

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5444001号
(P5444001)

(45) 発行日 平成26年3月19日(2014.3.19)

(24) 登録日 平成25年12月27日(2013.12.27)

(51) Int.Cl.	F I
C 1 2 P 21/02 (2006.01)	C 1 2 P 21/02 Z N A C
C 1 2 N 15/09 (2006.01)	C 1 2 N 15/00 A
C O 7 K 14/47 (2006.01)	C O 7 K 14/47
G O 6 F 19/00 (2011.01)	G O 6 F 19/00 6 O O
G O 1 N 33/15 (2006.01)	G O 1 N 33/15 Z

請求項の数 2 (全 93 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2009-546784 (P2009-546784)	(73) 特許権者	501374390
(86) (22) 出願日	平成20年1月29日(2008.1.29)		テクノロジアン・トゥトキムスケスクス・
(65) 公表番号	特表2010-521138 (P2010-521138A)		ブイティティ
(43) 公表日	平成22年6月24日(2010.6.24)		フィンランド共和国、エフアイー・O2O
(86) 国際出願番号	PCT/FI2008/050026		44 ブイティティ、ブオリミエヘン
(87) 国際公開番号	W02008/092992		ティエ 3
(87) 国際公開日	平成20年8月7日(2008.8.7)	(74) 代理人	100116838
審査請求日	平成22年12月22日(2010.12.22)		弁理士 渡邊 潤三
(31) 優先権主張番号	20075059	(72) 発明者	ユウルハ、シルパ
(32) 優先日	平成19年1月29日(2007.1.29)		フィンランド国、エフアイー・O221O
(33) 優先権主張国	フィンランド(FI)		エスポー、ランシボルッティ 1 ビー
(31) 優先権主張番号	60/887,862		7
(32) 優先日	平成19年2月2日(2007.2.2)		
(33) 優先権主張国	米国(US)		

前置審査

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 アレルゲン結合性 I g E モノクローナル抗体および低アレルギー性物質の製造方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

アレルゲンに特異的な I g E 抗体に対する親和性が低下した 修飾 β-ラクトグロブリン を製造するための方法であって、

(a) 未修飾 β-ラクトグロブリン をコードする核酸配列を修飾し、それにより、修飾した核酸から発現される 修飾 β-ラクトグロブリン において、該 未修飾 β-ラクトグロブリン の平面状（平坦状）I 型表面の構造が改変され、且つ該 未修飾 β-ラクトグロブリン 特異的な I g E 抗体の該 修飾 β-ラクトグロブリン に対する親和性が、未修飾 β-ラクトグロブリン に対する親和性の 10 分の 1 以下に低下し、そして

(b) 該修飾核酸から 修飾 β-ラクトグロブリン を発現させるか、または該修飾核酸を用いて 修飾 β-ラクトグロブリン を製造することを含む、

該平面状（平坦状）表面は、面積が $600 \sim 900 \text{ \AA}^2$ であり、且つ、抗体-β-ラクトグロブリン免疫複合体に含まれる 未修飾 β-ラクトグロブリン 由来アミノ酸である Trp19-Tyr20、Val43-Lys47、Leu57-Gln59、Cys66-Gln68、Pro126-Glu127 および Thr154-Glu157 の構造座標または三次元座標によって定義されるものであることを特徴とする方法。

【請求項 2】

以下の工程 (a) ~ (d) を包含することを特徴とする、請求項 1 に記載の方法。

(a) 未修飾 β-ラクトグロブリン に含まれる潜在的な I g E 結合部位を構造解析また

10

20

は分子モデリングによって検出し、

(b) 抗体-β-ラクトグロブリン免疫複合体に含まれる未修飾β-ラクトグロブリン由来アミノ酸であるTrp19-Tyr20、Val43-Lys47、Leu57-Gln59、Cys66-Gln68、Pro126-Glu127およびThr154-Glu157の三次元座標によって定義される、面積が600~900 Å²の平面状または平坦状の表面が該潜在的なIgE結合部位に含まれるか否かを、該未修飾β-ラクトグロブリンの三次元構造の計算機解析によって決定し、該平面状または平坦状の表面が検出された場合には、更に以下の工程を実施する：

(c) 該未修飾β-ラクトグロブリンをコードする核酸配列を修飾し、それにより、修飾した核酸から発現される修飾β-ラクトグロブリンにおいて、該未修飾β-ラクトグロブリンの平面状または平坦状表面の構造が改変され、且つ該未修飾β-ラクトグロブリン特異的なIgE抗体の該修飾β-ラクトグロブリンに対する親和性が、未修飾β-ラクトグロブリンに対する親和性の10分の1以下に低下し、そして

(d) 上記工程(c)で得た該修飾核酸から修飾β-ラクトグロブリンを発現させるか、または該修飾核酸を用いて修飾β-ラクトグロブリンを製造する。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明はタンパク質工学技術に関する。さらに詳細には、本発明は、非連続的なアレルゲン性エピトープである面積が600~900 Å²の平面状表面に結合する、ヒトIgE抗体およびその誘導体、例えば、牛乳β-ラクトグロブリンに対して高い親和性と特異性をもって結合するIgE抗体に関する。また、本発明は、I型相互作用を担う、上記のアレルゲン結合性モノクローナル抗体を作製したり改変したりするための方法、およびこのような抗体やその誘導体の使用方法にも関する。免疫診断分野での抗体やその誘導体の使用は、生物学的サンプルおよび原料サンプル中のアレルゲン性物質の定性的測定と定量的測定および除去を可能にし、さらにアレルゲンに対するフォーカスドIgEライブラリーの構築のために使用すると、アレルゲン特異的モノクローナル抗体の開発を可能にする。免疫療法において本発明は、アレルゲンのアミノ酸残基の修飾によって、アレルゲン性物質のI型表面相互作用の遮断を可能とする。低アレルギー性の変異型は、平面状（平坦状）エピトープ表面の数個（1~5個）のアミノ酸残基を嵩高の残基（例えば、Arg、Tyr、Lys、Trp）に変異させることで得られる。変異に用いる残基は、いずれも側鎖が外側の溶媒に向けられているものであるため、アレルゲンの基本構造の変化は最小限に抑えられる。変異の目的は、IgE抗体が結合する平坦状表面を修飾して凸状表面にすることにより、IgE抗体の結合を防止することである。結果として得られる修飾アレルゲンは、アレルギー患者に特定アレルゲンに対する寛容状態を誘導するために使用することができる。本発明は、タンパク質構造表面の突出領域以外の領域に対して結合特異性を示す治療用および診断用の標的に対する、ヒトIgE V_H領域由来の抗体の開発を可能にする。さらに本発明は、抗体のI型アレルゲン性エピトープに対する結合を遮断することが可能な物質のスクリーニングまたは分子モデリングのための手段を提供する。本発明においては、イムノアッセイ用試薬として使用できるだけの高い親和性と特異性をもってアレルゲン性β-ラクトグロブリンに結合するヒトIgE抗体断片およびその誘導体の開発、特徴付けおよび構造決定についても記載する。

【背景技術】

【0002】

世界の人口のおよそ20%がアレルギーに苦しんでいる。このため、アレルギーは深刻さの増している健康問題である。アレルギーとは、空気、食物または水に存在する通常は害のない物質に対する過敏反応である（Corry and Kheradmand, 1999）。新規な外来の異質物が、それを体内から排除することを目的とする反応、つまりアレルギー反応を引き起こす。即時型またはI型過敏反応とも呼ばれるIgE仲介アレルギー反応においては、生体が外来物質であるアレルゲンに初めて曝された時に、IgE産生B細胞が可溶性IgE分子の産生を始める。そして可溶性IgE分子は、種々の細胞、最も重要なものとしては

10

20

30

40

50

マスト細胞および好塩基性細胞、の表面に存在する高親和性 I g E 受容体に結合する。生体が同じ外来物質に再び遭遇すると、受容体結合 I g E 分子の交差結合がアレルゲンによって生じ、その結果、細胞が活性化されて、アレルギー反応の徴候および症状を誘発する毒性物質であるヒスタミンなどが放出される。

【0003】

牛乳アレルギー（CMA）は、生後2年の間に乳児および幼児に見られる、臨床的に重要な望ましくない食物反応の最も一般的な原因である（Savilahti, 1981、Host and Halken, 1990、Saarinen et al., 1999）。CMAは牛乳タンパク質に対する強度の I g E 応答および皮膚と胃腸管の臨床症状、例えば、アトピー性湿疹、嘔吐や下痢、によって特徴付けられる（Vaarala et al., 1995、Saarinen, 2000）。呼吸管の症状およびアナフィラキシーショックの可能性もある（Host and Halken, 1990、Schrandt et al., 1993、Hill et al., 1999、Vanto et al., 1999、Saarinen, 2000）。牛乳は幼い児童にとって重要なエネルギー源（最大50%）であり、非乳性品で簡単に置き換えることのできるものではないため、CMAは児童にとって深刻な問題である。牛乳アレルギー児童の約85%が3歳までにアレルギーを克服するが、CMAがその後消失するのは、最大でも年長児童の3分の1である（Sampson and Scanlon, 1989）。

【0004】

牛乳に含まれる主要なアレルゲンの1つが、リポカリンというタンパク質ファミリーに属するβ-ラクトグロブリンである。リポカリンは、一群の小さなリガンド結合性タンパク質からなり、その大部分が、Mus m1やRat n1（マウスおよびラットの尿タンパク質）およびドイツゴキブリアレルゲンBla g4などの呼吸器系アレルゲンである（Rouvinen et al., 2001）。β-ラクトグロブリンは、天然では36kDの二量体の形態で存在し、各サブユニットが162アミノ酸からなる。β-ラクトグロブリンについては、合計6種の遺伝的変異型が配列の違いに基づいて同定されている。最も多く存在する変異型Aと変異型Bとの違いは、64位（Asp → Gly）と118位（Val → Ala）の違いのみである（Godovac-Zimmermann and Braunitzer, 1987）。β-ラクトグロブリンの三次元構造は、X線回析によって決定されている（Sawyer L. et al., 1985、Brownlow, S. et al., 1997）。

【0005】

I g E抗体はアレルゲン性エピトープを特異的に認識するので、臨床および免疫学的診断において複合材料のアレルゲン濃度を検出および決定するために有用である。さらに、本発明によれば、アレルゲン性エピトープは、通常、タンパク質の免疫原性エピトープとは異なる。このことは、ハイブリドーマ技術などの従来の方法による、アレルゲン性エピトープに特異的な結合を示すモノクローナル抗体の産生の妨げとなっている。アレルゲン特異的 I g E 抗体の開発がファージディスプレイ法によって可能なことが最近報告されている（Steinberger et al., 1996）。この方法は、臨床および診断に使用するためのアレルゲン特異的組み換え抗体を一定の質を保持しながら産生するための新たな手段を提供する。

【0006】

本発明の関連する技術的課題は、アレルゲン性ポリペプチド内の、I g E抗体に対する実際の結合部位を検出すること、およびこの情報の用途、例えば、ポリペプチドのアレルギー誘導性を低下させるための修飾である。この課題を解決するための従来の手段は米国特許願第2003/0175312号（Holm et al.）、WO 03/096869（Alk Abello A/S）およびJenkins et al., 2005（J. Allergy Clin. Immunol. 115:163-170）に開示されている。上記文献には、アレルゲン性ポリペプチドの推定 I g E 結合部位は、アレルゲン性ポリペプチドの保存性表面構造の配列解析によって検出できると記載されている。さらにUS 2005/0181446（Roggen et al.）およびHantusch et al., 2004（J. Allergy Clin. Immunol.）では、I g E 結合エピトープの探索にペプチドスキャン法を使用している。しかし、いずれの文献にも、本発明の方法、即ち、アレルゲン性ポリペプチドの I g E 結合部位を、実質的に平面状または平坦状の性質を有する新規な型の I g E エピトープの実験的三次元デー

タおよび分子モデリングデータに基づいて見いだす方法は開示されていない。MacCallum et al., 1996 (J. Mol. Biol. 262:732-745) は、抗体に平面状表面が存在することを開示するものの、修飾については抗体構造についてのみを教示し、抗原構造の修飾についての開示はない。さらにMacCallum et al.の開示は抗体と種々の異なる抗原全般（炭水化物やペプチドなど）に関するものであり、IgE抗体とアレルギー性ポリペプチドとの結合や、これらポリペプチドの表面構造については格別何も教示はない。

【0007】

発明の概要

本発明は、非連続的なアレルギー性エピトープである、面積が $600 \sim 900 \text{ \AA}^2$ の平面状I型表面に結合するIgE抗体とその誘導体、例えば、牛乳 β -ラクトグロブリンに対して高い親和性と特異性をもって結合するIgE抗体に関する。また、本発明は、表面構造のアミノ酸残基を修飾するか、表面に結合するミメトープを作製することにより、アレルギー物質によるI型相互作用の遮断を可能にする。

【0008】

さらに本願においては、アレルギー性 β -ラクトグロブリンに結合するヒトIgE抗体断片およびその誘導体の開発、特徴付けおよび構造決定を開示する。本発明のヒトIgE抗体断片およびその誘導体は、生物学的試料中の β -ラクトグロブリンを定性的および定量的に測定するために設計したイムノアッセイ、 β -ラクトグロブリンの除去、アレルギー患者の免疫学的治療、および構造データに基づくフォーカスド抗体ライブラリーの構築のための試薬として用いるのに十分な高い親和性および特異性を有する。具体的には、本発明は、 β -ラクトグロブリンに特異的なヒトIgE抗体のファージディスプレイ法による選択、*E. coli*を用いて産生した改変抗体断片の結合特性の特徴付け、および抗体-アレルギー免疫複合体の構造決定について開示する。

【0009】

従って、本発明は、種々のイムノアッセイ法、ヒトの免疫療法およびフォーカスド抗体ライブラリーの構築に使用するための新規な試薬を提供する。また、本発明は、均一な品質を保持する上記の特異的な試薬の継続的な供給を保証し、ポリクローナル抗血清に固有のバッチ間の品質のばらつきという問題の排除を可能にした。これらの有用な効果によって、本発明は、均一な品質の、新規であり、特異的であり且つ経済的な免疫診断アッセイの製造を可能にする。

【0010】

上記から明かであるように、本発明の特定の目的の一つは、ヒトIgEモノクローナル抗体、その機能的断片または上記抗体の誘導体であって、生物学的サンプル中の β -ラクトグロブリンの定性的および定量的な測定に使用するのに十分な高い β -ラクトグロブリン親和性および特異性を有するものを提供する。さらに本発明は、上記抗体、断片または誘導体の免疫療法における用途も提供する。本発明の一価の抗体はアレルギー性 β -ラクトグロブリンに特異的な結合性を示す。

【0011】

本発明の他の目的の一つは、 β -ラクトグロブリン特異的抗体鎖をコードするcDNAクローンの提供のみならず、該クローンを発現させて β -ラクトグロブリン結合性の抗体、その断片または上記抗体の誘導体を産生するための構築物や産生方法を提供することである。

【0012】

本発明の更なる目的の一つは、 β -ラクトグロブリン結合性の抗体、その断片または上記抗体の誘導体を単独または組み合わせて用いることで、生物学的サンプル中の β -ラクトグロブリンを定性的および定量的に測定する方法を提供することである。さらに、本発明は、アレルギー患者の免疫療法に使用するための β -ラクトグロブリン結合性抗体、その断片または上記抗体の誘導体およびそれらの組み合わせを提供する。

【0013】

本発明の更なる目的の一つは、診断用のアレルギーに対するフォーカスドIgE抗体ラ

10

20

30

40

50

イブラリー、および治療用および診断用の標的のためのヒト I g E V H 領域誘導抗体ライブラリーを構築するために得られた構造データを使用する方法を提供することにあり、ここで得られる結合特異性は、タンパク質構造中の、表面の突出領域以外に位置する領域に対するものである。

【0014】

本発明の諸目的、諸特徴および諸利益は、添付の図面および詳細な説明の記載から明らかになる。しかしながら、以下の詳細な説明および実施例は本発明の好ましい態様を示すものの、あくまでもそれを例示しているに過ぎず、本発明の精神および発明の範囲内で行われる種々の変更および改良は、以下の詳細な説明より当業者には明らかであることを理解されたい。

10

尚、添付の図面において、構造を示す図面はいずれも実寸ではない。

【0015】

略称

c D N A	相補的デオキシリボ核酸	
C D R	相補性決定領域	
D N A	デオキシリボ核酸	
<u>E. coli</u>	<u>Escherichia coli</u>	
E L I S A	酵素免疫測定法	
F a b	特異的抗原結合性を有する断片	
F d	重鎖の可変ドメインおよび第一定常ドメイン	20
F v	特異的抗原結合性を有する抗体の可変領域	
I g E	免疫グロブリン E	
m R N A	メッセンジャーリボ核酸	
N M R	核磁気共鳴	
P C R	ポリメラーゼ連鎖反応	
R N A	リボ核酸	
s c F v	一本鎖抗体	
<u>supE⁻</u>	グルタミン挿入型アンバーサプレッサー t R N A を保持する 菌株の遺伝子型	
V _H	重鎖の可変領域	30
V _L	軽鎖の可変領域	

【0016】

発明の詳細な説明

以下に、本願明細書で使用した用語の一部について、その定義を述べる。「免疫グロブリン」、「重鎖」、「軽鎖」および「F a b」は欧州特許願第0125023号と同様に使用した。

【0017】

本明細書において、種々の活用形の「抗体」という用語は集合名詞として使用されており、免疫グロブリン分子および／または免疫グロブリン分子の免疫学的に活性な部位、即ち抗原結合部位またはパラトープを含有する分子の総称である。

40

【0018】

「抗原結合性部位」または「パラトープ」とは、抗体分子において、抗原に特異的に結合する構造を有する部位である。

【0019】

抗体の例としては、免疫グロブリン分子の一部分であってパラトープを含む部分、例えば F a b や F v が挙げられる。

【0020】

「F a b」（特異的抗原結合性を有する断片）とは、公知の方法によって実質的に完全な抗体をパパイニンによるタンパク質分解に付すことで得られる抗体の一部分である（例えば、米国特許第4,342,566号参照）。F a b 断片は遺伝子組み換え法によって産生するこ

50

ともでき、このような方法は当業者にはよく知られている（例えば、米国特許第4,949,778号参照）。

【0021】

「ドメイン」は、タンパク質の独立した折りたたみ部分を意味する。天然のタンパク質におけるドメイン間の境界に関する一般的な構造上の定義については、Argos, 1988を参照することができる。

【0022】

「可変ドメイン」または「F_v」とは、免疫グロブリン分子中に存在し、抗原またはハプテンの結合を担う領域である。通常この領域は、免疫グロブリン分子の軽鎖（L鎖）および重鎖（H鎖）のそれぞれのN末端から数えて約100個のアミノ酸からなる領域である。

10

【0023】

「一本鎖抗体」（scF_v）とは、抗体の重鎖および軽鎖のそれぞれの可変ドメインがリンカーペプチドを介して結合した連続したアミノ酸鎖であって、一本鎖mRNA分子（転写物）から合成されたものである。

【0024】

「リンカー」または「リンカーペプチド」とは、天然のまたは工学的に作製したタンパク質中の隣接する2つのドメインの間に存在するアミノ酸配列である。

【0025】

「β-ラクトグロブリン結合性抗体」とは、β-ラクトグロブリンを特異的に認識し、その可変ドメインを介した相互作用によって結合する抗体である。本明細書において使用する「特異的結合」、「特異的認識」や「β-ラクトグロブリンのアレルゲン性エピトープに対して結合特異性を有する」などの表現は、抗体、その断片または誘導体とその標的分子との間で生じる、バックグラウンド値が低く高親和性の結合（即ち、非特異的結合のない結合）を意味する。本発明の1つの態様は、β-ラクトグロブリン（配列番号8）のアレルゲン性エピトープに対する結合特異性を有するモノクローナル抗体、あるいは該特異性を有する抗体の機能的断片または誘導体である。

20

【0026】

「平面状（または平坦状）表面」とは、実施例8で定義した表面構造を意味する。

【0027】

上記抗体の断片であって、本発明の範囲に属するものの例としては、図4および図5に開示した、D1 IgE FabのscF_v断片が挙げられる。本発明の一つの好ましい態様においては、β-ラクトグロブリン結合性抗体の誘導体、例えば、Fab断片やscF_v断片、が提供される。さらにCDR配列または完全なV_LおよびV_H配列の変異体であって、結合力に実質的に影響を与えない1つ以上の同類置換を有するものを代りに使用することも可能であり、このような誘導体も本発明の範囲に含まれる。

30

【0028】

イムノアッセイ、例えば生物学的サンプル中のβ-ラクトグロブリンの定性的または定量的な検出、に使用する場合、本発明の抗体および抗体誘導体を標識してもよい。この目的のためには、従来から抗体の標識に用いられているいかなる種類の標識も用いることができる。

40

【0029】

免疫学的治療、例えば、アレルギー患者におけるアレルゲン性β-ラクトグロブリンの遮断に使用するためにも、本発明の抗体および抗体誘導体を標識してもよい。この目的のためには、従来から抗体の標識に用いられている、薬学的に許容される標識を適宜使用することができる（例えば、US 2007/0003579を参照）。

【0030】

本発明の他の一つの態様においては、本発明の抗体および抗体誘導体をコードするDNAおよびこのようなDNAの断片であって、V_Lおよび／またはV_H領域のCDRをコードするDNA断片が提供される。これらDNA分子はベクターにクローニングされていても

50

よく、具体的には、例えば、本発明の抗体の誘導体、少なくとも1つの抗体鎖または抗体鎖の一部の発現を誘導しうる発現ベクターにクローニングされていてもよい。

【0031】

本発明の更なる一つの態様においては、細菌細胞、酵母細胞、真菌細胞、昆虫細胞、植物細胞および哺乳動物細胞からなる群より選ばれる細胞であって、本発明のDNA分子を含むものが提供される。このような宿主細胞には、本発明の抗体または抗体誘導体を発現することが可能な宿主細胞も含まれる。従って、本発明の抗体誘導体を製造するためには、1種または複数種の必要な抗体鎖を発現しうる本発明の宿主細胞を培養し、そして宿主細胞の産生した目的タンパク質を直接回収するか、必要であれば、初めに個別の抗体鎖を回収し、組み合わせることもできる。

10

【0032】

上記のscFv断片は、アレルゲン性組み換えβ-ラクトグロブリンを用いたヒトIgE scFvファージライブラリーのバイオパニング (biopanning) によって得たものである。ヒトIgE scFvファージライブラリーは、牛乳アレルギー患者のリンパ球から単離したmRNAから構築した。軽鎖および重鎖の可変領域のcDNAは、Fd cDNA用のヒトIgE特異的プライマーを用いて合成し、ヒト軽鎖のカッパ (κ) 鎖およびラムダ (λ) 鎖はヒトκ鎖特異的プライマーおよびλ鎖特異的プライマーを用いて合成した。軽鎖および重鎖の可変領域は、V_κ cDNA用のヒトκ鎖特異的プライマーとV_λ cDNA用のλ鎖特異的プライマーおよびV_H cDNA用のヒトIgE特異的プライマーを用いてそれぞれPCRによって増幅した。これらのPCRプライマーに導入しておいた制限部位を利用して、scFvファージディスプレイベクターに可変領域のcDNAをクローニングし、ヒトIgE scFvライブラリーを構築した。

