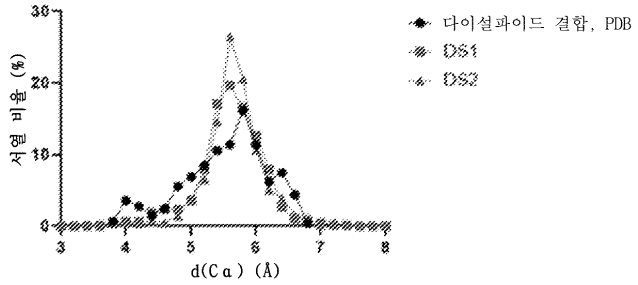
도면20b



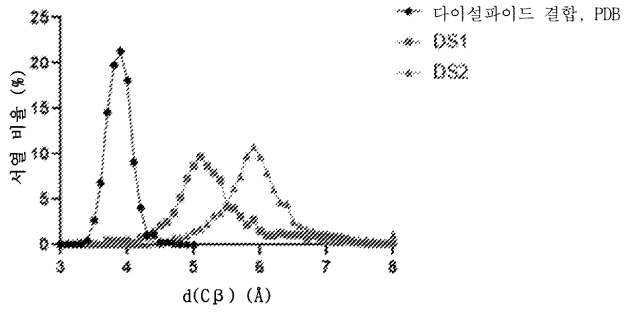
도면20c



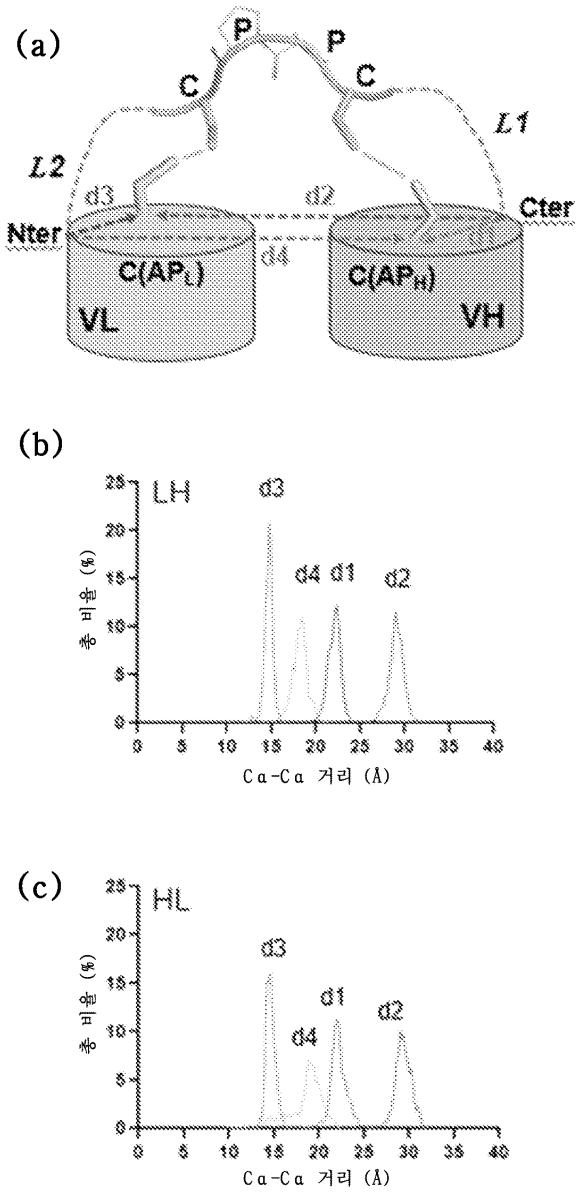
도면20d



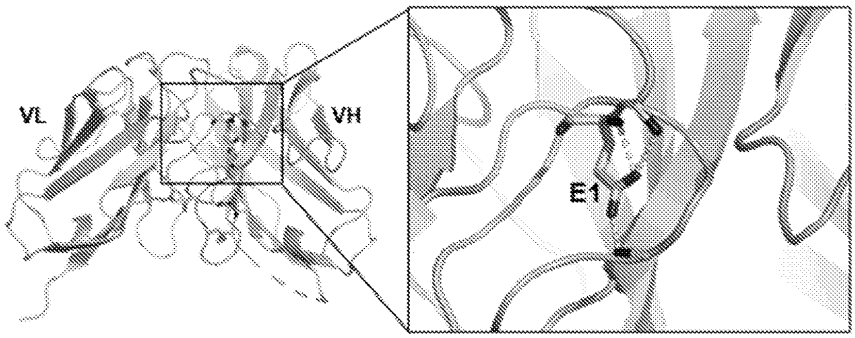
도면20e



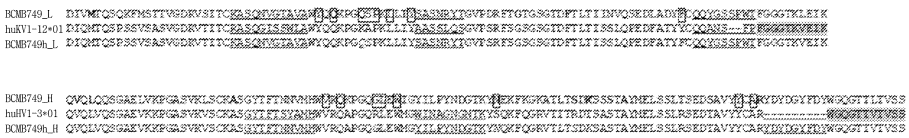
도면21


(a)
P
P
C
C
L1
L2
d3
d2
Cter
Nter
d4
C(APL)
C(APH)
VL
VH
(b)
LH
d3
d4
d1
d2
총 비율 (%)
Cα-Cα 거리 (Å)
(c)
HL
d3
d1
d4
d2
총 비율 (%)
Cα-Cα 거리 (Å)

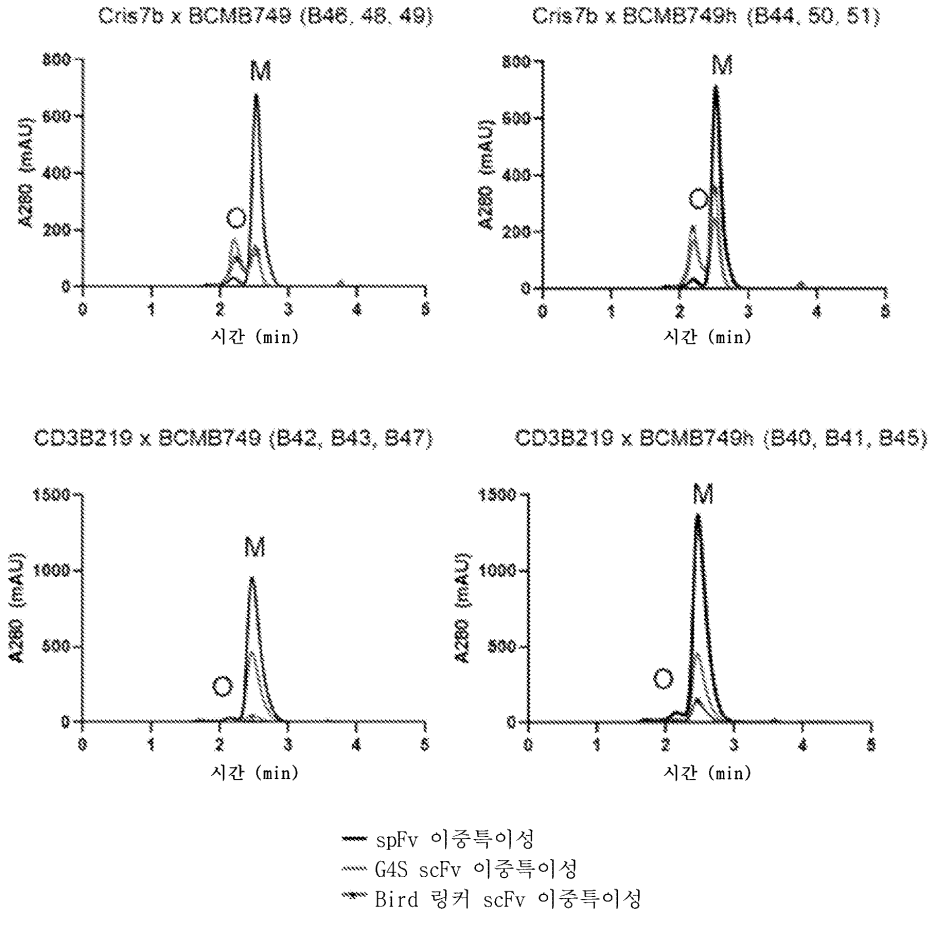
도면22


VL
VH
E1

도면23



도면24

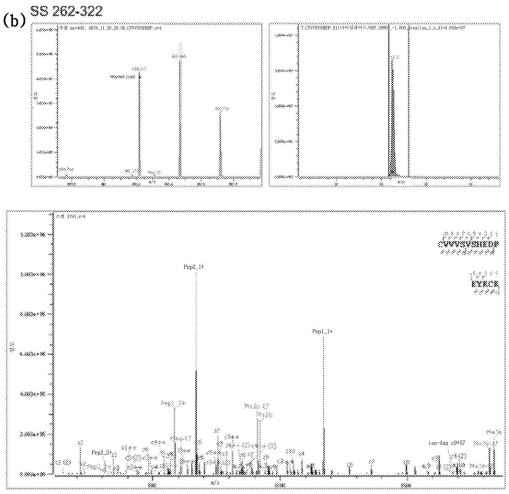

Cris7b x BCMB749 (B46, 48, 49)
Cris7b x BCMB749h (B44, 50, 51)
CD3B219 x BCMB749 (B42, B43, B47)
CD3B219 x BCMB749h (B40, B41, B45)
A280 (mAU)
시간 (min)
M
spFv 이중특이성
G4S scFv 이중특이성
Bird 링커 scFv 이중특이성