20

【0033】

パニング法を利用したファージディスプレイによってヒトIgE scFvライブラリーを選択した。ヒトIgE scFvファージライブラリーのスクリーニングを溶液中のビオチン化したアレルゲン性未修飾 (native) β-ラクトグロブリンで行い、結合物をストレプトアビジン上に捕捉した。ファージの溶出を100 μMの非ビオチン化未修飾β-ラクトグロブリンAB二量体で行った。ファージ溶出液をE. coli細胞で増幅した。バイオパニングを2ラウンド繰り返した後、単離したファージから可溶性のscFv断片を調製した。選択したscFv断片の結合特異性をELISAで検出した。複数種のβ-ラクトグロブリン特異的scFv断片クローンを得た。

30

【0034】

本明細書に記載したように、ファージディスプレイ法は、診断および治療に適用するためのヒトIgE組み換え抗β-ラクトグロブリン抗体を開発するための、有効かつ実用的な方法である。

【0035】

本発明の抗体断片を得るために有効な選択方法の一例を記載したが、当業者には明らかなように、様々な応用方法によっても本発明の抗体断片を得ることが可能である。scFv断片またはその誘導体のファージディスプレイライブラリーまたは微生物ディスプレイライブラリーから本発明のscFv断片を直接選択すること可能性もある。本発明のscFv断片または他の抗体断片を表面タンパク質との融合タンパク質として提示するファージまたは微生物細胞は、本発明の更なる態様の一つである。

40

【0036】

微生物細胞による本発明の抗体および抗体誘導体の発現は、免疫診断アッセイおよび免疫療法に適した均一な品質の高特異性試薬を効率よく且つ経済的に製造するための手段を提供する一方で、このような試薬またはその少なくとも一部が合成可能であることを示唆している。従来の遺伝子工学的手法を適用することにより、初めに得られた本発明の抗体断片をその結合特性を実質的に変えることなく改変する (例えば、新たな配列を連結する) ことができる。このような手法は、上記で定義したβ-ラクトグロブリンに対する親和性および特異性の両方を保持する新規なβ-ラクトグロブリン結合性ハイブリッドタンパ

50

ク質の製造にも用いることができる。

【0037】

アレルギーの平面状表面および低アレルギー性物質の製造と使用

本発明は、非連続的なアレルギー性エピトープ、即ち、アレルギー性物質の面積が $600 \sim 900 \text{ \AA}^2$ の平面状表面（図14と図16を参照）、のアミノ酸残基を修飾することによって、アレルギー性物質のI型表面相互作用の遮断を可能にする。平面状（平坦状）表面は、 β -ラクトグロブリンやBet v 1のように、タンパク質表面の β -シートを含んでいるか、またはFel d 1に見られるような、互いに隣接して集合した複数の α -ヘリックスを含んでいる。平面状構造を有する他のアレルギーは、Equ c 1（ウマ 皮膚）、Bos d 2（ウシ フケ）、Cyp c 1（コイ パルプアルブミン）およびHev b 6（ラテックス）である。

10

【0038】

低アレルギー性の変異型は、平面状（平坦状）エピトープ表面の数個（1～5個）のアミノ酸残基を嵩高の残基に変異させる（例えば、AlaをArg、Tyr、LysまたはTrpに変異させる）ことで得られる。変異後の残基は、いずれも側鎖が外側の溶媒に向けられるため、アレルギーの基本構造の変化は最小限に抑えられる。変異の目的は、平坦状表面を、IgE抗体の結合を妨げる凸状表面に改変することである。平面状表面上の変異による効果は、修飾アレルギーに対するアレルギー特異的IgE抗体の親和性の低下として観察され、特異的抗体の親和性を10分の1以下に減少させる変異が好ましく、10分の1未満に減少させる変異がさらに好ましい。結果として得られる修飾アレルギーは、アレルギー患者に特定アレルギーに対する寛容状態を誘導するために使用することができる。従って本発明は、1種または複数種の変異を直接導入することで破壊したI型平面状エピトープを有し、組み換えIgE分子に対する親和性が10分の1以下、好ましくは10分の1未満まで減少した修飾アレルギーを提供する。

20

【0039】

さらに本発明は、以下の工程を包含する、平面状アレルギー性エピトープを有する特定アレルギーに対する寛容状態を患者に誘導するための方法を提供する。

a) IgEエピトープに対する親和性を10分の1以下に低下させる変異によって、アレルギーの平面状表面を破壊し、

b) 変異したアレルギー（即ち、低アレルギー性物質）を製造し、そして

30

c) 変異したアレルギーを、患者に1回または複数回、好ましくは非経口的に投与する。

【0040】

さらに本発明は、以下の工程を包含する、組み換えIgEモノクローナル抗体を単離するための方法を提供する。

a) ヒト由来サンプルのIgE産生細胞からmRNAを単離し、

b) IgE Fd遺伝子領域およびカッパ/ラムダ軽鎖遺伝子をコードするcDNAを合成して、IgE発現ライブラリーを構築し、

c) アレルギーに固有の平面状（平坦状）I型表面を有するポリペプチドまたはタンパク質に対して発現ライブラリーをスクリーニングし、該平面状表面に対して 10^7 M^{-1} を超える中度から高度の親和性を示すクローンを単離し、そして

40

d) 上記工程c) で得たIgE抗体をコードするDNAを単離する。

【0041】

好ましくは、該ポリペプチドは β -ラクトグロブリンであり、該平面状表面は、抗体- β -ラクトグロブリン免疫複合体に含まれる β -ラクトグロブリン由来アミノ酸であるVal143-Lys47とLeu57-Gln59、およびこれら β -ラクトグロブリン由来アミノ酸の近傍のアミノ酸からなる群より選ばれる少なくとも1種の構造座標または三次元座標によって定義されるものである（表8参照）。

【0042】

さらに本発明は、以下の工程を包含する、修飾アレルギー性ポリペプチドを製造するた

50

めの方法を提供する。

(a) アレルゲン性ポリペプチドをコードする核酸配列を修飾し、それにより、修飾した核酸から発現される修飾アレルゲン性ポリペプチドにおいて、該アレルゲン性ポリペプチドの有するアレルゲン性エピトープの構造が改変され、そして(b) 該修飾核酸から修飾アレルゲン性ポリペプチドを発現させるか、または該修飾核酸を用いて修飾アレルゲン性ポリペプチドを製造する。工程(b)は、適切な宿主細胞内の該修飾核酸を培養系内で発現させて、培養物から該修飾ポリペプチドを単離する工程、あるいは該修飾ポリペプチドを合成する工程をさらに包含することが好ましい。該修飾アレルゲン性ポリペプチドがβ-ラクトグロブリンであること、および／または該アレルゲン性エピトープが上記で定義した平面状表面であることが好ましい。より好ましくは、平面状表面は、抗体-β-ラクトグロブリン免疫複合体に含まれるβ-ラクトグロブリン由来アミノ酸であるVal43-Lys47とLeu57-Gln59、およびこれらβ-ラクトグロブリン由来アミノ酸の近傍のアミノ酸からなる群より選ばれる少なくとも1種の三次元座標によって定義されるものである。該アレルゲン性エピトープは、抗体-β-ラクトグロブリン免疫複合体に含まれるβ-ラクトグロブリン由来アミノ酸である、β-鎖AのTrp19とTyr20およびβ-鎖BのGlu44の構造座標によって定義されるものでもよい。

10

【0043】

さらに本発明は、アレルゲンのアレルゲン性エピトープに結合する分子を同定するための方法であって、以下の工程を包含する方法を提供する。(a) アレルゲン性エピトープを有する粒子(例えば、ウイルス粒子)に、結合性分子候補物質を接触させ、そして(b) 該アレルゲン性エピトープに結合する結合性分子候補物質を単離する。アレルゲンがβ-ラクトグロブリンであり、該分子がペプチドであり、該アレルゲン性エピトープが上記で定義した平面状表面であることが好ましい。より好ましくは、平面状表面は、抗体-β-ラクトグロブリン免疫複合体に含まれるβ-ラクトグロブリン由来アミノ酸であるVal43-Lys47とLeu57-Gln59、およびこれらβ-ラクトグロブリン由来アミノ酸の近傍のアミノ酸からなる群より選ばれる少なくとも1種の構造座標または三次元座標によって定義されるものである。この方法を実施するために適した手法は、アフィニティークロマトグラフィーである。

20

【0044】

結晶学的スクリーニングおよびin Silicoスクリーニング

30

β-ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープの三次元構造は、以下に示す一群の構造座標によって定義されている。「構造座標」という用語は、結晶化した抗体-アレルゲン免疫複合体に含まれるβ-ラクトグロブリンのアレルゲン性エピトープの原子(散乱中心)による、X線単色放射の回析によって得られるパターンに関連した数式から導いたデカルト座標を意味する。回析データは、結晶中の繰り返し単位の電子密度地図を計算するために使用する。そして電子密度地図は、β-ラクトグロブリンのアレルゲン性エピトープの個別の原子の位置を確定するために使用する。

【0045】

当業者には明らかなように、タンパク質やタンパク質複合体またはその一部に関する一群の構造座標は、三次元の形状を定義する点の相対的な集合である。従って、完全に異なる座標が、類似または同一の形状を定義することもある。さらに個々の座標のわずかなばらつきは、全体的な形状にあまり影響を与えない。

40

【0046】

上述した座標のばらつきは、構造座標の計算操作によって発生することもある。例えば、後述する一群の構造座標は、構造座標の結晶学的置換、構造座標の分数化、一群の構造座標への整数の加算と減算、構造座標の反転、あるいはこれらのいかなる組み合わせによっても、操作することができる。

【0047】

また、アミノ酸の変位、付加、置換および／または欠失、あるいは結晶を構成する成分の他の変化による結晶構造の修飾も、構造座標のばらつきの一因となりうる。このような

50

ばらつきが、元の座標と比較して許容される標準誤差範囲にある場合には、結果として得られる三次元の形状は同一と見なす。

【0048】

従って、分子、分子複合体またはそれらの一部が、ここに記載したβ-ラクトグロブリンアレルギー性エпитープの全部または一部と同一であると見なすに十分な類似性を有するか否かを決定するためには、種々の計算解析が必要である。このような解析は、近年のソフトウェアアプリケーション、例えば、QUANTAの分子類似性アプリケーション(Molecular Similarity Application)(カリフォルニア州、サンディエゴ、Molecular Simulations Inc.製)、バージョン4.1および添付のユーザズガイドを用いて実施することができる。

10

【0049】

タンパク質結晶の構造座標を一度決定してしまえば、他の結晶の構造、特に類似したタンパク質の結晶の構造を解明する際に有用である。

【0050】

従って本発明によれば、β-ラクトグロブリンのアレルゲン性エпитープおよびその部分の構造座標のデータを機械読み取り可能な保存媒体に保存する。このようなデータは、種々の目的、例えば、薬剤探索およびタンパク質結晶のX線結晶回析、に使用することができる。

【0051】

従って、本発明の更に他の1つの態様においては、後述する一群の構造座標が符号化して記録された、機械読み取り可能なデータ保存媒体が提供される。

20

【0052】

本発明によって、β-ラクトグロブリンのアレルゲン性エпитープまたはそのいかなる部分にも結合しうる阻害性物質などの化学物質(chemical entity)の設計、選択および合成に、構造に基づくドラッグデザイン技術、即ち、合理的なドラッグデザイン技術を使用することが初めて可能となった。

【0053】

当業者には明らかなように、天然のリガンドまたは基質とそれに対応する受容体または酵素の結合ポケットとの会合は、多くの活性の生物学的メカニズムの根幹をなしている。本明細書で使用する「結合部位」という用語は、分子または分子複合体の領域であって、その形状故に他の化学物質または化合物と有利に会合する領域を意味する。同様に、多くの薬剤が受容体または酵素の結合ポケットとの会合を介して、その生物学的効果を発揮する。このような会合は、結合ポケットの全体またはいかなる部分にも生じる。このような会合に関する理解は、標的受容体または酵素とより有利に会合し、その結果、生物学的効果の向上した分子、例えば、薬剤、の設計の助けとなる。従って、受容体または酵素に対する潜在的なリガンドや阻害剤の設計において、このような情報は貴重である。

30

【0054】

「会合する」または「相互作用する」という表現は、複数の化学物質もしくは化合物同士またはそれらの部分同士が近接した状態を意味する。会合または相互作用は、水素結合、ファンデルワールス力または静電相互作用によって物質間の近接状態がエネルギー的に保たれる非共有結合的なものであっても、共有結合的なものであっても良い。

40

【0055】

反復分子デザインにおいては、一連のタンパク質/化合物複合体の結晶を得、それから各複合体の三次元構造を解明する。このような手法は、各複合体の中のタンパク質と化合物の間の会合に関する識見を提供する。これは、阻害活性を有する化合物を選択し、このような新規なタンパク質/化合物複合体の結晶を得、複合体の三次元構造を解明し、そして新規なタンパク質/化合物複合体における会合を、既に解明されているタンパク質/化合物複合体と比較することによって達成することができる。化合物の変化がどのようにしてタンパク質/化合物の会合に影響を与えたかを観察することで、これら会合を最適化することができる。

50

【0056】

場合によっては、連続的なタンパク質／化合物複合体を形成し、新規な複合体をそれぞれ結晶化することで、反復分子デザインを実施する。または、予め形成しておいたタンパク質結晶を阻害剤の存在下でソーキングしてタンパク質／化合物複合体を形成することで、個々のタンパク質／化合物複合体を結晶化する必要性を省くこともできる。β-ラクトグロブリン結晶のアレルゲン性エピトープを、抗体などの1種または複数種の化合物の存在下でソーキングすることにより、β-ラクトグロブリン/抗体結晶複合体を容易に形成することができる。

【0057】

本明細書において「ソーキングした」とは、目的の化合物を含む溶液に結晶を転移することを意味する。

10

【0058】

保存媒体

原子座標を提供するための保存媒体は、好ましくはランダムアクセスメモリー（RAM）であるが、リードオンリーメモリー（ROM、例えばCDROM）やディスクでもよい。コンピューターと保存媒体との接続は、ローカルでもリモート（例えば、インターネットを含む、ネットワーク化された保存媒体）でもかまわない。

【0059】

さらに本発明は、コンピューター用のコンピューター読み取り可能な媒体であって、β-ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープの原子座標が記録されていることを特徴とする媒体を提供する。

20

【0060】

原子座標は、後述するものあるいはそれらの変異型が好ましい。

【0061】

本発明においては、いかなる適切なコンピューターも使用可能である。

【0062】

分子モデリング技術

β-ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープの原子座標に分子モデリング技術を適用することによって、種々の三次元モデルの作製およびリガンド結合部位の構造研究を行うことができる。当業者であれば、種々の分子モデリング方法を、本発明に適用することができる。

30

【0063】

最も単純なレベルにおいては、β-ラクトグロブリンのアレルゲン性エピトープのコンピューターモデルの目視検査を、官能基モデルの、結合部位への手動によるドッキングと共に使用することができる。

【0064】

分子モデリング技術を実施するためのソフトウェアも使用することができる。このような分子モデリング技術は、in silicoのドラッグデザインおよびモデリングに使用するための構造モデルの構築を可能にする。

【0065】

De novoの化合物デザイン

本発明の方法で使用する分子モデリング工程においては、結合表面を決定するために、β-ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープの原子座標およびそれから誘導したモデルを使用することができる。

40

【0066】

このような方法は、分子中のファンデルワールス接触、静電相互作用および／または水素結合を明らかにすることが好ましい。

【0067】

これらの結合表面は、典型的には、グリッドに基づく技術（例えば、GRID [Goodford (1985) J. Med. Chem. 28: 849-857] , CER I U S 2）、および／または官能基の

50

好ましい相互作用位置をマッピングするための多重コピー同時探索 (multiple copy simultaneous search, MCSS) 技術で使用する。このような技術は、 β -ラクトグロブリンのアレルゲン性エピトープにおいて相互作用が生じる位置を明らかにすることが好ましく、相互作用としては、プロトン、ヒドロキシル基、アミノ基、疎水性基 (例えば、メチル基、エチル基、ベンジル基) および／または２価のカチオンとの相互作用が挙げられるが、これらに限定されるものではない。

【0068】

β -ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープの結合表面の特異的部位と相互作用する官能基または小分子断片を一旦同定してしまえば、正しいサイズと幾何学的形態を有する架橋断片または官能基の好ましい配向を維持するフレームワークの使用によって、官能基または小分子断片を単一の化合物となるように連結することで、本発明の化合物を提供することができる。手動でもこのように官能基を結合することはできるが、QUANTAやSYBYL等のソフトウェアを利用して行うこともできる。さらに以下のソフトウェアも補助的に使用することができる：データベースから入手した分子テンプレートと複数の官能基を連結するHOOK [Molecular Simulations Incより入手可能]、および／または非環式分子を拘束するための結合単位を設計するCAVEAT [Lauri & Bartlett (1994) Comp. Aided Mol. Design 8: 51-66]。

【0069】

ドッキング

公知のin silicoライブラリーに登録されている化合物についても、自動ドッキングアルゴリズムにおいてそれぞれの原子座標を使用することで、 β -ラクトグロブリンアレルゲン性エピトープと相互作用する能力についてスクリーニングすることができる

【0070】

適切なドッキングアルゴリズムとしては、以下のものが挙げられる。DOCK [Kuntz et al. (1982) J. Mol. Biol. 161: 269-288]、AUTODOCK [Oxford Molecularより入手可能]、MOEDOCK [Chemical Computing Group Inc.より入手可能]、またはFLEX [Tripos Inc.より入手可能]。ドッキングアルゴリズムは、de novoで設計したリガンドとの相互作用を検証するためにも使用することができる。

【0071】

アレルゲンに対するフォーカスドIgE-抗体ライブラリー

文献に開示されたIgE配列のアミノ酸配列比較から、多様なアレルゲン群に結合する公知のIgE抗体の軽鎖は驚くほど保存性が高いことを明らかにする (表7を参照)。この結果は、アレルゲンの診断に適用可能なアレルゲン特異的な抗体の単離に使用できる、フォーカスドアレルゲン特異的ライブラリーの構築に有効なツールを提供する。保存された軽鎖配列の情報は、IgE抗体から同定した特徴的なアミノ酸配列を有する複数種の軽鎖に限定されたプールまたは単一の軽鎖の構築に使用される。この軽鎖配列の情報を、複数のアレルギー患者由来のリンパ球から単離したIgE重鎖遺伝子の多様なプールと組み合わせる。結果として得られる、ディスプレイ形式がscFv型またはFab型である抗体ファージディスプレイライブラリーを、実施例1のIIの記載またはHoogenboom et al. (1998)の記載と実質的に同様の方法で行う、アレルゲン特異的IgE抗体の選択に使用する。

【0072】

ヒトIgE VH領域を含む、ヒト抗体 (scFv、Fabまたは全長抗体) のライブラリー

D1 IgE FabのIgE VH領域、特にそのHCDR3ループをIgG抗体と比較すると、構造的な違いが認められる。この領域は、BLGアレルゲン構造のクレフトを認識するループ構造を形成している。この知見に基づけば、ヒトIgE VH領域を含む抗体であって、表面に露出していないタンパク質構造 (例えば、酵素の基質結合部位や薬剤耐性ポンプ) に対する結合特異性を必要とする治療用標的について、抗体の開発が可能となる (De Genst et al., 2006)。ヒトリンパ球由来の多様なIgE VHプールを構

10

20

30

40

50

成単位として使用し、s c F v型、F a b型または全長抗体型の機能的なヒト抗体ライブラリーを構築する。得られたライブラリーをクレフト構造に対する特異的認識を必要とする治療用標的に対して選択する。

【0073】

ヒトβ-ラクトグロブリン結合性組み換え抗体の開発および特徴付け、並びにイムノアッセイにおけるその有用性について、以下の実施例において詳細に説明する。

【実施例1】

【0074】

ファージディスプレイ選択法による、組み換えβ-ラクトグロブリン特異的s c F v断片の調製

10

本実施例においては、β-ラクトグロブリン(BLG)に対する親和性および特異性を有するs c F v断片を単離するために、ヒトIgE s c F vライブラリーを構築し、アレルギー性β-ラクトグロブリンによる選択を行った。IgE F a b-κライブラリーおよびIgE F a b-λライブラリーを初めに構築することによって、ヒトIgEファージライブラリーを間接的に構築し、その後、特定のライブラリーのDNAを用いて重鎖および軽鎖の可変ドメインをPCRで増幅した。

【0075】

I. ヒトIgE s c F vファージライブラリーの構築

ヘパリンを加えた血液50mlを牛乳アレルギー患者から得た。リンパ球をIgプライムキットのプロトコル(Novagen製)に従って、次の手順で単離した。血液10mlあたり30mlの溶解緩衝液(155mMのNH₄Cl、10mMのNH₄HCO₃、0.1mMのEDTA、pH7.4)を加え、時々振とうさせながら氷上で15分間インキュベートした。450gで10分間遠心分離した後、リンパ球、即ち白血球ペレット、を回収した。回収したペレットを溶解緩衝液で2回洗浄し、最後の遠心分離の後に得られたリンパ球ペレットをD溶液に再懸濁した。リンパ球RNAをPromega社のRNAagents 全RNA単離キットを用いて製造者のマニュアルに従って単離した。初めのcDNA合成はPromega社の逆転写システムキットを用いて行った。Fd断片cDNAおよび軽鎖cDNAの合成には、イプシロン(ε)鎖の定常領域のプライマー(Cε1)、並びにカップ鎖のプライマー(Cκ1)とラムダ鎖のプライマー(Cλ1)をそれぞれ用いた。ヒトIgE Fd領域および軽鎖のcDNA合成およびPCR増幅に用いたプライマーを表1および表2に示す。

20

30

【0076】

PCR増幅は2段階、具体的にはcDNAテンプレートからFd鎖およびL鎖を増幅するための一次PCRと、一次PCRで得たDNA断片の5'末端に制限部位を加えるための二次PCRを行った。まず、重鎖可変領域に特異的なプライマー(VH1a-VH7a)およびCε1プライマーを用いてFd領域をPCRで増幅した。次に、軽鎖のκ鎖およびλ鎖を軽鎖可変領域に特異的なプライマー(それぞれVκ1a-Vκ6bとVλ1a-Vλ10)およびCκ/λ1プライマーを用いて増幅した。二次PCRでは、カップ軽鎖領域のPCR増幅にはCκ1、Vκ/λ1およびCκプライマーを用い、カップ鎖のPCR増幅にはVκ/λ1およびCλ1プライマーを用い、ラムダ鎖のPCR増幅にはVλ1AおよびCκ/λ1プライマーを用いた。一次PCRは以下の条件で行った: 93℃で3分間の変性を1サイクル; 93℃で1分間、63℃で30秒および58℃で50秒のアニーリング、次いで72℃で1分間の伸長を7サイクル; 93℃で1分間、63℃で30秒および72℃で1分間を23サイクル; 最後に72℃で10分間を1サイクル。二次PCRは以下の条件で行った: 95℃で3分間の変性を1サイクル; 94℃で1.5分間、65℃で1分間のアニーリング、次いで72℃で1.5分間の伸長を25サイクル; および72℃で10分間を1サイクル。一次PCRと二次PCRの間、および二次PCRの後には、増幅したDNA断片を精製した。

40

【0077】

種々の抗体断片のDNAからなる最終PCR産物をプールし、適切な制限酵素で消化し

50

た。消化したDNA断片であり、IgE Fd領域やκ軽鎖やλ軽鎖をコードするDNA断片をファージミドベクターに連結し、そのファージミドベクターでE. coli XL-1 Blueを形質転換して10⁶個の独立したクローンからなるFab-κライブラリーおよびFab-λライブラリーを得た。ファージ粒子上のFab断片の発現に関連して生じうる問題を防止するために、scFv形式の抗体ライブラリーを構築した。ヒトIgE scFv-κライブラリーおよびscFv-λライブラリーを構築するために、種々のライブラリーからファージミドDNAを単離して、ヒトIgE 重鎖およびヒトIgE 軽鎖の可変領域を増幅するための鋳型DNAとして用いた。

【0078】

重鎖可変領域のPCR増幅を、ヒトV_H特異的プライマー（VH1-VH4およびVH1A）を用いて行った。軽鎖可変領域の増幅は、以下のプライマーペアを用いて行った：ヒト カッパ鎖の増幅にはVκ1-Vκ7、Vκ2-Vκ8、Vκ3-Vκ9、Vκ4-Vκ10、Vκ5-Vκ11およびVκ6-Vκ11を用い、ヒト ラムダ鎖の増幅にはVλ1-Vλ8、Vλ2-Vλ9、Vλ3-Vλ9、Vλ4-Vλ9、Vλ5-Vλ10、Vλ6-Vλ10およびVλ7-Vλ10を用いた（表3および表4参照）。scFvファージディスプレイベクターに連結するために、増幅したDNA断片を精製し消化した（図3）。連結混合物でE. coli XL-1 Blueを形質転換し、約10⁵個の独立したクローンからなるヒトIgE scFv-κライブラリーおよびヒトIgE scFv-λライブラリーを得た。

【0079】

II. ヒトscFvライブラリーの選択

ヒトscFv-κライブラリーおよびヒトscFv-λライブラリーをファージディスプレイ法（McCafferty et al., 1990、Barbas et al., 1991）により選択した。β-ラクトグロブリン結合性抗体断片を単離するために、親和性パニング法（affinity panning procedure）（図2）を用いて、バクテリオファージの表面に提示されたヒトIgE scFv-κライブラリーおよびscFv-λライブラリーのパニングを行った。初めに、ファージプールをビオチン化した免疫反応性のβ-ラクトグロブリンまたは負の対照となる抗原なしの系で1.5時間反応させた。その後、ファージプールをビオチン結合性ストレプトアビジンでコートしたマイクロタイタープレートのウェルに移した。30分間インキュベートした後、ウェルをPBS+0.05% Tween 20で3回洗浄し、結合物を可溶性抗原（100 μMの非ビオチン化β-ラクトグロブリンAB二量体）で溶出した。続くパニングラウンドのために、溶出したファージプールをE. coli XL-1 Blue細胞に感染させて増幅した。パニングは2ラウンド行った。

【0080】

III. β-ラクトグロブリン結合性物質の特徴付け

最後のパニングサイクル終了後、可溶性scFv断片を発現させるために、scFvファージディスプレイDNAを単離し、単離したDNAでE. coli HB2151（supE⁻）の形質転換を行った。scFvファージディスプレイベクターは、そのscFv配列とファージ遺伝子III配列との間にTAGアンバー終止コドンを含んでいる。このコドンは、supE⁺遺伝子型のE. coli株ではグルタミン酸に翻訳されるが、supE⁻遺伝子型のE. coli株では終止コドンに翻訳される。62個の独立したクローンの小規模培養を実施し、予備的な特徴付けに用いる可溶性scFv断片を製造した。クローンは、β-ラクトグロブリン特異的結合性物質物を捕捉するためのβ-ラクトグロブリンでコートしたウェル、および非特異的な結合を検出するためのコントロールタンパク質でコートしたウェルを用いたELISAで分析した（データは示さない）。大部分のクローンが高い親和性でβ-ラクトグロブリンに結合した。クローンを初めにDNAフィンガープリント法で解析し、6クローンについて配列を決定した（Sanger et al., 1977）。最後に、そのうちの1クローンを更なる特徴付けのために選択した（図4および5）。

【実施例2】

【0081】

β-ラクトグロブリン結合特異性を有するヒト F a b 断片のクローニングおよび特徴付け

本実施例においては、β-ラクトグロブリン結合特異性を有するヒト I g E s c F v を I g G 1 サブタイプに属するヒト F a b 断片に変換した。多量体の形成が難しいことが知られていることから、s c F v 抗体ライブラリーから得た D 1 s c F v をクローニングし、細菌に F a b 断片として発現させた (Holliger et al., 1993, Desplancq et al., 1994)。得られた抗体断片の更なる特徴付けを競合的 E L I S A 法で行った。

【0082】

I. β-ラクトグロブリン結合特異性を有するヒト F a b 断片のクローニング

F d 領域をオーバーラッピング P C R で増幅した。P C R に用いたプライマーは表 5 に示した。

【0083】

上記で得た F d 領域および軽鎖の c D N A を細菌性発現ベクターである p K K t a c にクローニングし、*E. coli* RV308 を形質転換した。D 1 I g E F a b と命名した可溶性 F a b 断片を細胞培養によって産生し (Nevanen et al., 2001)、これらの F a b 断片は、その C 末端に導入したヘキサヒスチジンタグを用いて、ニッケルを固定化したセファロースカラムで実質的に純粋になるまで精製した (データは示さない)。

【0084】

II. ヒト I g E F a b 断片の特徴付け

精製 D 1 I g E F a b の特徴付けを競合的 E L I S A 法によって行った。初めに、量を種々に増やしたの可溶性非ビオチン化 β-ラクトグロブリンを D 1 I g E F a b と共にインキュベートし、インキュベートした反応混合物をそれぞれアレルゲン性ビオチン化 β-ラクトグロブリンでコートしたストレプトアビジンマイクロタイタプレートのウェルに添加した。図 6 に競合的 E L I S A の結果を示す。ビオチン化 β-ラクトグロブリンに対する D 1 I g E F a b の結合 (図 6) は、未修飾 β-ラクトグロブリンの添加量を増加することで阻害することができた。

【0085】

D 1 I g E F a b が牛乳サンプル中の β-ラクトグロブリンに結合するかどうかを検討するために、免疫沈降試験を実施した (図 7)。D 1 I g E F a b はカップ軽鎖を介してタンパク質 L-ビーズに固定化し、得られた複合体を複数の牛乳サンプルに加え、種々の時間 (0 分、15 分、30 分および 60 分) 加熱した。タンパク質 L-ビーズに結合した D 1 I g E F a b を牛乳サンプルと共に室温で 1 時間インキュベートし、その後、P B S + 0.05% T w e e n 20 で複数回洗浄することで、牛乳タンパク質のタンパク質 L-ビーズに対する非特異的結合を除去した。D 1 I g E F a b-β-ラクトグロブリン複合体をタンパク質 L-ビーズから低 p H (0.1 M のグリシン, p H 2.1) で溶出し、溶出した画分を 3 M の T r i s, p H 8.8 で中和した。少量の溶出画分を 15% S D S-P A G E で解析し、銀染色を行った。正しいサイズのコロニドを S D S-P A G E ゲルから切り出し、さらに質量分析を行うことで、D 1 I g E F a b が牛乳から認識したタンパク質が β-ラクトグロブリンであることを確認した。

【0086】

D 1 I g E F a b が、I g E 抗体と同様に患者血清中のアレルゲン性エピトープを認識するかどうか試験するために、ビオチン化 β-ラクトグロブリンを、初めに、ストレプトアビジンで被覆したマイクロタイターウェルに固定化した。患者血清サンプルは、濃度を種々に増した D 1 I g E F a b と共にウェル内でインキュベートし、結合した患者血清 I g E を、ヒト I g E アイソタイプを特異的に認識するアルカリフォスファターゼ標識二次抗体で検出した。試験したそれぞれの患者においてわずかながら阻害が検出され、これは D 1 I g E F a b が認識するエピトープが患者血清中の I g E と同じであることを示唆している。患者血清 I g E の結合が完全に遮断されない理由は、β-ラクトグロブリンが複数の I g E-エピトープを有しているためと考えられる。

【実施例 3】

【0087】

I. 抗体-アレルゲン免疫複合体の結晶化

結晶化とデータの回収: B L G-D 1 I g E F a b の微小結晶 (約 $70 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$) は、 $2 \mu\text{l}$ の D 1 / F a b 溶液 (20mM リン酸緩衝液、 $\text{pH} 7.0$ 、による濃度 1.4mg/ml の溶液)、 $1 \mu\text{l}$ の B L G 溶液 (純水による 2mg/ml 溶液)、 $0.5 \mu\text{l}$ の α -D-グルコース溶液および $2.5 \mu\text{l}$ の貯留溶液 (14% (w/v) のポリエチレングリコール 3350、 0.1M の B T P (1, 3-ビス [トリス (ヒドロキシメチル) メチルアミノ] プロパン / 塩酸) 緩衝液 ($\text{pH} 5.5$) を混合する、蒸気拡散法で得た。回析データセットは、E S R F において、ビームライン I D 2 9 (波長 $1.000 \text{\AA}$) で 100K の条件下で単結晶から回収した。結晶は、 $a = 67.0 \text{\AA}$ 、 $b = 100.6 \text{\AA}$ 、 $c = 168.1 \text{\AA}$ の単位格子寸法を有する空間群 $P 2_1 2_1 2_1$ に属するものであった。データセットは、解像度が $2.8 \text{\AA}$ の条件で回収した。

10

【0088】

II. 抗体-アレルゲン免疫複合体の構造決定

構造は、C C P 4 プログラムパッケージに添付された M o l r e p プログラムによって、分子置換法で解読した。B L G 単量体 (P D B コード: 1 B 8 E) と、H I V ウイルスの G P 4 1 (1 D F B) に対する I g G 抗体の F a b 断片 (軽鎖の同一性は 92% 、重鎖の同一性は 79%) をサーチモデルとして使用した。最終的に得た構造は、1つの B L G 二量体が2つの F a b 断片と複合化したものを含んでいた。モデルの構築と改良は、プログラム O とプログラム C N S で行った。反射数が少ないため、F a b / D 1 断片と B L G 単量体を類似した条件におくために拘束をかけた。B L G には2種の異性体が存在するが、電子密度は、この B L G はグリシンが64位に存在し、アラニンが118位に存在するものであることを示唆している。水分子は添加していないが、B L G の脂質結合キャビティの突出した電子密度領域を α -D-グルコースのモデルとした。最終的な構造の R 値は 24.5% であり、 R_{free} 値は 29.9% だった。ラマチャンドラプロットにおいて、残基の 83.5% が最も好ましい (most favored) 領域に存在し、残基の 0.6% が非許容 (disallowed) 領域に存在した。全ての図面は、Pymol (Delano, W. L., The PyMol Molecular Graphics System, <http://www.pymol.org>) で作製した。

20

【実施例4】

【0089】

B L G に結合する D 1 I g E F a b の阻害を、短いペプチドである K R V G で行った。K R G V は、H C D R 3 内の直鎖状 B L G 結合ペプチドの中で最も長いものである。競合 E L I S A においては、B L G のビオチン化 A B 二量体を複数のストレプトアビジン被覆マイクロタイターウェルに固定化した。初めにペプチド (阻害剤) を 0.5% の B S A - P B S に溶解し、次に種々の量を固定化 B L G と共にインキュベートした。その後、ウェルの内、幾つかは P B S で3回洗浄し、残りのウェルは洗浄しなかった。D 1 I g E F a b を添加し、続いて P B S で洗浄した。結合した抗体は、A F O S 接合ヤギ抗ヒト κ 抗体で検出した。基質である p-ニトロフェニルホスファターゼを添加した後、吸光度を 405nm で計測した。結果を図 15 に示す。

30

【実施例5】

【0090】

40

分子表面と曲率の計算による、平坦状エピトープの同定

本実施例においては、市販の A M I R A プログラム (AmiraMol モジュールを使用) を用いて、溶媒排除表面の計算を行った (プローブ直径: $10 \text{\AA}$)。2つの主要曲率の積であるガウス曲率に従って、表面の色分けを行った。双曲幾何学的な表面積 (近接した鞍点のような凹凸状) は負の曲率であり、楕円幾何学的な面積 (厳密な凸状または厳密な凹状) は正の曲率である。さらに分子境界面積の計算にも A M I R A プログラムを用いた (カットオフ値: $3 \text{\AA}$)。このプログラムは、2つのタンパク質の正確に中央に位置する表面を表示する。図 17 に、抗体と、平坦状エピトープ (B L G D 1 (I g E / F a b))、凸状エピトープ (B e t v 1 - I g G / F a b、1 B V 1) および凹状エピトープ (リゾチーム-一本鎖ラクダ抗体、1 M E L) のそれぞれとの結合を例示した。

50

【0091】

三次元構造が入手可能であれば、アレルゲンの分子表面を大きなプローブ値を用いて計算することが可能である。このような分子表面を回転させて全ての方向から観察し、さらに曲率を色分けした表面の補助によって、大きな平坦状面積（600～900 Å²）を同定することができる。図18には、5種のアレルゲンの分子表面を示した。1つ目はBLG（Bos d 5）であり、平坦状エピトープを2つの方向から示した。残りの図においては、他の4種のアレルゲン（即ち、Bet v 1、Bos d 2、Phl p 7およびHev b 6）の同様の平坦状領域を同定した。これらはIgE結合のための平坦状エピトープと示唆されるものである。4種のアレルゲンはそれぞれ構造的に非常に異なるクラスを代表するものである。Bos d 5とBos d 2はβタンパク質（主としてβ鎖からなるもの）である。Bet v 1はβ鎖とαヘリックスの両方を有している。Phl p 7はαヘリックスのみを有し、Hev b 6は二次構造含量の低い小タンパク質である。

10

【実施例6】

【0092】

組み換えβラクトグロブリンおよびその変異体の特徴付け

低アレルギー性の変位型を産生するために、D1 IgEとBLGとの免疫複合体構造に基づいて、BLGの平坦状表面エピトープの変異を設計した。2種の組み換えBLG（rBLG）変異体であるT18YとT18Y/E45Y/L57Yを構築した（表9）。rBLGをコードするcDNAおよびその変異体を細菌性発現ベクターにクローニングし、*Escherichia coli*細胞で産生し、実質的に純粋になるまでクロマトグラフィーで精製し、最後にそれらの性質を特徴付けた。

20

【0093】

I. 組み換えBLGのクローニング

ベクターpUC57に含まれるウシ組み換えBLG（rBLG）cDNAをGenScript Corporation（米国）より購入した。これは5'末端に制限部位SfiI/NcoIを有し、3'末端に制限部位HindIIIを有している（表10）。rBLG cDNAを、*Ervinia carotovora*由来ペクチン酸リアーゼ（pelB）シグナル配列（Takkinen et al., 1991）と融合するように、SfiI-HindIII断片としてpKKTa c細菌性発現ベクターにクローニングした。ヘキサヒスチジン（His 6）タグは、プライマー1と2（表10）を用いたPCR増幅によってrBLG cDNAの3'末端に導入した。全てのPCR増幅で、Phusion DNAポリメラーゼ（Finnzymes製）を使用した。rBLG-His 6の増幅したcDNAをSfiIおよびHindIII（New England Biolabs製）で消化し、pKKTa c発現ベクターにクローニングした。*Escherichia coli* XL-1 Blueを、組み換えBLG（rBLG）およびその変異体を作製するための宿主株として使用した。

30

【0094】

2種の異なるrBLG変異体であるT18YとT18Y/E45Y/L57Y（表9）をpKKTa cベクターにクローニングした。rBLG-His 6のT18Y変異体とT18Y/E45Y/L57Y変異体のcDNAを、ミスマッチプライマー2、3、4と5（表10）およびテンプレートとしてpUC57ベクター内の元のrBLG cDNAを使用して、PCRで増幅した。T18Y変異体をコードするcDNAをプライマー2と3を用いて増幅し、増幅したcDNAはStuIとHindIII（New England Biolabs製）で消化し、pKKTa c/rBLG-His 6ベクターにクローニングした（上記参照）。T18Y/E45Y/L57Y変異体をコードするcDNAは、重複するプライマーを用いて2段階で増幅した。初めに、27-165 bpからなるcDNA断片をプライマー3と4を用いて増幅し、147-530 bpからなるcDNA断片をプライマー2と5を用いて増幅した。次に、得られたDNA断片をオーバーラッピングPCR増幅によって1つにした。プライマー4と5は重複する配列を有する。最後に、T18Y/E45Y/L57Y変異体をコードするcDNAをStuIとHindIIIで消化し、pKKTa c/rBLG His 6発現ベクターにクローニングした。

40

【0095】

50

r B L G-H i s 6 およびその変異体の D N A 配列は、D N A シーケンシング (ABI 3100 遺伝子アナライザー (genetic analyzer)、Applied Biosystems 製) で確認した。

【0096】

II. 組み換え B L G の製造

r B L G の細菌による発現のために、r B L G-H i s 6 およびその変異体を、*E. coli* RV308 (ATCC 31608) 株に形質転換した。各クローンの単一コロニーを、3 m l の L B、100 μ g / m l のアンピシリンおよび 1 % のグルコースからなる培地に接種し、+ 37 $^{\circ}$ C、220 r p m の振とう下で 16 時間培養した。次にアンピシリンを含む 3 m l の L B で培養物を 1 : 50 に希釈し、+ 37 $^{\circ}$ C で 3 時間培養した。その後、終濃度 1 m M の I P T G の添加によってタンパク質発現を誘導し、細胞を + 30 $^{\circ}$ C、220 r p m の振とう下で 16 時間培養した。細胞を回収し、培養上清は後の使用のために保存した。細胞のペリプラズム画分を凍結融解法 (Boer et al., 2007) で単離した。簡単に説明すると、細胞を 20 % のショ糖、30 m M のトリスおよび 1 m M の E D T A (p H 8. 0) からなる溶液に再懸濁し、ドライアイス-エタノール中で 5 分間インキュベートし、次に 5 m M の M g S O ₄ 溶液で再懸濁した後、+ 37 $^{\circ}$ C で 5 分間インキュベートした。この凍結融解工程を 3 回繰り返した。培養上清とペリプラズム画分をウエスタンブロッティングで分析した。初めに、サンプルを 15 % S D S - P A G E ゲル (β -メルカプトエタノール含有) に流し、次にタンパク質をニトロセルロースフィルターに転写した。r B L G は、ウサギ抗 B L G 抗体 (Makinen-Kiljunen and Palosuo, 1992)、続いて A F O S 接合ヤギ抗ウサギ抗体 (Bio-Rad 製) で検出した。

【0097】

細菌による産生においては、組み換え B L G は培養液にほとんど漏れることなく、ペリプラズムの空間に分泌された。r B L G の大規模生産のために、*E. coli* RV308 株の p K K T a c ベクター内に r B L G-H i s 6 とその変異体を保有する細胞を、100 μ g / m l のアンピシリンと 1 % のグルコースを含有する T B 培地に接種した。細胞を + 37 $^{\circ}$ C、220 r p m の振とう下で 16 時間培養した。培養物を 100 μ g / m l のアンピシリンを含む T B 培地で 1 : 50 に希釈した。細胞を + 37 $^{\circ}$ C、220 r p m の振とう下で O D ₆₀₀ が 4 に達するまで培養し、終濃度が 0. 1 m M となるように I P T G を添加した。細胞の誘導は、28 $^{\circ}$ C、220 r p m の振とう下で 6 時間実施した。次に、+ 4 $^{\circ}$ C、4000 $\times$ g で 15 分間の遠心分離によって細胞を回収した。組み換え B L G を含むペリプラズム画分は、上述した凍結融解法で単離した。

【0098】

III. r B L G の精製

組み換え B L G の精製は、公知の固定化金属アフィニティークロマトグラフィー (I M A C) (Porath and Olin, 1983) で行った。簡単に説明すると、r B L G を含むペリプラズム画分を結合緩衝液 (10 m M の H e p e s、1 M の N a C l、10 % のグリセリン、1 m M のイミダゾール、p H 7. 4) で 1 : 2 に希釈し、N i ²⁺-ロード済キレート化セファロース (Pharmacia 製) と共に + 4 $^{\circ}$ C で 16 時間インキュベートした。r B L G の結合したカラムマトリクスを重力流によってカラムに充填し、1 m M、10 m M、20 m M そして 50 m M のイミダゾールを含む結合緩衝液を用いて段階的に洗浄した。最後に、75 m M、100 m M、200 m M そして 5 $\times$ 500 m M のイミダゾールを含む結合緩衝液を用いて r B L G を溶出し、各 2 m l の画分を回収した。溶出画分は 15 % の S D S - P A G E ゲル (β -メルカプトエタノール含有) で分析した。目的タンパク質を含む画分をプールし、I M A C 精製をより小規模で繰り返した。2 回目の I M A C 精製の後も、再び S D S - P A G E ゲルで画分を分析した (図 19)。その結果、特定の精製 B L G を含む画分をプールし、0. 9 % の N a C l を含む 10 m M の H E P E S、p H 7. 4、に対して + 4 $^{\circ}$ C で 16 時間透析した。精製タンパク質は、ウサギ抗 B L G 抗体と A F O S 接合ヤギ抗ウサギ抗体 (Bio-Rad 製) を検出に用いるウエスタンブロッティングで分析した (図 20)。

【0099】

10

20

30

40

50

IV. 円二色性の測定

円二色性 (CD) の測定のために、カットオフ値が 6000 Da の Econo Pac 10DG 脱塩カラム (Bio-Rad 製) を使用して、全ての rBLG の緩衝液を 5 mM の HEPES (pH 7.4) に交換した。1 mm の石英セルを用い、+20 °C にペルチェサーモスタット (Jasco PTC-348WI) で維持する条件下で、未修飾 BLG (nBLG、Sigma 製)、rBLG-His6 および rBLG-His6 変異体の遠紫外線スペクトルを Jasco J-715 旋光分散計で測定した。タンパク質濃度は、nBLG が 1 mg/ml であり、rBLG-His6 変異体が 0.25 mg/ml、rBLG-His6 T18Y 変異体が 1.3 mg/ml、そして rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y 変異体が 0.93 mg/ml だった。CD スペクトルは 3 回の測定の平均値を示している (図 21)。

10

【0100】

V. rBLG に結合する D1 IgE Fab の、ELISA による特徴付け

初めに、rBLG をビオチン化した。rBLG のビオチン化には、1 mol のタンパク質 (0.9 % の NaCl を含む 10 mM の HEPES 溶液) に対して 2 mol のビオチンとなるように硫化-NHS-LC-ビオチン (Pierce 製) を使用し、室温で 30 分間穏やかな振とう下で反応させた。未反応のビオチンを、Econo Pac 10 DG 脱塩カラム (Bio-Rad 製) で除去した。rBLG によるビオチンの取り込みは、SAAFO S 検出を用いたウエスタンブロッティングで分析した。

【0101】

次に、110 µl の 0.5 % BSA/PBS 中の 1 µg のビオチン化した nBLG、rBLG-His6 変異体または rBLG-His6 T18Y 変異体を、ストレプトアビジンマイクロタイターウェル (Roche 製) に室温で 1 時間固定化した。その後、100 µl の、0.5 % BSA/PBS で 1:15000 に希釈した抗 BLG D1 Fab (1.6 mg/ml) を、洗浄したウェルに加えた。1 時間インキュベートした後、ウェルを PBS で 3 回洗浄した。BLG の検出は、AFO S 接合ヤギ抗ヒト カップ抗体 (Southern Biotech 製) で実施した。次に、p-ニトロフェニルリン酸基質 (Sigma 製) (ジエタノールアミン緩衝液による 2 mg/ml 溶液) をウェルに添加した。基質を添加した 20 分後には、波長 405 nm における吸光度を測定した (図 22)。

20

【0102】

血清サンプル (0.5 % の BSA/PBS で 1:8 に希釈したもの) の ELISA による分析は、AFO S 接合ヤギ抗ヒト IgE (Southern Biotech 製) をアレルギー患者血清由来の結合 IgE の検出に用いる以外は、上記と同様に実施した。基質添加後に 2 時間インキュベートし、波長 405 nm における吸光度を測定した (図 23)。