도면25

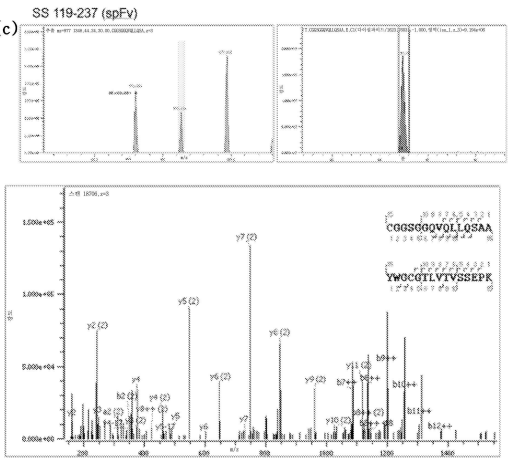
(a)

샘플	펩티드 1	펩티드 2	S-S 결합	M (Obs)	M (Calc)	z	단편화
Fab	K.LSC.K	S.AVYYCA.R	22-96	1007.4092	1007.4092	2	CID
spFv	R.VTITCS.A	A.TYYCQQWSRNPP.T	23-87	2161.9587	2161.9561	2	HCD
LC	T.TVGDRVSITCK.A	A.DYFCQQYGSSP.W	23-88	2469.0938	2469.0941	4	ETD
spFv	G.CVPKRLIY.D	G.SGGCPP.C	41-116	1504.7522	1504.753	2	HCD
spFv	P.CGG.S	P.YWGCG.T	119-237	817.2522	817.2523	2	CID
LC	S.WCLLNNFYP.R	K.VYACEVTHQG.L	134-194	2284.0643	2284.0657	3	HCD
Fab	A.LGCLVK.D	G.TQTYICNVNHK.P	145-201	1948.9865	1948.9863	4	HCD
spFv	L.ISCK.G	K.ASDTAMYYCA.R	146-220	1541.6200	1541.6200	2	HCD
Fc	K.THTCPP.C	K.SSDKTHTCPP.C	227-256	1723.7285	1723.7294	3	HCD
Fc	P.PCPA.P	P.CPAP.E	230-259	770.3089	770.3091	2	ETD
Fc	P.EVTCVVVSVSHEDP.E	K.EYKCKVSNK.A	262-322	2594.2374	2594.2356	4	HCD
Fc	S.CAVKGFYP.S	G.NVFSCS.V	368-426	1536.6742	1536.6741	2	HCD
Fc	K.NQVSLWCLVKGFYP.S	G.NVFSCS.V	397-455	2306.0873	2306.0864	3	HCD

(b) SS 262-322

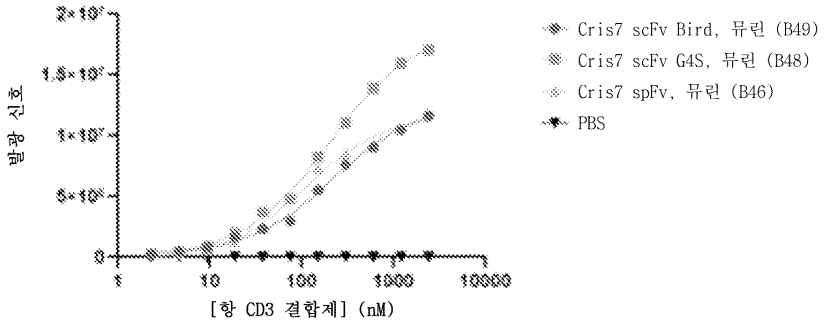


(c) SS 119-237 (spFv)

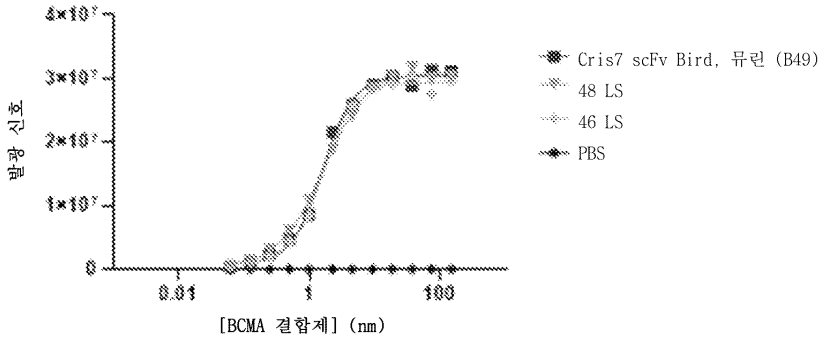


도면26

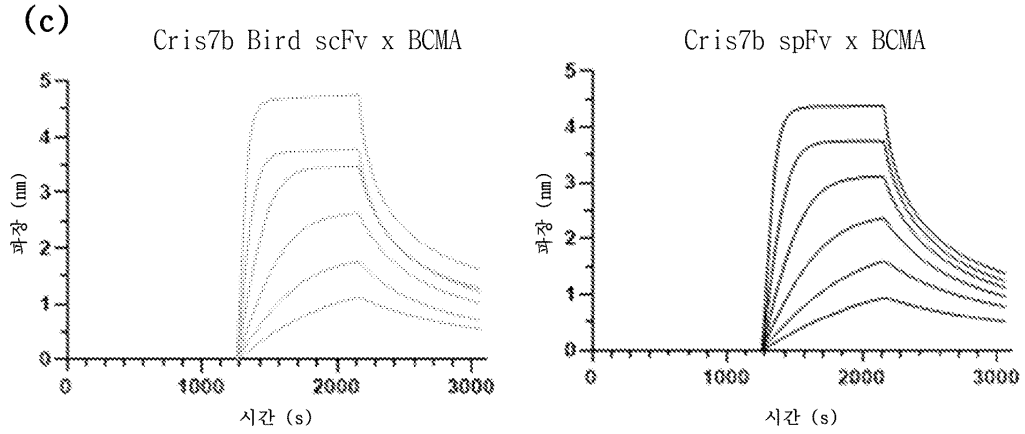
(a)


발광 신호
[항 CD3 결합제] (nM)
Cris7 scFv Bird, 뮤린 (B49)
Cris7 scFv G4S, 뮤린 (B48)
Cris7 spFv, 뮤린 (B46)
PBS

(b)


발광 신호
[BCMA 결합제] (nm)
Cris7 scFv Bird, 뮤린 (B49)
48 LS
46 LS
PBS

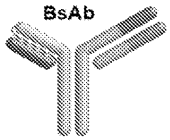
(c)


Cris7b Bird scFv x BCMA
Cris7b spFv x BCMA
파장 (nm)
시간 (s)

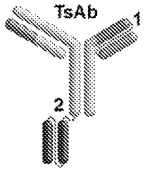
도면27

분자명	친화도 (nM)		% 응집체		주석
	표적 1	표적 2	4 ℃	40 ℃	
BsAb-1 sc	31.1 ± 22	해당 없음	27.2	21.4	2 wk @ 150 mg/ml
BsAb-1 sp	11.6 ± 6.9	해당 없음	0	1.4	2 wk @ 142 mg/ml
BsAb-2 sc	178 ± 61	해당 없음	15.4	17.4	2 wk @ 150 mg/ml
BsAb-2 sp	177 ± 90	해당 없음	0	1.2	2 wk @ 150 mg/ml
BsAb-3 sc	104 ± 15	해당 없음	0.9	29.6	2 wk @ 152 mg/mL
BsAb-3 sp	135 ± 21	해당 없음	0.7	2.4	2wk @ 155 mg/mL
BsAb-4 sc	134 ± 62	해당 없음	0	17.9	2wk @150 mg/mL
BsAb-4 sp	110 ± 48	해당 없음	0	0.4	2wk @ 150 mg/mL
TsAb-1 sc, sc	0.169	235.9*	15	>40.0	4 wk @ 120 mg/ml
TsAb-1 sp, sp	0.184	69.8*	<6	<5.0	4 wk @ 120 mg/ml

BsAb: 이중특이성 항체



TsAb: 삼중특이성 항체



서 열 목 록 (첨부)



아이콘을 클릭하시면 서열목록 파일이 열립니다.

본 공보 PDF는 첨부파일을 가지고 있습니다. Acrobat Reader PDF뷰어를 제공하지 않는 브라우저(크롬, 파이어폭스, 사파리 등)의 경우 첨부파일 열기가 제한되어 있으므로 Acrobat Reader PDF뷰어 설치 후 공보 PDF를 다운로드 받아 해당 뷰어에서 조회해주시기 바랍니다.