30

【0103】

VI. 結合力学の分析

D1 IgE Fab の、nBLG、rBLG-His6 およびその変異体に対する会合定数および解離定数を BIAcore で測定した。ビオチン化 BLG を、HBS 緩衝液 (10 mM の HEPES、0.15 M の NaCl、3.4 mM の EDTA、0.005 % の BIAcore P20 界面活性剤、pH 7.4) 中、濃度 1 µg/ml で、ストレプトアビジンバイオセンサーチップに固定化し、約 400 ~ 500 RU の表面を得た。ビオチン化 nBLG は、わずかに 200 RU を SA-チップ表面に固定化した。精製 D1 IgE Fab の結合力学は、流速 30 µl/分、濃度が 138.9 nM、69.6 nM、34.8 nM、17.4 nM、8.7 nM、4.3 nM、2.2 nM および 1.1 nM の条件で分析した。BLG 表面の再生は、100 µM の nBLG (Sigma 製) を用いて行った。69.6 nM の D1 IgE Fab 溶液の結合曲線を図 24 に示す。

40

【0104】

【表 1】

ヒト I g E F d 領域の c D N A 合成及び P C R 増幅に用いたプライマー

Cε1: 5'- GCTGAAGGTTTTGTTGTCGACCCAGTC -3'	
CεNotI: 5'- GAATGGTGCGGCCGCGCTGAAGGTTTTGTTGTCG -3'	
VH1a: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTKCAGCTGGTGCAG -3'	
VH1b: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTCCAGCTTGTGCAG -3'	10
VH1c: 5'- ATGGCCGCAGCTSAGGTCCAGCTGGTACAG -3'	
VH1d: 5'- ATGGCCGCAGCTCARATGCAGCTGGTGCAG -3'	
VH2a: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGATCACCTTGAAGGAG -3'	
VH2b: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTCACCTTGARGGAG -3'	
VH3a: 5'- ATGGCCGCAGCTGARGTGCAGCTGGTGGAG -3'	
VH3b: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTGCAGCTGGTGGAG -3'	20
VH3c: 5'- ATGGCCGCAGCTGAGGTGCAGCTGTTGGAG -3'	
VH4a: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGSTGCAGCTGCAGGAG -3'	
VH4b: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTGCAGCTACAGCAG -3'	
VH5a: 5'- ATGGCCGCAGCTGARGTGCAGCTGGTGCAG -3'	
VH6a: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTACAGCTGCAGCAG -3'	
VH7a: 5'- ATGGCCGCAGCTCAGGTSCAGCTGGTGCAA -3'	
VH1A: 5'- TTA CT CG CG GCC CAG CC GG CC AT GG CC GC AG CT -3'	30

【 0 1 0 5 】

【表 2】

ヒトカッパ鎖及びヒトラムダ鎖の c D N A 合成及び P C R 増幅に用いたプライマー

Cκ1: 5'- AGGTAGGGCGCGCCTTAACACTCTCCCCTGTTGAAGC -3'	
Vκ1a: 5'- ATGGCAGCGGCTRACATCCAGATGACCCAG -3'	
Vκ1b: 5'- ATGGCAGCGGCTGMCATCCAGTTGACCCAG -3'	
Vκ1c: 5'- ATGGCAGCGGCTGCCATCCRGATGACCCAG -3'	10
Vκ1d: 5'- ATGGCAGCGGCTGTCATCTGGATGACCCAG -3'	
Vκ2a: 5'- ATGGCAGCGGCTGATATTGTGATGACCCAG -3'	
Vκ2b: 5'- ATGGCAGCGGCTGATRITTGTGATGACTCAG -3'	
Vκ3a: 5'- ATGGCAGCGGCTGAAATTGTGTTGACRCAG -3'	
Vκ3b: 5'- ATGGCAGCGGCTGAAATAGTGATGACGCAG -3'	
Vκ3c: 5'- ATGGCAGCGGCTGAAATTGTAATGACACAG -3'	
Vκ4a: 5'- ATGGCAGCGGCTGACATCGTGATGACCCAG -3'	20
Vκ5a: 5'- ATGGCAGCGGCTGAAACGACACTCACGCAG -3'	
Vκ6a: 5'- ATGGCAGCGGCTGAAATTGTGCTGACTCAG -3'	
Vκ6b: 5'- ATGGCAGCGGCTGATGTTGTGATGACACAG -3'	
Vκ/λ1: 5'- TTGTTATTGCTAGCTGCACAACCAGCAATGGCAGCGGCT -3'	
Cλ1: 5'- AGGTAGGGCGCGCCTTATGAACATTCYGYAGGGGC -3'	
Vλ1a: 5'- ATGGCAGCGGCTCAGTCTGTGCTGACTCAG -3'	
Vλ1b: 5'- ATGGCAGCGGCTCAGTCTGTGYTGACGCAG -3'	30
Vλ1c: 5'- ATGGCAGCGGCTCAGTCTGTCGTGACGCAG -3'	
Vλ2 : 5'- ATGGCAGCGGCTCAGTCTGCCCTGACTCAG -3'	
Vλ3a: 5'- ATGGCAGCGGCTTCCTATGWGCTGACTCAG -3'	
Vλ3b: 5'- ATGGCAGCGGCTTCCTATGAGCTGACACAG -3'	
Vλ3c: 5'- ATGGCAGCGGCTTCTTCTGAGCTGACTCAG -3'	
Vλ3d: 5'- ATGGCAGCGGCTTCCTATGAGCTGATGCAG -3'	
Vλ4 : 5'- ATGGCAGCGGCTCAGCYTGTGCTGACTCAA -3'	40
Vλ5 : 5'- ATGGCAGCGGCTCAGSCTGTGCTGACTCAG -3'	
Vλ6 : 5'- ATGGCAGCGGCTAATTTTATGCTGACTCAG -3'	
Vλ7 : 5'- ATGGCAGCGGCTCAGRCTGTGGTGACTCAG -3'	
Vλ8 : 5'- ATGGCAGCGGCTCAGACTGTGGTGACCCAG -3'	
Vλ4/9: 5'- ATGGCAGCGGCTCWGCCTGTGCTGACTCAG -3'	
Vλ10: 5'- ATGGCAGCGGCTCAGGCAGGGCTGACTCAG -3'	

【表 3】

ヒト重鎖の可変領域の P C R 増幅に用いたプライマー

VH1: 5'- ATTTACTCGAGTGAGGAGACGGTGACCAGGGTGCC -3'

VH2: 5'- ATTTACTCGAGTGAAGAGACGGTGACCATTGTCCC -3'

VH3: 5'- ATTTACTCGAGTGAGGAGACGGTGACCAGGGTTCC -3'

VH4: 5'- ATTTACTCGAGTGAGGAGACGGTGACCGTGGTCCC -3'

VH1A: 5'- TTACTCGCGGCCAGCCGGCCATGGCCGCAGCT -3'

10

【 0 1 0 7 】

【表 4】

ヒト軽鎖の可変領域のPCR増幅に用いたプライマー

Vκ1: 5'- TTATAGAGCTCGACATCCAGATGACCCAGTCTCC -3'	
Vκ2: 5'- TTATAGAGCTCGATGTTGTGATGACTCAGTCTCC -3'	
Vκ3: 5'- TTATAGAGCTCGAAATTGTGTTGACGCAGTCTCC -3'	
Vκ4: 5'- TTATAGAGCTCGACATCGTGATGACCCAGTCTCC -3'	10
Vκ5: 5'- TTATAGAGCTCGAAACGACACTCACGCAGTCTCC -3'	
Vκ6: 5'- TTATAGAGCTCGAAATTGTGCTGACTCAGTCTCC -3'	
Vκ7: 5'- TATAAGCGGCCGCGACGTTTGATTTCACCTTGGTCCC -3'	
Vκ8: 5'- TATAAGCGGCCGCGACGTTTGATCTCCAGCTTGGTCCC -3'	
Vκ9: 5'- TATAAGCGGCCGCGACGTTTGATATCCACTTGGTCCC -3'	
Vκ10: 5'- TATAAGCGGCCGCGACGTTTGATCTCCACCTTGGTCCC -3'	
Vκ11: 5'- TATAAGCGGCCGCGACGTTTAATCTCCAGTCGTGTCCC -3'	20
Vλ1: 5'- ATTTAGAGCTCCAGTCTGTGTTGACGCAGCCGCC -3'	
Vλ2: 5'- ATTTAGAGCTCCAGTCTGCCCTGACTCAGCCTGC -3'	
Vλ3: 5'- ATTTAGAGCTCTCCTATGTGCTGACTCAGCCACC -3'	
Vλ4: 5'- ATTTAGAGCTCTCTTCTGAGCTGACTCAGGACCC -3'	
Vλ5: 5'- ATTTAGAGCTCCACGTTATACTGACTCAACCGCC -3'	
Vλ6: 5'- ATTTAGAGCTCCAGGCTGTGCTCACTCAGCCGTC -3'	
Vλ7: 5'- ATTTAGAGCTCAATTTTATGCTGACTCAGCCCCA -3'	30
Vλ8: 5'- ATATTGCGGCCGCGACCTAGGACGGTGACCTTGGTCCC -3'	
Vλ9: 5'- ATATTGCGGCCGCGACCTAGGACGGTCAGCTTGGTCCC -3'	
Vλ10: 5'- ATATTGCGGCCGCGACCTAAAACGGTGAGCTGGGTCCC -3'	

【 0 1 0 8 】

【表 5】

IgEおよびIgG1サブタイプを有するヒトFd領域のPCR増幅に用いたプライマー

5'Cε: 5'-GCTCACCGTCTCCTCAGCCTCCACACAGAGCCCATCCG-3'	10
3'Cε: 5'-GCATTGCATTGCGGCCGCTTAATGGTGATGGTGATGATGGCTGAAGGT TTTGTTGTCGACCC-3'	
5'Cγ: 5'-GGTCACCGTCTCCTCAGCCTCCACCAAGGGCCC-3'	
3'Cγ: 5'-TTTAGTTTATGCGGCCGCTTAATGGTGATGATGATGGTGACAAGATTTG GGCTCTGC-3'	
5'Ve: 5'-ACTCATTAGGCACCCCAGGC-3'	
3'Ve: 5'-TGAGGAGACGGTGACC-3'	20
5'Cκ: 5'-CGAACTGTGGCTGCACC-3'	
3'Cκ: 5'-AGGTAGGGCGCGCCTTAACACTCTCCCCTGTTGAAGC-3'	
5'Vκ: 5'-TTGTTATTGCTAGCTGCACAACCAGCAATGGCAGACATCGTGATGACC CAGTCTCC-3'	
3'Vκ: 5'-GGTGCAGCCACAGTTCGTTTGATYTCCASCTTGGTCCC-3'.	

30

【 0 1 0 9 】

【表 6】

β -ラクトグロブリンのD1 IgE Fab結合エピトープ。

コアエピトープ： D1 IgE Fabと直接接触する残基からなる。

伸長エピトープ： その変異がD1 IgE Fabの結合に影響しうる残基を更に含む。セグメントは図9 dに示した。

セグメント	コアエピトープ	伸長エピトープ
1	W19-Y20	T18-Y20
2	V43-K47	Y42-K47
3	L57-Q59	E55-Q59
4	C66-Q68	E65-K70
5	P126-E127	T125-E127
6	T154-E157	T154-H161

10

20

【0110】

【表 7】

文献に開示された I g E 配列のアミノ酸配列比較によって、多様なアレルゲン群に結合する公知の I g E 抗体の軽鎖は驚くほど保存性が高いことが明らかになった。保存されているアミノ酸は太字で示した。

抗原	Ig	クローン	PDB	CDR-L1	CDR-L2	CDR-L3
CDR				XXXXXXXXXXXXXXXXXX	XXXXXX	XXXXXXXXXXXXX.
Bet v 1	IgE	C-H1				QQSYSTP ---RT
		C-H2				AAWDDSLSGRVV
		C-H3				QQRSNWP -PLT
Phl p 1	IgE	25		SQSIGN -----YLNWY	LLIYAASSLQS	QQSNRTP ---LTF
		10		SQTFNN -----YLNWY	LLIYAASTLRR	QQSYSTP ---LTF
		43		SRTIYN -----YLNWY	LLIHAASTLQD	QQSHGTP ---LTF
Phl p 2						
Phl p 5	IgE	31		SQSISS -----YLNWY	LLIYAASSLQS	QQSHSTP ---YTF
		14		SHSISN -----YLNWY	LLIYAASSLQS	QESFSPS ---GTF
		28		SQSILG -----YLNWY	LLIYAASTLQS	QQSYITP ---RTF
		5		SQGISS -----WLAWY	LLIYSASSLQS	QQANSFP ---YTF
^^^	IgE	1A4		SQSVSS -----SYLAWY	LLIYGASSRAT	QQYGSSP ---LTF
^^^	IgE	1C2		SQSISS -----YLNWY	LLIYAASSLQS	QQSYSTP ---RTF
Bos d 5	IgE	D1		SQGISS -----RLAWY	LLIYAASSLQS	QQYHSYP ---WTF

【表 8】

抗体- β -ラクトグロブリン免疫複合体に含まれるアレルゲン性 β -ラクトグロブリン
エピトープの構造座標

(注A=アレルゲンのモノマーA、注L=抗体軽鎖の可変ドメイン、
注H=抗体重鎖の可変ドメイン)

	原子種 残基				#	X	Y	Z	OCC	B		
ATOM	1	CB	THR	A	4	-23.309	-4.747	-0.142	1.00	69.95	A	10
ATOM	2	OG1	THR	A	4	-22.553	-4.413	-1.318	1.00	70.24	A	
ATOM	3	CG2	THR	A	4	-22.399	-5.463	0.852	1.00	69.08	A	
ATOM	4	C	THR	A	4	-25.438	-4.928	-1.503	1.00	69.21	A	
ATOM	5	O	THR	A	4	-25.191	-3.780	-1.887	1.00	68.89	A	
ATOM	6	N	THR	A	4	-24.039	-6.943	-1.113	1.00	69.41	A	
ATOM	7	CA	THR	A	4	-24.516	-5.659	-0.519	1.00	69.43	A	
ATOM	8	N	GLN	A	5	-26.503	-5.615	-1.909	1.00	68.87	A	
ATOM	9	CA	GLN	A	5	-27.482	-5.071	-2.843	1.00	68.15	A	
ATOM	10	CB	GLN	A	5	-28.213	-3.889	-2.204	1.00	69.22	A	
ATOM	11	CG	GLN	A	5	-29.389	-3.378	-3.017	1.00	71.17	A	20
ATOM	12	CD	GLN	A	5	-30.366	-4.488	-3.374	1.00	72.36	A	
ATOM	13	OE1	GLN	A	5	-30.836	-5.225	-2.499	1.00	73.05	A	
ATOM	14	NE2	GLN	A	5	-30.683	-4.610	-4.664	1.00	71.92	A	
ATOM	15	C	GLN	A	5	-26.828	-4.630	-4.150	1.00	67.11	A	
ATOM	16	O	GLN	A	5	-26.732	-3.435	-4.438	1.00	66.95	A	
ATOM	17	N	THR	A	6	-26.374	-5.604	-4.934	1.00	66.26	A	
ATOM	18	CA	THR	A	6	-25.732	-5.328	-6.216	1.00	64.71	A	
ATOM	19	CB	THR	A	6	-24.481	-6.213	-6.444	1.00	64.50	A	
ATOM	20	OG1	THR	A	6	-24.887	-7.549	-6.765	1.00	63.11	A	
ATOM	21	CG2	THR	A	6	-23.607	-6.239	-5.198	1.00	64.44	A	30
ATOM	22	C	THR	A	6	-26.711	-5.608	-7.348	1.00	63.92	A	
ATOM	23	O	THR	A	6	-27.769	-6.205	-7.141	1.00	63.78	A	
ATOM	24	N	MET	A	7	-26.341	-5.182	-8.549	1.00	63.06	A	
ATOM	25	CA	MET	A	7	-27.172	-5.377	-9.728	1.00	61.96	A	
ATOM	26	CB	MET	A	7	-26.431	-4.865	-10.959	1.00	60.12	A	
ATOM	27	CG	MET	A	7	-27.207	-4.975	-12.239	1.00	58.56	A	
ATOM	28	SD	MET	A	7	-26.235	-4.362	-13.595	1.00	56.18	A	
ATOM	29	CE	MET	A	7	-27.117	-2.858	-14.005	1.00	57.10	A	
ATOM	30	C	MET	A	7	-27.521	-6.852	-9.911	1.00	62.21	A	
ATOM	31	O	MET	A	7	-26.792	-7.730	-9.448	1.00	63.03	A	40
ATOM	32	N	LYS	A	8	-28.637	-7.121	-10.583	1.00	61.64	A	
ATOM	33	CA	LYS	A	8	-29.054	-8.496	-10.821	1.00	61.39	A	
ATOM	34	CB	LYS	A	8	-30.516	-8.542	-11.274	1.00	62.21	A	
ATOM	35	CG	LYS	A	8	-31.481	-7.995	-10.222	1.00	64.73	A	
ATOM	36	CD	LYS	A	8	-32.952	-8.076	-10.648	1.00	65.77	A	
ATOM	37	CE	LYS	A	8	-33.470	-9.511	-10.688	1.00	66.53	A	
ATOM	38	NZ	LYS	A	8	-32.973	-10.272	-11.870	1.00	67.48	A	
ATOM	39	C	LYS	A	8	-28.147	-9.139	-11.864	1.00	60.59	A	
ATOM	40	O	LYS	A	8	-26.924	-9.122	-11.720	1.00	61.07	A	
ATOM	41	N	GLY	A	9	-28.729	-9.717	-12.906	1.00	59.03	A	40
ATOM	42	CA	GLY	A	9	-27.899	-10.326	-13.932	1.00	56.96	A	
ATOM	43	C	GLY	A	9	-27.156	-9.276	-14.746	1.00	54.94	A	
ATOM	44	O	GLY	A	9	-27.725	-8.245	-15.097	1.00	55.67	A	
ATOM	45	N	LEU	A	10	-25.889	-9.531	-15.049	1.00	52.32	A	
ATOM	46	CA	LEU	A	10	-25.090	-8.591	-15.834	1.00	50.35	A	
ATOM	47	CB	LEU	A	10	-23.875	-8.150	-15.029	1.00	49.63	A	
ATOM	48	CG	LEU	A	10	-22.872	-7.298	-15.807	1.00	49.13	A	
ATOM	49	CD1	LEU	A	10	-23.483	-5.950	-16.144	1.00	48.82	A	
ATOM	50	CD2	LEU	A	10	-21.620	-7.119	-14.984	1.00	49.11	A	
ATOM	51	C	LEU	A	10	-24.619	-9.172	-17.177	1.00	49.26	A	
ATOM	52	O	LEU	A	10	-24.125	-10.298	-17.231	1.00	48.64	A	

ATOM	53	N	ASP	A	11	-24.755	-8.393	-18.253	1.00	48.28	A
ATOM	54	CA	ASP	A	11	-24.353	-8.835	-19.593	1.00	47.09	A
ATOM	55	CB	ASP	A	11	-25.218	-8.166	-20.666	1.00	47.90	A
ATOM	56	CG	ASP	A	11	-24.959	-8.721	-22.072	1.00	48.81	A
ATOM	57	OD1	ASP	A	11	-25.713	-8.359	-22.999	1.00	49.16	A
ATOM	58	OD2	ASP	A	11	-24.011	-9.513	-22.260	1.00	49.60	A
ATOM	59	C	ASP	A	11	-22.887	-8.534	-19.863	1.00	45.64	A
ATOM	60	O	ASP	A	11	-22.542	-7.556	-20.525	1.00	45.05	A
ATOM	61	N	ILE	A	12	-22.033	-9.405	-19.348	1.00	44.43	A
ATOM	62	CA	ILE	A	12	-20.590	-9.279	-19.493	1.00	43.31	A
ATOM	63	CB	ILE	A	12	-19.911	-10.595	-19.096	1.00	43.33	A
ATOM	64	CG2	ILE	A	12	-18.408	-10.420	-19.082	1.00	43.02	A
ATOM	65	CG1	ILE	A	12	-20.418	-11.030	-17.719	1.00	45.17	A
ATOM	66	CD1	ILE	A	12	-20.114	-12.483	-17.357	1.00	46.47	A
ATOM	67	C	ILE	A	12	-20.135	-8.893	-20.907	1.00	42.33	A
ATOM	68	O	ILE	A	12	-19.201	-8.111	-21.082	1.00	42.79	A
ATOM	69	N	GLN	A	13	-20.797	-9.433	-21.918	1.00	40.46	A
ATOM	70	CA	GLN	A	13	-20.413	-9.131	-23.286	1.00	38.91	A
ATOM	71	CB	GLN	A	13	-21.223	-9.984	-24.266	1.00	40.33	A
ATOM	72	CG	GLN	A	13	-21.016	-11.479	-24.112	1.00	41.54	A
ATOM	73	CD	GLN	A	13	-19.554	-11.868	-24.138	1.00	42.01	A
ATOM	74	OE1	GLN	A	13	-18.858	-11.822	-23.114	1.00	40.76	A
ATOM	75	NE2	GLN	A	13	-19.070	-12.230	-25.321	1.00	42.60	A
ATOM	76	C	GLN	A	13	-20.551	-7.659	-23.672	1.00	37.09	A
ATOM	77	O	GLN	A	13	-19.874	-7.181	-24.584	1.00	37.01	A
ATOM	78	N	LYS	A	14	-21.410	-6.923	-22.980	1.00	34.35	A
ATOM	79	CA	LYS	A	14	-21.611	-5.527	-23.340	1.00	30.28	A
ATOM	80	CB	LYS	A	14	-23.098	-5.198	-23.253	1.00	30.76	A
ATOM	81	CG	LYS	A	14	-23.960	-5.988	-24.226	1.00	30.07	A
ATOM	82	CD	LYS	A	14	-25.398	-5.510	-24.182	1.00	31.58	A
ATOM	83	CE	LYS	A	14	-26.266	-6.180	-25.243	1.00	33.34	A
ATOM	84	NZ	LYS	A	14	-27.727	-5.841	-25.086	1.00	33.49	A
ATOM	85	C	LYS	A	14	-20.804	-4.474	-22.596	1.00	28.04	A
ATOM	86	O	LYS	A	14	-20.754	-3.332	-23.028	1.00	27.31	A
ATOM	87	N	VAL	A	15	-20.178	-4.837	-21.486	1.00	25.96	A
ATOM	88	CA	VAL	A	15	-19.381	-3.861	-20.752	1.00	23.39	A
ATOM	89	CB	VAL	A	15	-19.232	-4.270	-19.276	1.00	23.10	A
ATOM	90	CG1	VAL	A	15	-20.589	-4.329	-18.632	1.00	23.40	A
ATOM	91	CG2	VAL	A	15	-18.528	-5.624	-19.171	1.00	23.09	A
ATOM	92	C	VAL	A	15	-17.995	-3.739	-21.396	1.00	22.23	A
ATOM	93	O	VAL	A	15	-17.168	-2.929	-20.991	1.00	20.60	A
ATOM	94	N	ALA	A	16	-17.754	-4.557	-22.411	1.00	21.06	A
ATOM	95	CA	ALA	A	16	-16.475	-4.547	-23.095	1.00	20.08	A
ATOM	96	CB	ALA	A	16	-16.431	-5.661	-24.133	1.00	18.43	A
ATOM	97	C	ALA	A	16	-16.181	-3.204	-23.757	1.00	19.05	A
ATOM	98	O	ALA	A	16	-17.085	-2.469	-24.176	1.00	18.34	A
ATOM	99	N	GLY	A	17	-14.892	-2.913	-23.867	1.00	16.89	A
ATOM	100	CA	GLY	A	17	-14.470	-1.684	-24.480	1.00	13.91	A
ATOM	101	C	GLY	A	17	-13.760	-0.779	-23.512	1.00	14.13	A
ATOM	102	O	GLY	A	17	-13.420	-1.165	-22.389	1.00	13.58	A
ATOM	103	N	THR	A	18	-13.558	0.449	-23.980	1.00	14.39	A
ATOM	104	CA	THR	A	18	-12.888	1.508	-23.251	1.00	12.62	A
ATOM	105	CB	THR	A	18	-12.402	2.559	-24.231	1.00	12.52	A
ATOM	106	OG1	THR	A	18	-11.264	2.046	-24.934	1.00	15.36	A
ATOM	107	CG2	THR	A	18	-12.035	3.850	-23.508	1.00	13.69	A
ATOM	108	C	THR	A	18	-13.764	2.168	-22.206	1.00	12.74	A
ATOM	109	O	THR	A	18	-14.978	2.296	-22.382	1.00	13.81	A
ATOM	110	N	TRP	A	19	-13.128	2.570	-21.111	1.00	10.41	A
ATOM	111	CA	TRP	A	19	-13.806	3.231	-20.014	1.00	8.52	A
ATOM	112	CB	TRP	A	19	-14.211	2.235	-18.930	1.00	7.65	A
ATOM	113	CG	TRP	A	19	-15.284	1.302	-19.337	1.00	7.67	A

10

20

30

40

ATOM	114	CD2	TRP	A	19	-16.693	1.564	-19.329	1.00	6.14	A
ATOM	115	CE2	TRP	A	19	-17.338	0.392	-19.761	1.00	6.23	A
ATOM	116	CE3	TRP	A	19	-17.470	2.677	-18.995	1.00	4.83	A
ATOM	117	CD1	TRP	A	19	-15.135	0.022	-19.770	1.00	7.58	A
ATOM	118	NE1	TRP	A	19	-16.367	-0.534	-20.027	1.00	7.80	A
ATOM	119	CZ2	TRP	A	19	-18.721	0.298	-19.861	1.00	5.58	A
ATOM	120	CZ3	TRP	A	19	-18.844	2.583	-19.095	1.00	4.02	A
ATOM	121	CH2	TRP	A	19	-19.457	1.403	-19.523	1.00	3.57	A
ATOM	122	C	TRP	A	19	-12.860	4.233	-19.391	1.00	8.93	A
ATOM	123	O	TRP	A	19	-11.666	4.215	-19.651	1.00	10.27	A
ATOM	124	N	TYR	A	20	-13.408	5.089	-18.542	1.00	9.09	A
ATOM	125	CA	TYR	A	20	-12.628	6.076	-17.841	1.00	8.07	A
ATOM	126	CB	TYR	A	20	-12.812	7.460	-18.464	1.00	9.62	A
ATOM	127	CG	TYR	A	20	-12.102	7.654	-19.781	1.00	10.80	A
ATOM	128	CD1	TYR	A	20	-12.788	7.510	-21.004	1.00	9.64	A
ATOM	129	CE1	TYR	A	20	-12.127	7.683	-22.222	1.00	9.99	A
ATOM	130	CD2	TYR	A	20	-10.739	7.976	-19.813	1.00	7.81	A
ATOM	131	CE2	TYR	A	20	-10.076	8.146	-21.028	1.00	9.67	A
ATOM	132	CZ	TYR	A	20	-10.771	7.999	-22.226	1.00	9.03	A
ATOM	133	OH	TYR	A	20	-10.102	8.158	-23.420	1.00	7.27	A
ATOM	134	C	TYR	A	20	-13.138	6.087	-16.419	1.00	8.31	A
ATOM	135	O	TYR	A	20	-14.338	5.909	-16.185	1.00	9.09	A
ATOM	136	N	SER	A	21	-12.227	6.279	-15.470	1.00	7.65	A
ATOM	137	CA	SER	A	21	-12.604	6.334	-14.059	1.00	7.21	A
ATOM	138	CB	SER	A	21	-11.463	5.836	-13.169	1.00	7.63	A
ATOM	139	OG	SER	A	21	-11.239	4.436	-13.360	1.00	8.81	A
ATOM	140	C	SER	A	21	-12.891	7.792	-13.745	1.00	7.24	A
ATOM	141	O	SER	A	21	-11.968	8.573	-13.525	1.00	7.82	A
ATOM	142	N	LEU	A	22	-14.173	8.151	-13.722	1.00	7.35	A
ATOM	143	CA	LEU	A	22	-14.608	9.525	-13.458	1.00	6.56	A
ATOM	144	CB	LEU	A	22	-16.067	9.703	-13.891	1.00	6.94	A
ATOM	145	CG	LEU	A	22	-16.419	10.956	-14.702	1.00	8.26	A
ATOM	146	CD1	LEU	A	22	-17.899	11.308	-14.465	1.00	10.43	A
ATOM	147	CD2	LEU	A	22	-15.548	12.118	-14.299	1.00	6.27	A
ATOM	148	C	LEU	A	22	-14.500	9.946	-12.003	1.00	6.17	A
ATOM	149	O	LEU	A	22	-14.001	11.027	-11.707	1.00	6.09	A
ATOM	150	N	ALA	A	23	-14.981	9.081	-11.112	1.00	5.52	A
ATOM	151	CA	ALA	A	23	-15.002	9.366	-9.686	1.00	5.14	A
ATOM	152	CB	ALA	A	23	-16.360	9.993	-9.308	1.00	1.05	A
ATOM	153	C	ALA	A	23	-14.780	8.092	-8.884	1.00	6.08	A
ATOM	154	O	ALA	A	23	-15.039	6.983	-9.372	1.00	5.25	A
ATOM	155	N	MET	A	24	-14.293	8.244	-7.654	1.00	6.12	A
ATOM	156	CA	MET	A	24	-14.073	7.086	-6.810	1.00	7.92	A
ATOM	157	CB	MET	A	24	-12.682	6.499	-7.065	1.00	10.53	A
ATOM	158	CG	MET	A	24	-11.538	7.490	-6.968	1.00	13.91	A
ATOM	159	SD	MET	A	24	-9.954	6.748	-7.475	1.00	19.85	A
ATOM	160	CE	MET	A	24	-10.155	6.742	-9.241	1.00	16.62	A
ATOM	161	C	MET	A	24	-14.258	7.449	-5.347	1.00	7.96	A
ATOM	162	O	MET	A	24	-14.166	8.621	-4.975	1.00	7.86	A
ATOM	163	N	ALA	A	25	-14.543	6.440	-4.525	1.00	6.87	A
ATOM	164	CA	ALA	A	25	-14.753	6.647	-3.098	1.00	5.96	A
ATOM	165	CB	ALA	A	25	-16.233	6.907	-2.810	1.00	5.94	A
ATOM	166	C	ALA	A	25	-14.286	5.410	-2.362	1.00	5.84	A
ATOM	167	O	ALA	A	25	-14.196	4.337	-2.949	1.00	6.04	A
ATOM	168	N	ALA	A	26	-13.973	5.568	-1.081	1.00	5.75	A
ATOM	169	CA	ALA	A	26	-13.513	4.456	-0.264	1.00	6.01	A
ATOM	170	CB	ALA	A	26	-12.011	4.329	-0.363	1.00	3.18	A
ATOM	171	C	ALA	A	26	-13.927	4.664	1.185	1.00	7.89	A
ATOM	172	O	ALA	A	26	-14.186	5.795	1.612	1.00	4.99	A
ATOM	173	N	SER	A	27	-13.982	3.567	1.938	1.00	10.42	A
ATOM	174	CA	SER	A	27	-14.376	3.623	3.336	1.00	12.99	A

10

20

30

40

ATOM	175	CB	SER	A	27	-14.720	2.216	3.850	1.00	13.33	A
ATOM	176	OG	SER	A	27	-13.559	1.482	4.189	1.00	16.45	A
ATOM	177	C	SER	A	27	-13.286	4.252	4.205	1.00	14.05	A
ATOM	178	O	SER	A	27	-13.582	4.820	5.249	1.00	13.73	A
ATOM	179	N	ASP	A	28	-12.033	4.148	3.772	1.00	16.92	A
ATOM	180	CA	ASP	A	28	-10.907	4.709	4.515	1.00	19.69	A
ATOM	181	CB	ASP	A	28	-9.980	3.601	5.011	1.00	22.47	A
ATOM	182	CG	ASP	A	28	-10.467	2.984	6.309	1.00	27.75	A
ATOM	183	OD1	ASP	A	28	-11.704	3.020	6.564	1.00	28.49	A
ATOM	184	OD2	ASP	A	28	-9.616	2.448	7.069	1.00	31.52	A
ATOM	185	C	ASP	A	28	-10.124	5.674	3.652	1.00	19.92	A
ATOM	186	O	ASP	A	28	-9.742	5.342	2.531	1.00	20.07	A
ATOM	187	N	ILE	A	29	-9.873	6.866	4.188	1.00	19.78	A
ATOM	188	CA	ILE	A	29	-9.152	7.909	3.468	1.00	19.41	A
ATOM	189	CB	ILE	A	29	-8.901	9.120	4.384	1.00	18.35	A
ATOM	190	CG2	ILE	A	29	-8.030	10.140	3.671	1.00	16.12	A
ATOM	191	CG1	ILE	A	29	-10.244	9.747	4.787	1.00	16.69	A
ATOM	192	CD1	ILE	A	29	-10.131	10.862	5.803	1.00	13.07	A
ATOM	193	C	ILE	A	29	-7.820	7.431	2.901	1.00	20.55	A
ATOM	194	O	ILE	A	29	-7.491	7.716	1.752	1.00	20.09	A
ATOM	195	N	SER	A	30	-7.065	6.702	3.714	1.00	21.94	A
ATOM	196	CA	SER	A	30	-5.754	6.183	3.329	1.00	23.62	A
ATOM	197	CB	SER	A	30	-5.203	5.341	4.461	1.00	24.48	A
ATOM	198	OG	SER	A	30	-6.132	4.313	4.756	1.00	28.16	A
ATOM	199	C	SER	A	30	-5.794	5.331	2.068	1.00	24.82	A
ATOM	200	O	SER	A	30	-4.777	5.153	1.385	1.00	23.69	A
ATOM	201	N	LEU	A	31	-6.974	4.794	1.774	1.00	26.67	A
ATOM	202	CA	LEU	A	31	-7.169	3.943	0.602	1.00	27.64	A
ATOM	203	CB	LEU	A	31	-8.567	3.303	0.645	1.00	26.50	A
ATOM	204	CG	LEU	A	31	-8.795	2.278	1.757	1.00	26.16	A
ATOM	205	CD1	LEU	A	31	-10.266	1.929	1.859	1.00	25.35	A
ATOM	206	CD2	LEU	A	31	-7.943	1.063	1.483	1.00	25.12	A
ATOM	207	C	LEU	A	31	-6.988	4.697	-0.711	1.00	28.40	A
ATOM	208	O	LEU	A	31	-6.503	4.136	-1.696	1.00	28.86	A
ATOM	209	N	LEU	A	32	-7.374	5.969	-0.715	1.00	29.73	A
ATOM	210	CA	LEU	A	32	-7.286	6.821	-1.907	1.00	30.99	A
ATOM	211	CB	LEU	A	32	-8.691	7.246	-2.360	1.00	30.24	A
ATOM	212	CG	LEU	A	32	-9.505	6.344	-3.285	1.00	29.74	A
ATOM	213	CD1	LEU	A	32	-9.570	4.958	-2.695	1.00	30.44	A
ATOM	214	CD2	LEU	A	32	-10.907	6.919	-3.502	1.00	27.92	A
ATOM	215	C	LEU	A	32	-6.459	8.081	-1.670	1.00	32.27	A
ATOM	216	O	LEU	A	32	-6.026	8.719	-2.623	1.00	31.51	A
ATOM	217	N	ASP	A	33	-6.275	8.447	-0.403	1.00	34.56	A
ATOM	218	CA	ASP	A	33	-5.508	9.636	-0.026	1.00	37.18	A
ATOM	219	CB	ASP	A	33	-5.508	9.788	1.504	1.00	38.37	A
ATOM	220	CG	ASP	A	33	-5.076	11.178	1.973	1.00	38.48	A
ATOM	221	OD1	ASP	A	33	-5.360	12.175	1.270	1.00	37.67	A
ATOM	222	OD2	ASP	A	33	-4.472	11.271	3.067	1.00	38.63	A
ATOM	223	C	ASP	A	33	-4.086	9.502	-0.553	1.00	38.68	A
ATOM	224	O	ASP	A	33	-3.396	8.516	-0.267	1.00	39.31	A
ATOM	225	N	ALA	A	34	-3.660	10.504	-1.318	1.00	40.30	A
ATOM	226	CA	ALA	A	34	-2.340	10.522	-1.937	1.00	42.39	A
ATOM	227	CB	ALA	A	34	-1.280	9.999	-0.971	1.00	42.13	A
ATOM	228	C	ALA	A	34	-2.400	9.648	-3.190	1.00	43.89	A
ATOM	229	O	ALA	A	34	-2.869	8.507	-3.141	1.00	43.68	A
ATOM	230	N	GLN	A	35	-1.927	10.193	-4.309	1.00	46.04	A
ATOM	231	CA	GLN	A	35	-1.932	9.494	-5.597	1.00	47.75	A
ATOM	232	CB	GLN	A	35	-1.183	10.333	-6.632	1.00	49.01	A
ATOM	233	CG	GLN	A	35	-1.860	10.368	-7.996	1.00	51.86	A
ATOM	234	CD	GLN	A	35	-1.440	11.582	-8.833	1.00	53.04	A
ATOM	235	OE1	GLN	A	35	-0.302	11.662	-9.323	1.00	53.42	A

10

20

30

40

ATOM	236	NE2	GLN	A	35	-2.361	12.540	-8.988	1.00	52.30	A
ATOM	237	C	GLN	A	35	-1.361	8.068	-5.563	1.00	48.50	A
ATOM	238	O	GLN	A	35	-1.853	7.183	-6.278	1.00	49.53	A
ATOM	239	N	SER	A	36	-0.342	7.847	-4.732	1.00	47.82	A
ATOM	240	CA	SER	A	36	0.282	6.533	-4.604	1.00	47.78	A
ATOM	241	CB	SER	A	36	1.714	6.688	-4.076	1.00	49.93	A
ATOM	242	OG	SER	A	36	2.479	5.493	-4.271	1.00	51.54	A
ATOM	243	C	SER	A	36	-0.535	5.662	-3.644	1.00	46.74	A
ATOM	244	O	SER	A	36	0.005	5.062	-2.717	1.00	47.36	A
ATOM	245	N	ALA	A	37	-1.839	5.597	-3.875	1.00	45.30	A
ATOM	246	CA	ALA	A	37	-2.715	4.820	-3.022	1.00	44.15	A
ATOM	247	CB	ALA	A	37	-4.078	5.486	-2.940	1.00	45.03	A
ATOM	248	C	ALA	A	37	-2.855	3.373	-3.492	1.00	43.52	A
ATOM	249	O	ALA	A	37	-2.697	3.059	-4.679	1.00	43.45	A
ATOM	250	N	PRO	A	38	-3.155	2.466	-2.548	1.00	42.24	A
ATOM	251	CD	PRO	A	38	-3.315	2.745	-1.106	1.00	41.30	A
ATOM	252	CA	PRO	A	38	-3.322	1.038	-2.821	1.00	40.88	A
ATOM	253	CB	PRO	A	38	-3.259	0.426	-1.425	1.00	41.84	A
ATOM	254	CG	PRO	A	38	-3.924	1.471	-0.588	1.00	41.59	A
ATOM	255	C	PRO	A	38	-4.609	0.669	-3.562	1.00	39.03	A
ATOM	256	O	PRO	A	38	-4.761	-0.460	-4.028	1.00	39.26	A
ATOM	257	N	LEU	A	39	-5.539	1.611	-3.666	1.00	36.16	A
ATOM	258	CA	LEU	A	39	-6.793	1.334	-4.357	1.00	32.67	A
ATOM	259	CB	LEU	A	39	-7.947	1.214	-3.366	1.00	34.76	A
ATOM	260	CG	LEU	A	39	-7.972	-0.013	-2.458	1.00	36.49	A
ATOM	261	CD1	LEU	A	39	-9.296	0.006	-1.684	1.00	39.85	A
ATOM	262	CD2	LEU	A	39	-7.859	-1.289	-3.285	1.00	37.68	A
ATOM	263	C	LEU	A	39	-7.105	2.420	-5.344	1.00	28.83	A
ATOM	264	O	LEU	A	39	-8.216	2.498	-5.854	1.00	28.46	A
ATOM	265	N	ARG	A	40	-6.116	3.262	-5.615	1.00	25.66	A
ATOM	266	CA	ARG	A	40	-6.307	4.351	-6.560	1.00	22.85	A
ATOM	267	CB	ARG	A	40	-5.431	5.533	-6.175	1.00	21.75	A
ATOM	268	CG	ARG	A	40	-5.740	6.803	-6.931	1.00	21.09	A
ATOM	269	CD	ARG	A	40	-5.789	7.968	-5.960	1.00	22.80	A
ATOM	270	NE	ARG	A	40	-5.618	9.265	-6.616	1.00	22.93	A
ATOM	271	CZ	ARG	A	40	-5.550	10.426	-5.965	1.00	22.37	A
ATOM	272	NH1	ARG	A	40	-5.643	10.462	-4.645	1.00	19.87	A
ATOM	273	NH2	ARG	A	40	-5.373	11.551	-6.634	1.00	25.01	A
ATOM	274	C	ARG	A	40	-5.945	3.844	-7.943	1.00	21.35	A
ATOM	275	O	ARG	A	40	-4.907	4.184	-8.503	1.00	21.42	A
ATOM	276	N	VAL	A	41	-6.822	3.016	-8.489	1.00	19.98	A
ATOM	277	CA	VAL	A	41	-6.593	2.442	-9.796	1.00	17.66	A
ATOM	278	CB	VAL	A	41	-6.881	0.953	-9.765	1.00	16.68	A
ATOM	279	CG1	VAL	A	41	-6.242	0.349	-8.540	1.00	16.35	A
ATOM	280	CG2	VAL	A	41	-8.355	0.716	-9.769	1.00	17.46	A
ATOM	281	C	VAL	A	41	-7.491	3.113	-10.816	1.00	16.54	A
ATOM	282	O	VAL	A	41	-8.517	3.686	-10.458	1.00	17.39	A
ATOM	283	N	TYR	A	42	-7.092	3.049	-12.081	1.00	16.55	A
ATOM	284	CA	TYR	A	42	-7.859	3.634	-13.173	1.00	15.47	A
ATOM	285	CB	TYR	A	42	-7.104	4.815	-13.788	1.00	13.88	A
ATOM	286	CG	TYR	A	42	-6.574	5.785	-12.751	1.00	12.95	A
ATOM	287	CD1	TYR	A	42	-5.266	5.683	-12.281	1.00	12.86	A
ATOM	288	CE1	TYR	A	42	-4.791	6.520	-11.269	1.00	11.80	A
ATOM	289	CD2	TYR	A	42	-7.400	6.756	-12.183	1.00	12.39	A
ATOM	290	CE2	TYR	A	42	-6.927	7.597	-11.166	1.00	12.09	A
ATOM	291	CZ	TYR	A	42	-5.623	7.458	-10.720	1.00	10.82	A
ATOM	292	OH	TYR	A	42	-5.168	8.232	-9.694	1.00	12.77	A
ATOM	293	C	TYR	A	42	-8.124	2.586	-14.236	1.00	15.00	A
ATOM	294	O	TYR	A	42	-7.191	2.015	-14.797	1.00	13.20	A
ATOM	295	N	VAL	A	43	-9.407	2.329	-14.480	1.00	15.77	A
ATOM	296	CA	VAL	A	43	-9.858	1.367	-15.478	1.00	16.87	A

10

20

30

40

ATOM	297	CB	VAL	A	43	-11.367	1.045	-15.294	1.00	18.26	A	
ATOM	298	CG1	VAL	A	43	-11.814	-0.036	-16.278	1.00	18.05	A	
ATOM	299	CG2	VAL	A	43	-11.628	0.610	-13.866	1.00	19.17	A	
ATOM	300	C	VAL	A	43	-9.661	1.967	-16.869	1.00	17.12	A	
ATOM	301	O	VAL	A	43	-9.888	3.162	-17.081	1.00	18.44	A	
ATOM	302	N	GLU	A	44	-9.233	1.144	-17.817	1.00	17.63	A	
ATOM	303	CA	GLU	A	44	-9.023	1.628	-19.175	1.00	18.37	A	
ATOM	304	CB	GLU	A	44	-7.540	1.600	-19.526	1.00	17.78	A	
ATOM	305	CG	GLU	A	44	-6.700	2.474	-18.632	1.00	19.02	A	
ATOM	306	CD	GLU	A	44	-5.327	2.720	-19.212	1.00	22.11	A	
ATOM	307	OE1	GLU	A	44	-4.657	1.733	-19.630	1.00	22.53	A	
ATOM	308	OE2	GLU	A	44	-4.912	3.905	-19.239	1.00	22.89	A	10
ATOM	309	C	GLU	A	44	-9.776	0.792	-20.180	1.00	17.64	A	
ATOM	310	O	GLU	A	44	-10.422	1.325	-21.078	1.00	16.88	A	
ATOM	311	N	GLU	A	45	-9.704	-0.519	-19.994	1.00	18.74	A	
ATOM	312	CA	GLU	A	45	-10.335	-1.452	-20.898	1.00	20.81	A	
ATOM	313	CB	GLU	A	45	-9.283	-1.935	-21.902	1.00	21.48	A	
ATOM	314	CG	GLU	A	45	-9.777	-2.219	-23.312	1.00	25.33	A	
ATOM	315	CD	GLU	A	45	-9.527	-1.059	-24.264	1.00	27.54	A	
ATOM	316	OE1	GLU	A	45	-8.411	-0.490	-24.239	1.00	27.39	A	
ATOM	317	OE2	GLU	A	45	-10.440	-0.720	-25.050	1.00	29.46	A	
ATOM	318	C	GLU	A	45	-10.932	-2.658	-20.163	1.00	21.59	A	
ATOM	319	O	GLU	A	45	-10.384	-3.141	-19.163	1.00	20.49	A	
ATOM	320	N	LEU	A	46	-12.065	-3.129	-20.673	1.00	23.36	A	
ATOM	321	CA	LEU	A	46	-12.732	-4.308	-20.138	1.00	25.89	A	
ATOM	322	CB	LEU	A	46	-14.129	-3.968	-19.595	1.00	24.67	A	20
ATOM	323	CG	LEU	A	46	-14.163	-3.256	-18.243	1.00	22.90	A	
ATOM	324	CD1	LEU	A	46	-15.589	-3.016	-17.823	1.00	22.10	A	
ATOM	325	CD2	LEU	A	46	-13.418	-4.094	-17.209	1.00	23.07	A	
ATOM	326	C	LEU	A	46	-12.831	-5.297	-21.301	1.00	27.65	A	
ATOM	327	O	LEU	A	46	-13.572	-5.079	-22.255	1.00	27.18	A	
ATOM	328	N	LYS	A	47	-12.058	-6.373	-21.213	1.00	31.02	A	
ATOM	329	CA	LYS	A	47	-12.015	-7.396	-22.240	1.00	34.48	A	
ATOM	330	CB	LYS	A	47	-10.571	-7.543	-22.731	1.00	35.53	A	
ATOM	331	CG	LYS	A	47	-10.313	-8.672	-23.702	1.00	37.60	A	
ATOM	332	CD	LYS	A	47	-8.938	-8.510	-24.347	1.00	38.84	A	
ATOM	333	CE	LYS	A	47	-8.324	-9.851	-24.708	1.00	39.57	A	
ATOM	334	NZ	LYS	A	47	-6.998	-9.685	-25.365	1.00	40.23	A	
ATOM	335	C	LYS	A	47	-12.529	-8.730	-21.701	1.00	36.80	A	30
ATOM	336	O	LYS	A	47	-11.854	-9.400	-20.910	1.00	36.52	A	
ATOM	337	N	PRO	A	48	-13.743	-9.122	-22.117	1.00	38.18	A	
ATOM	338	CD	PRO	A	48	-14.620	-8.395	-23.048	1.00	38.61	A	
ATOM	339	CA	PRO	A	48	-14.376	-10.372	-21.701	1.00	39.51	A	
ATOM	340	CB	PRO	A	48	-15.811	-10.197	-22.178	1.00	39.56	A	
ATOM	341	CG	PRO	A	48	-15.619	-9.461	-23.448	1.00	38.54	A	
ATOM	342	C	PRO	A	48	-13.698	-11.561	-22.361	1.00	40.34	A	
ATOM	343	O	PRO	A	48	-13.371	-11.511	-23.541	1.00	39.26	A	
ATOM	344	N	THR	A	49	-13.491	-12.622	-21.588	1.00	42.45	A	
ATOM	345	CA	THR	A	49	-12.851	-13.831	-22.088	1.00	43.91	A	
ATOM	346	CB	THR	A	49	-11.982	-14.493	-21.028	1.00	43.45	A	
ATOM	347	OG1	THR	A	49	-12.820	-14.990	-19.981	1.00	43.90	A	
ATOM	348	CG2	THR	A	49	-10.988	-13.510	-20.461	1.00	43.33	A	40
ATOM	349	C	THR	A	49	-13.923	-14.839	-22.466	1.00	45.42	A	
ATOM	350	O	THR	A	49	-15.070	-14.753	-22.012	1.00	45.06	A	
ATOM	351	N	PRO	A	50	-13.555	-15.825	-23.290	1.00	46.42	A	
ATOM	352	CD	PRO	A	50	-12.200	-16.122	-23.785	1.00	46.56	A	
ATOM	353	CA	PRO	A	50	-14.503	-16.851	-23.721	1.00	47.28	A	
ATOM	354	CB	PRO	A	50	-13.664	-17.721	-24.651	1.00	46.60	A	
ATOM	355	CG	PRO	A	50	-12.292	-17.599	-24.079	1.00	46.90	A	
ATOM	356	C	PRO	A	50	-15.078	-17.634	-22.539	1.00	48.52	A	
ATOM	357	O	PRO	A	50	-16.274	-17.939	-22.506	1.00	48.29	A	

ATOM	358	N	GLU	A	51	-14.233	-17.944	-21.559	1.00	49.18	A
ATOM	359	CA	GLU	A	51	-14.702	-18.694	-20.400	1.00	49.93	A
ATOM	360	CB	GLU	A	51	-13.520	-19.151	-19.542	1.00	50.20	A
ATOM	361	CG	GLU	A	51	-12.405	-18.147	-19.450	1.00	52.19	A
ATOM	362	CD	GLU	A	51	-11.193	-18.543	-20.287	1.00	54.81	A
ATOM	363	OE1	GLU	A	51	-10.460	-19.478	-19.886	1.00	55.81	A
ATOM	364	OE2	GLU	A	51	-10.972	-17.930	-21.355	1.00	54.93	A
ATOM	365	C	GLU	A	51	-15.698	-17.910	-19.541	1.00	50.04	A
ATOM	366	O	GLU	A	51	-16.178	-18.410	-18.521	1.00	51.24	A
ATOM	367	N	GLY	A	52	-16.017	-16.685	-19.952	1.00	48.90	A
ATOM	368	CA	GLY	A	52	-16.967	-15.882	-19.192	1.00	46.90	A
ATOM	369	C	GLY	A	52	-16.353	-14.928	-18.179	1.00	45.73	A
ATOM	370	O	GLY	A	52	-17.063	-14.220	-17.454	1.00	44.51	A
ATOM	371	N	ASP	A	53	-15.024	-14.912	-18.119	1.00	44.59	A
ATOM	372	CA	ASP	A	53	-14.325	-14.026	-17.198	1.00	42.64	A
ATOM	373	CB	ASP	A	53	-12.937	-14.574	-16.846	1.00	43.41	A
ATOM	374	CG	ASP	A	53	-12.996	-15.915	-16.139	1.00	44.82	A
ATOM	375	OD1	ASP	A	53	-13.850	-16.091	-15.237	1.00	44.78	A
ATOM	376	OD2	ASP	A	53	-12.168	-16.794	-16.477	1.00	46.39	A
ATOM	377	C	ASP	A	53	-14.172	-12.653	-17.833	1.00	40.68	A
ATOM	378	O	ASP	A	53	-14.540	-12.445	-18.988	1.00	39.21	A
ATOM	379	N	LEU	A	54	-13.612	-11.721	-17.073	1.00	39.63	A
ATOM	380	CA	LEU	A	54	-13.411	-10.364	-17.555	1.00	37.71	A
ATOM	381	CB	LEU	A	54	-14.402	-9.437	-16.858	1.00	37.78	A
ATOM	382	CG	LEU	A	54	-14.543	-8.033	-17.426	1.00	38.04	A
ATOM	383	CD1	LEU	A	54	-14.949	-8.112	-18.888	1.00	38.98	A
ATOM	384	CD2	LEU	A	54	-15.575	-7.277	-16.618	1.00	38.45	A
ATOM	385	C	LEU	A	54	-11.980	-9.874	-17.314	1.00	36.15	A
ATOM	386	O	LEU	A	54	-11.547	-9.725	-16.170	1.00	35.39	A
ATOM	387	N	GLU	A	55	-11.241	-9.639	-18.395	1.00	33.89	A
ATOM	388	CA	GLU	A	55	-9.880	-9.144	-18.267	1.00	31.45	A
ATOM	389	CB	GLU	A	55	-9.063	-9.455	-19.513	1.00	33.59	A
ATOM	390	CG	GLU	A	55	-7.566	-9.428	-19.278	1.00	36.34	A
ATOM	391	CD	GLU	A	55	-6.790	-9.078	-20.532	1.00	39.61	A
ATOM	392	OE1	GLU	A	55	-7.034	-9.707	-21.586	1.00	41.88	A
ATOM	393	OE2	GLU	A	55	-5.930	-8.169	-20.470	1.00	41.11	A
ATOM	394	C	GLU	A	55	-9.993	-7.636	-18.096	1.00	28.49	A
ATOM	395	O	GLU	A	55	-10.872	-7.001	-18.677	1.00	27.60	A
ATOM	396	N	ILE	A	56	-9.108	-7.064	-17.295	1.00	25.67	A
ATOM	397	CA	ILE	A	56	-9.154	-5.639	-17.045	1.00	22.66	A
ATOM	398	CB	ILE	A	56	-9.662	-5.362	-15.632	1.00	21.92	A
ATOM	399	CG2	ILE	A	56	-9.571	-3.875	-15.312	1.00	20.65	A
ATOM	400	CG1	ILE	A	56	-11.087	-5.857	-15.508	1.00	20.67	A
ATOM	401	CD1	ILE	A	56	-11.338	-6.533	-14.224	1.00	20.88	A
ATOM	402	C	ILE	A	56	-7.812	-4.976	-17.202	1.00	21.00	A
ATOM	403	O	ILE	A	56	-6.832	-5.376	-16.579	1.00	19.63	A
ATOM	404	N	LEU	A	57	-7.783	-3.945	-18.038	1.00	20.06	A
ATOM	405	CA	LEU	A	57	-6.563	-3.191	-18.266	1.00	19.69	A
ATOM	406	CB	LEU	A	57	-6.454	-2.789	-19.733	1.00	16.44	A
ATOM	407	CG	LEU	A	57	-5.166	-2.067	-20.075	1.00	14.61	A
ATOM	408	CD1	LEU	A	57	-4.000	-2.961	-19.751	1.00	12.30	A
ATOM	409	CD2	LEU	A	57	-5.170	-1.661	-21.537	1.00	13.35	A
ATOM	410	C	LEU	A	57	-6.667	-1.948	-17.396	1.00	20.13	A
ATOM	411	O	LEU	A	57	-7.624	-1.187	-17.529	1.00	19.45	A
ATOM	412	N	LEU	A	58	-5.702	-1.742	-16.502	1.00	20.63	A
ATOM	413	CA	LEU	A	58	-5.752	-0.578	-15.632	1.00	22.21	A
ATOM	414	CB	LEU	A	58	-6.504	-0.928	-14.350	1.00	21.17	A
ATOM	415	CG	LEU	A	58	-5.911	-2.034	-13.479	1.00	20.12	A
ATOM	416	CD1	LEU	A	58	-4.774	-1.473	-12.644	1.00	20.35	A
ATOM	417	CD2	LEU	A	58	-6.988	-2.595	-12.557	1.00	20.30	A
ATOM	418	C	LEU	A	58	-4.398	0.017	-15.285	1.00	24.46	A

10

20

30

40

ATOM	419	O	LEU	A	58	-3.354	-0.557	-15.597	1.00	22.97	A
ATOM	420	N	GLN	A	59	-4.435	1.179	-14.632	1.00	27.45	A
ATOM	421	CA	GLN	A	59	-3.225	1.893	-14.215	1.00	29.95	A
ATOM	422	CB	GLN	A	59	-3.066	3.199	-15.014	1.00	30.32	A
ATOM	423	CG	GLN	A	59	-3.110	3.066	-16.533	1.00	29.93	A
ATOM	424	CD	GLN	A	59	-1.849	2.471	-17.121	1.00	31.13	A
ATOM	425	OE1	GLN	A	59	-1.779	2.205	-18.322	1.00	31.40	A
ATOM	426	NE2	GLN	A	59	-0.839	2.265	-16.283	1.00	30.58	A
ATOM	427	C	GLN	A	59	-3.297	2.234	-12.723	1.00	31.07	A
ATOM	428	O	GLN	A	59	-4.370	2.495	-12.190	1.00	29.29	A
ATOM	429	N	LYS	A	60	-2.146	2.228	-12.063	1.00	35.25	A
ATOM	430	CA	LYS	A	60	-2.064	2.563	-10.648	1.00	40.05	A
ATOM	431	CB	LYS	A	60	-2.547	1.406	-9.772	1.00	41.46	A
ATOM	432	CG	LYS	A	60	-1.838	0.098	-10.010	1.00	44.79	A
ATOM	433	CD	LYS	A	60	-2.453	-1.010	-9.156	1.00	47.46	A
ATOM	434	CE	LYS	A	60	-1.904	-2.379	-9.554	1.00	49.65	A
ATOM	435	NZ	LYS	A	60	-2.316	-3.473	-8.616	1.00	51.45	A
ATOM	436	C	LYS	A	60	-0.633	2.919	-10.297	1.00	42.65	A
ATOM	437	O	LYS	A	60	0.304	2.379	-10.884	1.00	42.07	A
ATOM	438	N	TRP	A	61	-0.471	3.837	-9.347	1.00	46.96	A
ATOM	439	CA	TRP	A	61	0.852	4.285	-8.938	1.00	51.03	A
ATOM	440	CB	TRP	A	61	0.742	5.554	-8.081	1.00	53.76	A
ATOM	441	CG	TRP	A	61	1.987	6.403	-8.115	1.00	57.70	A
ATOM	442	CD2	TRP	A	61	2.192	7.602	-8.887	1.00	59.81	A
ATOM	443	CE2	TRP	A	61	3.526	8.021	-8.660	1.00	60.30	A
ATOM	444	CE3	TRP	A	61	1.380	8.357	-9.752	1.00	61.20	A
ATOM	445	CD1	TRP	A	61	3.169	6.160	-7.467	1.00	57.99	A
ATOM	446	NE1	TRP	A	61	4.095	7.127	-7.790	1.00	59.69	A
ATOM	447	CZ2	TRP	A	61	4.069	9.170	-9.267	1.00	61.29	A
ATOM	448	CZ3	TRP	A	61	1.921	9.503	-10.359	1.00	62.02	A
ATOM	449	CH2	TRP	A	61	3.254	9.892	-10.112	1.00	61.97	A
ATOM	450	C	TRP	A	61	1.588	3.181	-8.192	1.00	52.67	A
ATOM	451	O	TRP	A	61	0.991	2.420	-7.428	1.00	52.42	A
ATOM	452	N	GLU	A	62	2.892	3.093	-8.438	1.00	55.20	A
ATOM	453	CA	GLU	A	62	3.733	2.075	-7.817	1.00	57.16	A
ATOM	454	CB	GLU	A	62	3.580	0.762	-8.579	1.00	57.04	A
ATOM	455	CG	GLU	A	62	3.574	-0.464	-7.708	1.00	58.73	A
ATOM	456	CD	GLU	A	62	3.273	-1.727	-8.494	1.00	60.57	A
ATOM	457	OE1	GLU	A	62	4.126	-2.144	-9.315	1.00	61.75	A
ATOM	458	OE2	GLU	A	62	2.179	-2.305	-8.296	1.00	60.52	A
ATOM	459	C	GLU	A	62	5.205	2.506	-7.812	1.00	58.20	A
ATOM	460	O	GLU	A	62	5.873	2.520	-8.851	1.00	58.37	A
ATOM	461	N	ASN	A	63	5.695	2.856	-6.625	1.00	59.00	A
ATOM	462	CA	ASN	A	63	7.072	3.309	-6.426	1.00	59.09	A
ATOM	463	CB	ASN	A	63	8.057	2.146	-6.601	1.00	60.08	A
ATOM	464	CG	ASN	A	63	9.464	2.490	-6.111	1.00	61.16	A
ATOM	465	OD1	ASN	A	63	10.420	1.746	-6.347	1.00	62.06	A
ATOM	466	ND2	ASN	A	63	9.591	3.620	-5.416	1.00	60.90	A
ATOM	467	C	ASN	A	63	7.468	4.452	-7.366	1.00	58.34	A
ATOM	468	O	ASN	A	63	8.341	4.293	-8.216	1.00	58.61	A
ATOM	469	N	GLY	A	64	6.824	5.601	-7.206	1.00	57.66	A
ATOM	470	CA	GLY	A	64	7.147	6.745	-8.035	1.00	57.23	A
ATOM	471	C	GLY	A	64	7.081	6.503	-9.532	1.00	56.69	A
ATOM	472	O	GLY	A	64	7.988	6.892	-10.271	1.00	57.24	A
ATOM	473	N	GLU	A	65	6.014	5.852	-9.982	1.00	55.45	A
ATOM	474	CA	GLU	A	65	5.816	5.581	-11.407	1.00	53.27	A
ATOM	475	CB	GLU	A	65	6.940	4.700	-11.956	1.00	54.85	A
ATOM	476	CG	GLU	A	65	6.771	4.365	-13.442	1.00	57.62	A
ATOM	477	CD	GLU	A	65	7.591	3.152	-13.876	1.00	59.68	A
ATOM	478	OE1	GLU	A	65	8.808	3.316	-14.166	1.00	60.24	A
ATOM	479	OE2	GLU	A	65	7.012	2.032	-13.913	1.00	59.19	A

10

20

30

40

ATOM	480	C	GLU	A	65	4.473	4.904	-11.675	1.00	50.57	A
ATOM	481	O	GLU	A	65	4.070	3.987	-10.961	1.00	48.97	A
ATOM	482	N	CYS	A	66	3.787	5.367	-12.714	1.00	47.19	A
ATOM	483	CA	CYS	A	66	2.503	4.803	-13.084	1.00	43.59	A
ATOM	484	C	CYS	A	66	2.756	3.455	-13.762	1.00	40.51	A
ATOM	485	O	CYS	A	66	3.625	3.345	-14.632	1.00	40.39	A
ATOM	486	CB	CYS	A	66	1.767	5.752	-14.033	1.00	44.83	A
ATOM	487	SG	CYS	A	66	-0.027	5.451	-14.082	1.00	47.82	A
ATOM	488	N	ALA	A	67	2.022	2.424	-13.346	1.00	36.07	A
ATOM	489	CA	ALA	A	67	2.194	1.093	-13.927	1.00	32.69	A
ATOM	490	CB	ALA	A	67	2.661	0.127	-12.860	1.00	31.43	A
ATOM	491	C	ALA	A	67	0.930	0.550	-14.599	1.00	30.95	A
ATOM	492	O	ALA	A	67	-0.175	0.772	-14.116	1.00	30.29	A
ATOM	493	N	GLN	A	68	1.096	-0.160	-15.714	1.00	29.19	A
ATOM	494	CA	GLN	A	68	-0.039	-0.736	-16.433	1.00	28.43	A
ATOM	495	CB	GLN	A	68	0.202	-0.729	-17.954	1.00	27.45	A
ATOM	496	CG	GLN	A	68	-1.040	-1.062	-18.789	1.00	26.69	A
ATOM	497	CD	GLN	A	68	-0.746	-1.378	-20.248	1.00	26.54	A
ATOM	498	OE1	GLN	A	68	-0.308	-2.480	-20.575	1.00	25.60	A
ATOM	499	NE2	GLN	A	68	-0.986	-0.410	-21.131	1.00	25.13	A
ATOM	500	C	GLN	A	68	-0.198	-2.170	-15.960	1.00	28.78	A
ATOM	501	O	GLN	A	68	0.779	-2.908	-15.856	1.00	30.77	A
ATOM	502	N	LYS	A	69	-1.424	-2.575	-15.668	1.00	28.41	A
ATOM	503	CA	LYS	A	69	-1.637	-3.932	-15.211	1.00	27.79	A
ATOM	504	CB	LYS	A	69	-1.709	-3.942	-13.680	1.00	29.08	A
ATOM	505	CG	LYS	A	69	-0.407	-3.533	-12.974	1.00	29.62	A
ATOM	506	CD	LYS	A	69	-0.279	-4.243	-11.611	1.00	32.13	A
ATOM	507	CE	LYS	A	69	0.997	-3.868	-10.829	1.00	32.54	A
ATOM	508	NZ	LYS	A	69	0.984	-4.540	-9.486	1.00	33.14	A
ATOM	509	C	LYS	A	69	-2.883	-4.575	-15.832	1.00	27.00	A
ATOM	510	O	LYS	A	69	-3.878	-3.904	-16.121	1.00	26.83	A
ATOM	511	N	LYS	A	70	-2.801	-5.877	-16.068	1.00	26.65	A
ATOM	512	CA	LYS	A	70	-3.911	-6.629	-16.644	1.00	27.65	A
ATOM	513	CB	LYS	A	70	-3.465	-7.395	-17.883	1.00	28.88	A
ATOM	514	CG	LYS	A	70	-3.161	-6.516	-19.080	1.00	29.87	A
ATOM	515	CD	LYS	A	70	-2.682	-7.330	-20.275	1.00	31.48	A
ATOM	516	CE	LYS	A	70	-1.275	-7.868	-20.062	1.00	33.90	A
ATOM	517	NZ	LYS	A	70	-0.764	-8.550	-21.295	1.00	34.28	A
ATOM	518	C	LYS	A	70	-4.412	-7.608	-15.599	1.00	28.24	A
ATOM	519	O	LYS	A	70	-3.702	-8.539	-15.206	1.00	28.11	A
ATOM	520	N	ILE	A	71	-5.646	-7.393	-15.163	1.00	28.75	A
ATOM	521	CA	ILE	A	71	-6.256	-8.217	-14.139	1.00	29.38	A
ATOM	522	CB	ILE	A	71	-6.784	-7.342	-12.995	1.00	29.74	A
ATOM	523	CG2	ILE	A	71	-7.449	-8.201	-11.945	1.00	29.87	A
ATOM	524	CG1	ILE	A	71	-5.634	-6.519	-12.406	1.00	31.07	A
ATOM	525	CD1	ILE	A	71	-4.411	-7.320	-12.037	1.00	29.99	A
ATOM	526	C	ILE	A	71	-7.402	-9.028	-14.688	1.00	30.07	A
ATOM	527	O	ILE	A	71	-8.092	-8.594	-15.601	1.00	30.69	A
ATOM	528	N	ILE	A	72	-7.598	-10.215	-14.126	1.00	31.03	A
ATOM	529	CA	ILE	A	72	-8.684	-11.094	-14.543	1.00	31.39	A
ATOM	530	CB	ILE	A	72	-8.157	-12.481	-15.016	1.00	30.67	A
ATOM	531	CG2	ILE	A	72	-7.592	-12.374	-16.420	1.00	29.84	A
ATOM	532	CG1	ILE	A	72	-7.117	-13.031	-14.025	1.00	31.46	A
ATOM	533	CD1	ILE	A	72	-5.791	-12.272	-13.964	1.00	30.80	A
ATOM	534	C	ILE	A	72	-9.681	-11.297	-13.395	1.00	31.89	A
ATOM	535	O	ILE	A	72	-9.339	-11.822	-12.344	1.00	31.15	A
ATOM	536	N	ALA	A	73	-10.911	-10.843	-13.601	1.00	33.09	A
ATOM	537	CA	ALA	A	73	-11.961	-10.990	-12.608	1.00	34.36	A
ATOM	538	CB	ALA	A	73	-12.854	-9.756	-12.592	1.00	32.94	A
ATOM	539	C	ALA	A	73	-12.763	-12.218	-13.018	1.00	36.37	A
ATOM	540	O	ALA	A	73	-13.492	-12.180	-14.012	1.00	35.78	A

10

20

30

40

ATOM	541	N	GLU	A	74	-12.612	-13.307	-12.264	1.00	38.55	A
ATOM	542	CA	GLU	A	74	-13.311	-14.559	-12.554	1.00	40.60	A
ATOM	543	CB	GLU	A	74	-12.599	-15.720	-11.853	1.00	42.50	A
ATOM	544	CG	GLU	A	74	-11.126	-15.861	-12.232	1.00	46.59	A
ATOM	545	CD	GLU	A	74	-10.349	-16.791	-11.301	1.00	48.06	A
ATOM	546	OE1	GLU	A	74	-10.349	-16.548	-10.074	1.00	49.47	A
ATOM	547	OE2	GLU	A	74	-9.732	-17.754	-11.803	1.00	48.88	A
ATOM	548	C	GLU	A	74	-14.765	-14.505	-12.106	1.00	41.17	A
ATOM	549	O	GLU	A	74	-15.062	-14.102	-10.983	1.00	40.92	A
ATOM	550	N	LYS	A	75	-15.676	-14.910	-12.983	1.00	42.54	A
ATOM	551	CA	LYS	A	75	-17.086	-14.895	-12.630	1.00	43.98	A
ATOM	552	CB	LYS	A	75	-17.962	-15.093	-13.872	1.00	44.43	A
ATOM	553	CG	LYS	A	75	-17.430	-16.091	-14.874	1.00	45.71	A
ATOM	554	CD	LYS	A	75	-18.037	-17.459	-14.685	1.00	46.72	A
ATOM	555	CE	LYS	A	75	-17.517	-18.420	-15.743	1.00	48.20	A
ATOM	556	NZ	LYS	A	75	-16.030	-18.585	-15.686	1.00	48.26	A
ATOM	557	C	LYS	A	75	-17.373	-15.962	-11.589	1.00	44.70	A
ATOM	558	O	LYS	A	75	-16.731	-17.012	-11.561	1.00	45.03	A
ATOM	559	N	THR	A	76	-18.335	-15.673	-10.720	1.00	45.79	A
ATOM	560	CA	THR	A	76	-18.704	-16.594	-9.656	1.00	46.49	A
ATOM	561	CB	THR	A	76	-18.482	-15.931	-8.265	1.00	46.29	A
ATOM	562	OG1	THR	A	76	-19.386	-14.829	-8.099	1.00	44.95	A
ATOM	563	CG2	THR	A	76	-17.043	-15.425	-8.139	1.00	44.80	A
ATOM	564	C	THR	A	76	-20.163	-17.048	-9.784	1.00	47.70	A
ATOM	565	O	THR	A	76	-20.834	-16.742	-10.771	1.00	48.25	A
ATOM	566	N	LYS	A	77	-20.638	-17.777	-8.775	1.00	48.61	A
ATOM	567	CA	LYS	A	77	-22.004	-18.290	-8.735	1.00	49.17	A
ATOM	568	CB	LYS	A	77	-22.063	-19.543	-7.853	1.00	49.66	A
ATOM	569	CG	LYS	A	77	-21.293	-20.737	-8.418	1.00	50.61	A
ATOM	570	CD	LYS	A	77	-21.051	-21.797	-7.360	1.00	51.96	A
ATOM	571	CE	LYS	A	77	-20.127	-22.895	-7.867	1.00	52.72	A
ATOM	572	NZ	LYS	A	77	-19.518	-23.679	-6.741	1.00	52.80	A
ATOM	573	C	LYS	A	77	-22.947	-17.220	-8.201	1.00	49.74	A
ATOM	574	O	LYS	A	77	-24.022	-17.513	-7.675	1.00	50.02	A
ATOM	575	N	ILE	A	78	-22.516	-15.971	-8.333	1.00	50.28	A
ATOM	576	CA	ILE	A	78	-23.296	-14.818	-7.895	1.00	50.17	A
ATOM	577	CB	ILE	A	78	-22.618	-14.092	-6.746	1.00	51.47	A
ATOM	578	CG2	ILE	A	78	-23.550	-13.013	-6.193	1.00	50.83	A
ATOM	579	CG1	ILE	A	78	-22.241	-15.099	-5.659	1.00	51.83	A
ATOM	580	CD1	ILE	A	78	-21.526	-14.477	-4.487	1.00	53.00	A
ATOM	581	C	ILE	A	78	-23.394	-13.860	-9.072	1.00	49.78	A
ATOM	582	O	ILE	A	78	-22.386	-13.481	-9.656	1.00	50.43	A
ATOM	583	N	PRO	A	79	-24.613	-13.438	-9.416	1.00	49.21	A
ATOM	584	CD	PRO	A	79	-25.782	-13.560	-8.530	1.00	48.92	A
ATOM	585	CA	PRO	A	79	-24.913	-12.530	-10.524	1.00	48.42	A
ATOM	586	CB	PRO	A	79	-26.114	-11.762	-10.004	1.00	48.75	A
ATOM	587	CG	PRO	A	79	-26.860	-12.841	-9.308	1.00	49.27	A
ATOM	588	C	PRO	A	79	-23.803	-11.611	-11.039	1.00	47.58	A
ATOM	589	O	PRO	A	79	-23.015	-11.999	-11.917	1.00	48.27	A
ATOM	590	N	ALA	A	80	-23.751	-10.394	-10.504	1.00	44.81	A
ATOM	591	CA	ALA	A	80	-22.765	-9.417	-10.938	1.00	41.38	A
ATOM	592	CB	ALA	A	80	-23.427	-8.058	-11.109	1.00	40.61	A
ATOM	593	C	ALA	A	80	-21.599	-9.312	-9.978	1.00	39.63	A
ATOM	594	O	ALA	A	80	-21.166	-8.219	-9.625	1.00	39.74	A
ATOM	595	N	VAL	A	81	-21.076	-10.457	-9.567	1.00	37.52	A
ATOM	596	CA	VAL	A	81	-19.950	-10.479	-8.646	1.00	35.26	A
ATOM	597	CB	VAL	A	81	-20.380	-11.038	-7.276	1.00	34.98	A
ATOM	598	CG1	VAL	A	81	-19.193	-11.110	-6.337	1.00	32.95	A
ATOM	599	CG2	VAL	A	81	-21.473	-10.175	-6.692	1.00	34.19	A
ATOM	600	C	VAL	A	81	-18.815	-11.328	-9.204	1.00	34.49	A
ATOM	601	O	VAL	A	81	-19.012	-12.490	-9.559	1.00	34.64	A

10

20

30

40

ATOM	602	N	PHE	A	82	-17.628	-10.742	-9.286	1.00	33.80	A
ATOM	603	CA	PHE	A	82	-16.471	-11.457	-9.805	1.00	34.10	A
ATOM	604	CB	PHE	A	82	-15.909	-10.758	-11.049	1.00	32.25	A
ATOM	605	CG	PHE	A	82	-16.919	-10.533	-12.134	1.00	30.18	A
ATOM	606	CD1	PHE	A	82	-17.829	-9.492	-12.048	1.00	28.63	A
ATOM	607	CD2	PHE	A	82	-16.967	-11.367	-13.245	1.00	29.67	A
ATOM	608	CE1	PHE	A	82	-18.764	-9.286	-13.051	1.00	28.96	A
ATOM	609	CE2	PHE	A	82	-17.903	-11.162	-14.248	1.00	29.77	A
ATOM	610	CZ	PHE	A	82	-18.803	-10.121	-14.151	1.00	29.10	A
ATOM	611	C	PHE	A	82	-15.401	-11.508	-8.735	1.00	35.20	A
ATOM	612	O	PHE	A	82	-15.527	-10.872	-7.695	1.00	35.28	A
ATOM	613	N	LYS	A	83	-14.344	-12.261	-8.988	1.00	37.28	A
ATOM	614	CA	LYS	A	83	-13.281	-12.354	-8.014	1.00	40.61	A
ATOM	615	CB	LYS	A	83	-13.354	-13.689	-7.282	1.00	41.61	A
ATOM	616	CG	LYS	A	83	-12.383	-13.787	-6.118	1.00	44.64	A
ATOM	617	CD	LYS	A	83	-12.342	-15.182	-5.500	1.00	45.25	A
ATOM	618	CE	LYS	A	83	-11.773	-16.211	-6.467	1.00	46.11	A
ATOM	619	NZ	LYS	A	83	-11.737	-17.558	-5.854	1.00	45.81	A
ATOM	620	C	LYS	A	83	-11.917	-12.198	-8.667	1.00	42.61	A
ATOM	621	O	LYS	A	83	-11.716	-12.622	-9.801	1.00	41.97	A
ATOM	622	N	ILE	A	84	-10.989	-11.582	-7.941	1.00	45.99	A
ATOM	623	CA	ILE	A	84	-9.634	-11.357	-8.422	1.00	50.16	A
ATOM	624	CB	ILE	A	84	-9.173	-9.929	-8.133	1.00	50.06	A
ATOM	625	CG2	ILE	A	84	-7.789	-9.706	-8.719	1.00	50.61	A
ATOM	626	CG1	ILE	A	84	-10.159	-8.929	-8.724	1.00	49.73	A
ATOM	627	CD1	ILE	A	84	-10.097	-7.572	-8.059	1.00	50.68	A
ATOM	628	C	ILE	A	84	-8.713	-12.309	-7.682	1.00	53.84	A
ATOM	629	O	ILE	A	84	-8.653	-12.295	-6.453	1.00	54.52	A
ATOM	630	N	ASP	A	85	-7.989	-13.127	-8.437	1.00	58.42	A
ATOM	631	CA	ASP	A	85	-7.077	-14.110	-7.855	1.00	62.83	A
ATOM	632	CB	ASP	A	85	-6.543	-15.030	-8.960	1.00	64.60	A
ATOM	633	CG	ASP	A	85	-6.508	-16.494	-8.540	1.00	66.46	A
ATOM	634	OD1	ASP	A	85	-6.292	-17.364	-9.421	1.00	67.24	A
ATOM	635	OD2	ASP	A	85	-6.695	-16.771	-7.330	1.00	67.13	A
ATOM	636	C	ASP	A	85	-5.909	-13.512	-7.052	1.00	64.82	A
ATOM	637	O	ASP	A	85	-5.184	-14.243	-6.373	1.00	65.69	A
ATOM	638	N	ALA	A	86	-5.725	-12.195	-7.129	1.00	66.46	A
ATOM	639	CA	ALA	A	86	-4.655	-11.533	-6.386	1.00	68.14	A
ATOM	640	CB	ALA	A	86	-4.686	-10.028	-6.644	1.00	67.64	A
ATOM	641	C	ALA	A	86	-4.843	-11.817	-4.896	1.00	69.84	A
ATOM	642	O	ALA	A	86	-5.910	-12.273	-4.477	1.00	71.12	A
ATOM	643	N	LEU	A	87	-3.814	-11.551	-4.097	1.00	71.20	A
ATOM	644	CA	LEU	A	87	-3.893	-11.792	-2.655	1.00	71.87	A
ATOM	645	CB	LEU	A	87	-2.572	-11.406	-1.967	1.00	72.10	A
ATOM	646	CG	LEU	A	87	-2.329	-11.877	-0.520	1.00	72.35	A
ATOM	647	CD1	LEU	A	87	-2.150	-13.388	-0.499	1.00	71.46	A
ATOM	648	CD2	LEU	A	87	-1.084	-11.201	0.051	1.00	72.25	A
ATOM	649	C	LEU	A	87	-5.043	-10.989	-2.045	1.00	72.03	A
ATOM	650	O	LEU	A	87	-5.599	-10.086	-2.683	1.00	71.30	A
ATOM	651	N	ASN	A	88	-5.383	-11.326	-0.802	1.00	71.95	A
ATOM	652	CA	ASN	A	88	-6.457	-10.664	-0.064	1.00	71.65	A
ATOM	653	CB	ASN	A	88	-6.299	-9.132	-0.143	1.00	73.05	A
ATOM	654	CG	ASN	A	88	-4.849	-8.670	0.032	1.00	73.75	A
ATOM	655	OD1	ASN	A	88	-4.164	-9.051	0.989	1.00	74.21	A
ATOM	656	ND2	ASN	A	88	-4.387	-7.831	-0.891	1.00	73.03	A
ATOM	657	C	ASN	A	88	-7.838	-11.067	-0.606	1.00	70.43	A
ATOM	658	O	ASN	A	88	-8.851	-10.913	0.084	1.00	70.57	A
ATOM	659	N	GLU	A	89	-7.863	-11.582	-1.839	1.00	68.18	A
ATOM	660	CA	GLU	A	89	-9.100	-11.997	-2.511	1.00	65.08	A
ATOM	661	CB	GLU	A	89	-9.798	-13.114	-1.728	1.00	67.04	A
ATOM	662	CG	GLU	A	89	-9.172	-14.497	-1.905	1.00	69.48	A

10

20

30

40

ATOM	663	CD	GLU	A	89	-9.208	-14.972	-3.357	1.00	70.72	A	
ATOM	664	OE1	GLU	A	89	-8.437	-14.439	-4.191	1.00	71.05	A	
ATOM	665	OE2	GLU	A	89	-10.024	-15.869	-3.664	1.00	71.34	A	
ATOM	666	C	GLU	A	89	-10.076	-10.844	-2.719	1.00	61.80	A	
ATOM	667	O	GLU	A	89	-11.203	-10.870	-2.224	1.00	62.02	A	
ATOM	668	N	ASN	A	90	-9.630	-9.829	-3.448	1.00	57.36	A	
ATOM	669	CA	ASN	A	90	-10.460	-8.671	-3.727	1.00	52.67	A	
ATOM	670	CB	ASN	A	90	-9.647	-7.646	-4.533	1.00	52.48	A	
ATOM	671	CG	ASN	A	90	-8.928	-6.634	-3.646	1.00	52.32	A	
ATOM	672	OD1	ASN	A	90	-9.508	-5.631	-3.216	1.00	53.38	A	
ATOM	673	ND2	ASN	A	90	-7.663	-6.899	-3.364	1.00	52.47	A	
ATOM	674	C	ASN	A	90	-11.715	-9.096	-4.501	1.00	49.56	A	10
ATOM	675	O	ASN	A	90	-11.625	-9.859	-5.458	1.00	48.05	A	
ATOM	676	N	LYS	A	91	-12.886	-8.639	-4.061	1.00	46.27	A	
ATOM	677	CA	LYS	A	91	-14.127	-8.960	-4.756	1.00	42.55	A	
ATOM	678	CB	LYS	A	91	-15.196	-9.528	-3.816	1.00	43.88	A	
ATOM	679	CG	LYS	A	91	-15.043	-11.009	-3.467	1.00	46.95	A	
ATOM	680	CD	LYS	A	91	-16.307	-11.537	-2.772	1.00	49.01	A	
ATOM	681	CE	LYS	A	91	-16.120	-12.957	-2.226	1.00	48.98	A	
ATOM	682	NZ	LYS	A	91	-17.356	-13.517	-1.586	1.00	47.83	A	
ATOM	683	C	LYS	A	91	-14.667	-7.697	-5.394	1.00	39.10	A	
ATOM	684	O	LYS	A	91	-14.642	-6.621	-4.797	1.00	38.37	A	
ATOM	685	N	VAL	A	92	-15.150	-7.839	-6.619	1.00	35.12	A	
ATOM	686	CA	VAL	A	92	-15.703	-6.721	-7.356	1.00	31.05	A	
ATOM	687	CB	VAL	A	92	-15.035	-6.638	-8.732	1.00	30.40	A	20
ATOM	688	CG1	VAL	A	92	-15.487	-5.402	-9.460	1.00	30.11	A	
ATOM	689	CG2	VAL	A	92	-13.526	-6.647	-8.558	1.00	29.54	A	
ATOM	690	C	VAL	A	92	-17.210	-6.939	-7.502	1.00	28.12	A	
ATOM	691	O	VAL	A	92	-17.658	-8.058	-7.731	1.00	27.38	A	
ATOM	692	N	LEU	A	93	-17.991	-5.875	-7.348	1.00	25.32	A	
ATOM	693	CA	LEU	A	93	-19.442	-5.972	-7.470	1.00	23.52	A	
ATOM	694	CB	LEU	A	93	-20.109	-5.806	-6.107	1.00	24.09	A	
ATOM	695	CG	LEU	A	93	-19.510	-6.500	-4.880	1.00	22.89	A	
ATOM	696	CD1	LEU	A	93	-19.306	-7.960	-5.154	1.00	23.08	A	
ATOM	697	CD2	LEU	A	93	-18.197	-5.831	-4.513	1.00	24.87	A	
ATOM	698	C	LEU	A	93	-19.955	-4.875	-8.392	1.00	22.06	A	
ATOM	699	O	LEU	A	93	-19.679	-3.699	-8.169	1.00	22.62	A	
ATOM	700	N	VAL	A	94	-20.700	-5.250	-9.423	1.00	20.24	A	
ATOM	701	CA	VAL	A	94	-21.234	-4.262	-10.359	1.00	19.43	A	30
ATOM	702	CB	VAL	A	94	-21.402	-4.869	-11.785	1.00	18.31	A	
ATOM	703	CG1	VAL	A	94	-21.967	-3.841	-12.735	1.00	16.47	A	
ATOM	704	CG2	VAL	A	94	-20.072	-5.368	-12.291	1.00	14.46	A	
ATOM	705	C	VAL	A	94	-22.582	-3.795	-9.823	1.00	19.37	A	
ATOM	706	O	VAL	A	94	-23.565	-4.536	-9.843	1.00	19.85	A	
ATOM	707	N	LEU	A	95	-22.618	-2.563	-9.333	1.00	18.93	A	
ATOM	708	CA	LEU	A	95	-23.838	-2.009	-8.766	1.00	18.77	A	
ATOM	709	CB	LEU	A	95	-23.502	-0.785	-7.915	1.00	20.01	A	
ATOM	710	CG	LEU	A	95	-22.774	-1.051	-6.591	1.00	20.85	A	
ATOM	711	CD1	LEU	A	95	-22.627	0.263	-5.844	1.00	20.24	A	
ATOM	712	CD2	LEU	A	95	-23.576	-2.041	-5.738	1.00	21.51	A	
ATOM	713	C	LEU	A	95	-24.898	-1.639	-9.793	1.00	18.28	A	
ATOM	714	O	LEU	A	95	-26.080	-1.907	-9.591	1.00	16.17	A	40
ATOM	715	N	ASP	A	96	-24.477	-1.024	-10.889	1.00	19.53	A	
ATOM	716	CA	ASP	A	96	-25.413	-0.623	-11.926	1.00	21.52	A	
ATOM	717	CB	ASP	A	96	-26.225	0.582	-11.460	1.00	21.47	A	
ATOM	718	CG	ASP	A	96	-27.412	0.850	-12.350	1.00	22.85	A	
ATOM	719	OD1	ASP	A	96	-28.132	-0.126	-12.655	1.00	25.16	A	
ATOM	720	OD2	ASP	A	96	-27.635	2.020	-12.733	1.00	23.28	A	
ATOM	721	C	ASP	A	96	-24.667	-0.269	-13.204	1.00	22.80	A	
ATOM	722	O	ASP	A	96	-23.461	-0.023	-13.169	1.00	24.06	A	
ATOM	723	N	THR	A	97	-25.383	-0.247	-14.326	1.00	22.38	A	

ATOM	724	CA	THR	A	97	-24.776	0.095	-15.600	1.00	22.34	A
ATOM	725	CB	THR	A	97	-23.696	-0.931	-16.006	1.00	22.56	A
ATOM	726	OG1	THR	A	97	-23.116	-0.553	-17.264	1.00	22.90	A
ATOM	727	CG2	THR	A	97	-24.303	-2.319	-16.139	1.00	20.01	A
ATOM	728	C	THR	A	97	-25.803	0.143	-16.707	1.00	22.52	A
ATOM	729	O	THR	A	97	-26.726	-0.659	-16.711	1.00	23.66	A
ATOM	730	N	ASP	A	98	-25.642	1.083	-17.637	1.00	22.22	A
ATOM	731	CA	ASP	A	98	-26.544	1.203	-18.780	1.00	21.65	A
ATOM	732	CB	ASP	A	98	-26.949	2.671	-19.004	1.00	22.77	A
ATOM	733	CG	ASP	A	98	-25.814	3.527	-19.532	1.00	24.72	A
ATOM	734	OD1	ASP	A	98	-24.658	3.311	-19.127	1.00	27.27	A
ATOM	735	OD2	ASP	A	98	-26.075	4.434	-20.347	1.00	26.48	A
ATOM	736	C	ASP	A	98	-25.819	0.635	-20.007	1.00	21.37	A
ATOM	737	O	ASP	A	98	-26.393	0.538	-21.086	1.00	20.79	A
ATOM	738	N	TYR	A	99	-24.555	0.252	-19.815	1.00	20.65	A
ATOM	739	CA	TYR	A	99	-23.708	-0.330	-20.864	1.00	19.29	A
ATOM	740	CB	TYR	A	99	-24.451	-1.454	-21.601	1.00	16.84	A
ATOM	741	CG	TYR	A	99	-24.856	-2.627	-20.750	1.00	14.61	A
ATOM	742	CD1	TYR	A	99	-23.946	-3.617	-20.406	1.00	12.54	A
ATOM	743	CE1	TYR	A	99	-24.328	-4.698	-19.614	1.00	12.07	A
ATOM	744	CD2	TYR	A	99	-26.156	-2.742	-20.280	1.00	13.65	A
ATOM	745	CE2	TYR	A	99	-26.547	-3.814	-19.492	1.00	13.03	A
ATOM	746	CZ	TYR	A	99	-25.631	-4.792	-19.157	1.00	13.13	A
ATOM	747	OH	TYR	A	99	-26.036	-5.856	-18.365	1.00	12.49	A
ATOM	748	C	TYR	A	99	-23.194	0.667	-21.902	1.00	20.53	A
ATOM	749	O	TYR	A	99	-22.073	0.530	-22.379	1.00	20.58	A
ATOM	750	N	LYS	A	100	-24.005	1.670	-22.238	1.00	21.61	A
ATOM	751	CA	LYS	A	100	-23.649	2.654	-23.258	1.00	21.03	A
ATOM	752	CB	LYS	A	100	-24.891	3.004	-24.085	1.00	23.12	A
ATOM	753	CG	LYS	A	100	-25.705	1.800	-24.531	1.00	26.96	A
ATOM	754	CD	LYS	A	100	-24.896	0.871	-25.424	1.00	29.57	A
ATOM	755	CE	LYS	A	100	-25.436	-0.584	-25.398	1.00	33.09	A
ATOM	756	NZ	LYS	A	100	-26.875	-0.751	-25.800	1.00	33.75	A
ATOM	757	C	LYS	A	100	-23.046	3.946	-22.718	1.00	20.25	A
ATOM	758	O	LYS	A	100	-22.413	4.689	-23.461	1.00	20.17	A
ATOM	759	N	LYS	A	101	-23.236	4.228	-21.435	1.00	19.04	A
ATOM	760	CA	LYS	A	101	-22.701	5.467	-20.874	1.00	17.66	A
ATOM	761	CB	LYS	A	101	-23.837	6.492	-20.704	1.00	17.25	A
ATOM	762	CG	LYS	A	101	-24.408	7.018	-22.017	1.00	18.59	A
ATOM	763	CD	LYS	A	101	-25.507	8.052	-21.803	1.00	21.15	A
ATOM	764	CE	LYS	A	101	-26.614	7.492	-20.892	1.00	25.51	A
ATOM	765	NZ	LYS	A	101	-27.841	8.354	-20.716	1.00	25.35	A
ATOM	766	C	LYS	A	101	-21.927	5.328	-19.552	1.00	16.29	A
ATOM	767	O	LYS	A	101	-20.783	5.767	-19.457	1.00	16.64	A
ATOM	768	N	TYR	A	102	-22.541	4.723	-18.539	1.00	13.96	A
ATOM	769	CA	TYR	A	102	-21.884	4.579	-17.250	1.00	12.20	A
ATOM	770	CB	TYR	A	102	-22.552	5.485	-16.221	1.00	13.37	A
ATOM	771	CG	TYR	A	102	-23.967	5.074	-15.913	1.00	14.80	A
ATOM	772	CD1	TYR	A	102	-25.026	5.452	-16.743	1.00	15.56	A
ATOM	773	CE1	TYR	A	102	-26.332	5.040	-16.473	1.00	16.40	A
ATOM	774	CD2	TYR	A	102	-24.245	4.275	-14.810	1.00	14.91	A
ATOM	775	CE2	TYR	A	102	-25.537	3.852	-14.533	1.00	16.83	A
ATOM	776	CZ	TYR	A	102	-26.574	4.231	-15.362	1.00	17.72	A
ATOM	777	OH	TYR	A	102	-27.843	3.776	-15.086	1.00	19.73	A
ATOM	778	C	TYR	A	102	-21.870	3.163	-16.691	1.00	11.60	A
ATOM	779	O	TYR	A	102	-22.555	2.272	-17.194	1.00	11.84	A
ATOM	780	N	LEU	A	103	-21.081	2.973	-15.636	1.00	9.56	A
ATOM	781	CA	LEU	A	103	-20.979	1.690	-14.954	1.00	8.12	A
ATOM	782	CB	LEU	A	103	-20.022	0.743	-15.694	1.00	8.06	A
ATOM	783	CG	LEU	A	103	-19.983	-0.682	-15.115	1.00	7.72	A
ATOM	784	CD1	LEU	A	103	-19.586	-1.676	-16.152	1.00	8.20	A

10

20

30

40

ATOM	785	CD2	LEU	A	103	-19.049	-0.720	-13.930	1.00	7.20	A
ATOM	786	C	LEU	A	103	-20.488	1.948	-13.526	1.00	9.01	A
ATOM	787	O	LEU	A	103	-19.541	2.692	-13.313	1.00	8.51	A
ATOM	788	N	LEU	A	104	-21.136	1.319	-12.551	1.00	9.89	A
ATOM	789	CA	LEU	A	104	-20.773	1.513	-11.158	1.00	10.66	A
ATOM	790	CB	LEU	A	104	-21.958	2.088	-10.398	1.00	10.47	A
ATOM	791	CG	LEU	A	104	-22.586	3.339	-11.002	1.00	9.11	A
ATOM	792	CD1	LEU	A	104	-23.833	3.732	-10.219	1.00	8.12	A
ATOM	793	CD2	LEU	A	104	-21.576	4.465	-10.984	1.00	8.64	A
ATOM	794	C	LEU	A	104	-20.354	0.225	-10.485	1.00	11.23	A
ATOM	795	O	LEU	A	104	-21.083	-0.758	-10.534	1.00	13.70	A
ATOM	796	N	PHE	A	105	-19.202	0.232	-9.829	1.00	10.76	A
ATOM	797	CA	PHE	A	105	-18.748	-0.969	-9.153	1.00	11.87	A
ATOM	798	CB	PHE	A	105	-17.829	-1.782	-10.068	1.00	10.16	A
ATOM	799	CG	PHE	A	105	-16.489	-1.140	-10.292	1.00	9.81	A
ATOM	800	CD1	PHE	A	105	-16.337	-0.129	-11.249	1.00	8.87	A
ATOM	801	CD2	PHE	A	105	-15.391	-1.494	-9.482	1.00	8.20	A
ATOM	802	CE1	PHE	A	105	-15.118	0.521	-11.394	1.00	9.90	A
ATOM	803	CE2	PHE	A	105	-14.164	-0.857	-9.606	1.00	6.67	A
ATOM	804	CZ	PHE	A	105	-14.016	0.156	-10.563	1.00	9.33	A
ATOM	805	C	PHE	A	105	-17.996	-0.615	-7.877	1.00	14.65	A
ATOM	806	O	PHE	A	105	-17.598	0.535	-7.675	1.00	13.84	A
ATOM	807	N	CYS	A	106	-17.809	-1.620	-7.028	1.00	17.88	A
ATOM	808	CA	CYS	A	106	-17.085	-1.469	-5.774	1.00	21.18	A
ATOM	809	C	CYS	A	106	-16.159	-2.660	-5.649	1.00	24.19	A
ATOM	810	O	CYS	A	106	-16.388	-3.698	-6.272	1.00	24.79	A
ATOM	811	CB	CYS	A	106	-18.026	-1.484	-4.571	1.00	20.47	A
ATOM	812	SG	CYS	A	106	-19.182	-0.095	-4.399	1.00	22.55	A
ATOM	813	N	MET	A	107	-15.115	-2.521	-4.846	1.00	27.17	A
ATOM	814	CA	MET	A	107	-14.205	-3.625	-4.652	1.00	32.34	A
ATOM	815	CB	MET	A	107	-12.999	-3.483	-5.575	1.00	31.11	A
ATOM	816	CG	MET	A	107	-12.201	-2.228	-5.382	1.00	30.90	A
ATOM	817	SD	MET	A	107	-11.147	-1.907	-6.805	1.00	30.75	A
ATOM	818	CE	MET	A	107	-11.313	-0.129	-6.939	1.00	30.73	A
ATOM	819	C	MET	A	107	-13.779	-3.692	-3.202	1.00	36.20	A
ATOM	820	O	MET	A	107	-13.458	-2.670	-2.606	1.00	36.17	A
ATOM	821	N	GLU	A	108	-13.806	-4.894	-2.625	1.00	41.42	A
ATOM	822	CA	GLU	A	108	-13.416	-5.086	-1.225	1.00	45.26	A
ATOM	823	CB	GLU	A	108	-14.655	-5.281	-0.344	1.00	45.70	A
ATOM	824	CG	GLU	A	108	-15.475	-6.512	-0.691	1.00	47.75	A
ATOM	825	CD	GLU	A	108	-16.441	-6.901	0.412	1.00	48.53	A
ATOM	826	OE1	GLU	A	108	-17.331	-6.087	0.742	1.00	48.20	A
ATOM	827	OE2	GLU	A	108	-16.303	-8.024	0.948	1.00	50.31	A
ATOM	828	C	GLU	A	108	-12.500	-6.287	-1.055	1.00	47.65	A
ATOM	829	O	GLU	A	108	-12.474	-7.181	-1.894	1.00	47.55	A
ATOM	830	N	ASN	A	109	-11.744	-6.297	0.034	1.00	51.81	A
ATOM	831	CA	ASN	A	109	-10.852	-7.408	0.310	1.00	56.91	A
ATOM	832	CB	ASN	A	109	-9.469	-6.900	0.729	1.00	58.54	A
ATOM	833	CG	ASN	A	109	-8.779	-6.089	-0.373	1.00	60.68	A
ATOM	834	OD1	ASN	A	109	-9.271	-5.030	-0.790	1.00	61.57	A
ATOM	835	ND2	ASN	A	109	-7.636	-6.590	-0.853	1.00	60.43	A
ATOM	836	C	ASN	A	109	-11.451	-8.258	1.415	1.00	59.35	A
ATOM	837	O	ASN	A	109	-11.616	-7.800	2.544	1.00	59.16	A
ATOM	838	N	SER	A	110	-11.789	-9.494	1.072	1.00	63.16	A
ATOM	839	CA	SER	A	110	-12.367	-10.425	2.034	1.00	66.90	A
ATOM	840	CB	SER	A	110	-12.335	-11.850	1.471	1.00	66.79	A
ATOM	841	OG	SER	A	110	-12.800	-12.790	2.426	0.00	67.03	A
ATOM	842	C	SER	A	110	-11.629	-10.390	3.378	1.00	68.96	A
ATOM	843	O	SER	A	110	-12.247	-10.508	4.442	1.00	69.21	A
ATOM	844	N	ALA	A	111	-10.309	-10.228	3.324	1.00	70.87	A
ATOM	845	CA	ALA	A	111	-9.497	-10.182	4.534	1.00	73.10	A

10

20

30

40

ATOM	846	CB	ALA	A	111	-8.041	-9.886	4.178	1.00	74.11	A
ATOM	847	C	ALA	A	111	-10.027	-9.127	5.502	1.00	74.80	A
ATOM	848	O	ALA	A	111	-10.281	-9.414	6.672	1.00	75.12	A
ATOM	849	N	GLU	A	112	-10.191	-7.904	5.010	1.00	76.54	A
ATOM	850	CA	GLU	A	112	-10.699	-6.812	5.832	1.00	77.67	A
ATOM	851	CB	GLU	A	112	-9.578	-5.812	6.142	1.00	78.60	A
ATOM	852	CG	GLU	A	112	-8.796	-6.095	7.440	1.00	79.84	A
ATOM	853	CD	GLU	A	112	-8.054	-7.425	7.433	1.00	80.21	A
ATOM	854	OE1	GLU	A	112	-7.213	-7.638	6.529	1.00	80.30	A
ATOM	855	OE2	GLU	A	112	-8.305	-8.248	8.344	1.00	79.95	A
ATOM	856	C	GLU	A	112	-11.858	-6.105	5.130	1.00	77.80	A
ATOM	857	O	GLU	A	112	-11.687	-5.032	4.555	1.00	77.90	A
ATOM	858	N	PRO	A	113	-13.060	-6.710	5.164	1.00	77.88	A
ATOM	859	CD	PRO	A	113	-13.373	-8.027	5.750	1.00	77.78	A
ATOM	860	CA	PRO	A	113	-14.248	-6.130	4.527	1.00	77.56	A
ATOM	861	CB	PRO	A	113	-15.233	-7.294	4.526	1.00	77.90	A
ATOM	862	CG	PRO	A	113	-14.885	-8.010	5.793	1.00	78.21	A
ATOM	863	C	PRO	A	113	-14.791	-4.909	5.275	1.00	76.94	A
ATOM	864	O	PRO	A	113	-15.998	-4.664	5.290	1.00	77.05	A
ATOM	865	N	GLU	A	114	-13.888	-4.151	5.893	1.00	75.57	A
ATOM	866	CA	GLU	A	114	-14.258	-2.954	6.646	1.00	73.78	A
ATOM	867	CB	GLU	A	114	-14.203	-3.244	8.151	1.00	75.45	A
ATOM	868	CG	GLU	A	114	-15.247	-4.243	8.650	1.00	78.06	A
ATOM	869	CD	GLU	A	114	-15.136	-4.521	10.149	1.00	79.68	A
ATOM	870	OE1	GLU	A	114	-15.184	-3.554	10.947	1.00	80.23	A
ATOM	871	OE2	GLU	A	114	-15.006	-5.709	10.529	1.00	80.56	A
ATOM	872	C	GLU	A	114	-13.327	-1.785	6.314	1.00	71.15	A
ATOM	873	O	GLU	A	114	-13.738	-0.620	6.330	1.00	70.50	A
ATOM	874	N	GLN	A	115	-12.071	-2.110	6.017	1.00	68.29	A
ATOM	875	CA	GLN	A	115	-11.057	-1.110	5.681	1.00	64.44	A
ATOM	876	CB	GLN	A	115	-9.952	-1.083	6.757	1.00	66.01	A
ATOM	877	CG	GLN	A	115	-9.552	-2.450	7.325	1.00	66.72	A
ATOM	878	CD	GLN	A	115	-10.479	-2.918	8.444	1.00	67.94	A
ATOM	879	OE1	GLN	A	115	-10.572	-2.282	9.497	1.00	68.73	A
ATOM	880	NE2	GLN	A	115	-11.166	-4.035	8.220	1.00	68.36	A
ATOM	881	C	GLN	A	115	-10.436	-1.334	4.297	1.00	59.98	A
ATOM	882	O	GLN	A	115	-9.217	-1.230	4.120	1.00	59.29	A
ATOM	883	N	SER	A	116	-11.289	-1.638	3.322	1.00	54.28	A
ATOM	884	CA	SER	A	116	-10.852	-1.868	1.956	1.00	48.50	A
ATOM	885	CB	SER	A	116	-10.068	-3.177	1.847	1.00	49.02	A
ATOM	886	OG	SER	A	116	-10.929	-4.299	1.952	1.00	48.61	A
ATOM	887	C	SER	A	116	-12.041	-1.914	1.009	1.00	44.48	A
ATOM	888	O	SER	A	116	-12.159	-2.826	0.200	1.00	45.41	A
ATOM	889	N	LEU	A	117	-12.939	-0.946	1.123	1.00	39.02	A
ATOM	890	CA	LEU	A	117	-14.085	-0.894	0.233	1.00	33.21	A
ATOM	891	CB	LEU	A	117	-15.398	-0.842	1.023	1.00	32.48	A
ATOM	892	CG	LEU	A	117	-16.677	-0.687	0.179	1.00	32.08	A
ATOM	893	CD1	LEU	A	117	-16.989	-1.984	-0.551	1.00	32.14	A
ATOM	894	CD2	LEU	A	117	-17.843	-0.320	1.073	1.00	32.82	A
ATOM	895	C	LEU	A	117	-13.965	0.348	-0.643	1.00	29.70	A
ATOM	896	O	LEU	A	117	-14.139	1.469	-0.164	1.00	29.28	A
ATOM	897	N	ALA	A	118	-13.640	0.152	-1.917	1.00	25.59	A
ATOM	898	CA	ALA	A	118	-13.524	1.268	-2.854	1.00	21.14	A
ATOM	899	CB	ALA	A	118	-12.120	1.322	-3.465	1.00	19.41	A
ATOM	900	C	ALA	A	118	-14.566	1.083	-3.942	1.00	17.56	A
ATOM	901	O	ALA	A	118	-14.859	-0.038	-4.351	1.00	17.34	A
ATOM	902	N	CYS	A	119	-15.133	2.185	-4.402	1.00	15.41	A
ATOM	903	CA	CYS	A	119	-16.147	2.127	-5.447	1.00	14.62	A
ATOM	904	C	CYS	A	119	-15.805	3.145	-6.520	1.00	12.55	A
ATOM	905	O	CYS	A	119	-15.160	4.150	-6.239	1.00	12.39	A
ATOM	906	CB	CYS	A	119	-17.527	2.449	-4.881	1.00	16.58	A

10

20

30

40

ATOM	907	SG	CYS	A	119	-18.118	1.399	-3.507	1.00	19.89	A
ATOM	908	N	GLN	A	120	-16.242	2.902	-7.751	1.00	11.31	A
ATOM	909	CA	GLN	A	120	-15.931	3.837	-8.826	1.00	9.34	A
ATOM	910	CB	GLN	A	120	-14.691	3.382	-9.600	1.00	8.23	A
ATOM	911	CG	GLN	A	120	-13.408	3.510	-8.824	1.00	9.44	A
ATOM	912	CD	GLN	A	120	-12.192	3.228	-9.666	1.00	10.28	A
ATOM	913	OE1	GLN	A	120	-12.276	3.187	-10.895	1.00	9.16	A
ATOM	914	NE2	GLN	A	120	-11.042	3.044	-9.011	1.00	11.24	A
ATOM	915	C	GLN	A	120	-17.055	4.029	-9.808	1.00	7.85	A
ATOM	916	O	GLN	A	120	-17.935	3.191	-9.936	1.00	8.44	A
ATOM	917	N	CYS	A	121	-17.015	5.160	-10.491	1.00	6.54	A
ATOM	918	CA	CYS	A	121	-17.985	5.467	-11.505	1.00	5.28	A
ATOM	919	CB	CYS	A	121	-18.684	6.774	-11.200	1.00	3.98	A
ATOM	920	SG	CYS	A	121	-19.807	7.249	-12.559	1.00	6.72	A
ATOM	921	C	CYS	A	121	-17.230	5.594	-12.829	1.00	5.88	A
ATOM	922	O	CYS	A	121	-16.462	6.539	-13.035	1.00	6.74	A
ATOM	923	N	LEU	A	122	-17.439	4.621	-13.711	1.00	4.93	A
ATOM	924	CA	LEU	A	122	-16.796	4.583	-15.016	1.00	4.70	A
ATOM	925	CB	LEU	A	122	-16.472	3.133	-15.390	1.00	2.79	A
ATOM	926	CG	LEU	A	122	-15.544	2.308	-14.507	1.00	3.05	A
ATOM	927	CD1	LEU	A	122	-15.272	0.946	-15.164	1.00	1.00	A
ATOM	928	CD2	LEU	A	122	-14.247	3.051	-14.288	1.00	2.57	A
ATOM	929	C	LEU	A	122	-17.708	5.192	-16.085	1.00	4.56	A
ATOM	930	O	LEU	A	122	-18.909	5.334	-15.871	1.00	3.87	A
ATOM	931	N	VAL	A	123	-17.130	5.577	-17.221	1.00	5.28	A
ATOM	932	CA	VAL	A	123	-17.908	6.131	-18.327	1.00	7.18	A
ATOM	933	CB	VAL	A	123	-18.066	7.656	-18.252	1.00	5.88	A
ATOM	934	CG1	VAL	A	123	-19.103	8.011	-17.226	1.00	4.32	A
ATOM	935	CG2	VAL	A	123	-16.727	8.304	-17.961	1.00	5.09	A
ATOM	936	C	VAL	A	123	-17.262	5.806	-19.655	1.00	8.00	A
ATOM	937	O	VAL	A	123	-16.063	5.591	-19.731	1.00	9.15	A
ATOM	938	N	ARG	A	124	-18.061	5.783	-20.708	1.00	9.32	A
ATOM	939	CA	ARG	A	124	-17.546	5.467	-22.024	1.00	11.59	A
ATOM	940	CB	ARG	A	124	-18.701	5.084	-22.931	1.00	10.68	A
ATOM	941	CG	ARG	A	124	-19.397	3.813	-22.512	1.00	9.01	A
ATOM	942	CD	ARG	A	124	-18.512	2.641	-22.744	1.00	10.13	A
ATOM	943	NE	ARG	A	124	-19.251	1.379	-22.807	1.00	10.56	A
ATOM	944	CZ	ARG	A	124	-18.684	0.222	-23.122	1.00	10.23	A
ATOM	945	NH1	ARG	A	124	-17.387	0.172	-23.399	1.00	11.34	A
ATOM	946	NH2	ARG	A	124	-19.401	-0.878	-23.151	1.00	9.22	A
ATOM	947	C	ARG	A	124	-16.742	6.600	-22.646	1.00	12.71	A
ATOM	948	O	ARG	A	124	-15.653	6.378	-23.172	1.00	11.93	A
ATOM	949	N	THR	A	125	-17.265	7.817	-22.598	1.00	13.65	A
ATOM	950	CA	THR	A	125	-16.533	8.934	-23.177	1.00	14.62	A
ATOM	951	CB	THR	A	125	-17.445	9.802	-24.041	1.00	14.21	A
ATOM	952	OG1	THR	A	125	-18.544	10.273	-23.253	1.00	13.29	A
ATOM	953	CG2	THR	A	125	-17.951	8.995	-25.232	1.00	12.45	A
ATOM	954	C	THR	A	125	-15.885	9.784	-22.098	1.00	15.60	A
ATOM	955	O	THR	A	125	-16.376	9.859	-20.977	1.00	17.35	A
ATOM	956	N	PRO	A	126	-14.757	10.427	-22.422	1.00	15.78	A
ATOM	957	CD	PRO	A	126	-14.037	10.316	-23.700	1.00	16.42	A
ATOM	958	CA	PRO	A	126	-14.019	11.274	-21.488	1.00	16.99	A
ATOM	959	CB	PRO	A	126	-12.689	11.472	-22.203	1.00	17.41	A
ATOM	960	CG	PRO	A	126	-13.083	11.474	-23.641	1.00	15.72	A
ATOM	961	C	PRO	A	126	-14.717	12.596	-21.183	1.00	18.38	A
ATOM	962	O	PRO	A	126	-14.110	13.671	-21.247	1.00	18.55	A
ATOM	963	N	GLU	A	127	-15.995	12.508	-20.844	1.00	19.23	A
ATOM	964	CA	GLU	A	127	-16.789	13.686	-20.562	1.00	19.40	A
ATOM	965	CB	GLU	A	127	-17.916	13.797	-21.595	1.00	21.19	A
ATOM	966	CG	GLU	A	127	-18.145	15.195	-22.115	1.00	25.72	A
ATOM	967	CD	GLU	A	127	-17.240	15.548	-23.277	1.00	28.77	A

10

20

30

40

ATOM	968	OE1	GLU	A	127	-16.003	15.421	-23.156	1.00	31.16	A	
ATOM	969	OE2	GLU	A	127	-17.774	15.970	-24.319	1.00	30.40	A	
ATOM	970	C	GLU	A	127	-17.362	13.511	-19.176	1.00	18.77	A	
ATOM	971	O	GLU	A	127	-17.372	12.399	-18.644	1.00	17.85	A	
ATOM	972	N	VAL	A	128	-17.816	14.609	-18.581	1.00	18.87	A	
ATOM	973	CA	VAL	A	128	-18.422	14.551	-17.259	1.00	19.36	A	
ATOM	974	CB	VAL	A	128	-18.215	15.865	-16.488	1.00	19.07	A	
ATOM	975	CG1	VAL	A	128	-18.943	15.808	-15.150	1.00	16.94	A	
ATOM	976	CG2	VAL	A	128	-16.731	16.100	-16.285	1.00	19.94	A	
ATOM	977	C	VAL	A	128	-19.925	14.274	-17.392	1.00	19.92	A	
ATOM	978	O	VAL	A	128	-20.694	15.098	-17.885	1.00	18.96	A	
ATOM	979	N	ASP	A	129	-20.335	13.095	-16.952	1.00	21.31	A	10
ATOM	980	CA	ASP	A	129	-21.735	12.708	-17.018	1.00	22.53	A	
ATOM	981	CB	ASP	A	129	-21.839	11.213	-17.310	1.00	22.60	A	
ATOM	982	CG	ASP	A	129	-23.247	10.784	-17.628	1.00	24.84	A	
ATOM	983	OD1	ASP	A	129	-24.172	11.273	-16.931	1.00	25.94	A	
ATOM	984	OD2	ASP	A	129	-23.428	9.955	-18.563	1.00	24.73	A	
ATOM	985	C	ASP	A	129	-22.402	13.026	-15.681	1.00	23.04	A	
ATOM	986	O	ASP	A	129	-22.375	12.214	-14.767	1.00	22.72	A	
ATOM	987	N	ASP	A	130	-23.007	14.203	-15.568	1.00	25.17	A	
ATOM	988	CA	ASP	A	130	-23.652	14.599	-14.324	1.00	27.39	A	
ATOM	989	CB	ASP	A	130	-24.307	15.967	-14.483	1.00	28.36	A	
ATOM	990	CG	ASP	A	130	-23.295	17.080	-14.682	1.00	30.38	A	
ATOM	991	OD1	ASP	A	130	-22.407	17.253	-13.811	1.00	30.27	A	
ATOM	992	OD2	ASP	A	130	-23.402	17.791	-15.707	1.00	31.41	A	20
ATOM	993	C	ASP	A	130	-24.689	13.589	-13.829	1.00	28.10	A	
ATOM	994	O	ASP	A	130	-24.758	13.288	-12.629	1.00	27.21	A	
ATOM	995	N	GLU	A	131	-25.497	13.073	-14.749	1.00	28.87	A	
ATOM	996	CA	GLU	A	131	-26.528	12.098	-14.396	1.00	30.34	A	
ATOM	997	CB	GLU	A	131	-27.415	11.780	-15.608	1.00	32.40	A	
ATOM	998	CG	GLU	A	131	-28.620	10.891	-15.283	1.00	36.77	A	
ATOM	999	CD	GLU	A	131	-29.516	10.597	-16.495	1.00	39.79	A	
ATOM	1000	OE1	GLU	A	131	-29.391	9.498	-17.097	1.00	39.74	A	
ATOM	1001	OE2	GLU	A	131	-30.347	11.473	-16.842	1.00	41.54	A	
ATOM	1002	C	GLU	A	131	-25.902	10.804	-13.871	1.00	29.77	A	
ATOM	1003	O	GLU	A	131	-26.481	10.124	-13.013	1.00	30.31	A	
ATOM	1004	N	ALA	A	132	-24.724	10.462	-14.390	1.00	27.73	A	
ATOM	1005	CA	ALA	A	132	-24.022	9.261	-13.961	1.00	24.94	A	
ATOM	1006	CB	ALA	A	132	-22.890	8.951	-14.917	1.00	25.43	A	30
ATOM	1007	C	ALA	A	132	-23.485	9.459	-12.547	1.00	24.00	A	
ATOM	1008	O	ALA	A	132	-23.628	8.584	-11.690	1.00	22.89	A	
ATOM	1009	N	LEU	A	133	-22.875	10.613	-12.301	1.00	22.77	A	
ATOM	1010	CA	LEU	A	133	-22.346	10.916	-10.978	1.00	23.19	A	
ATOM	1011	CB	LEU	A	133	-21.685	12.293	-10.977	1.00	21.08	A	
ATOM	1012	CG	LEU	A	133	-20.298	12.301	-11.606	1.00	20.59	A	
ATOM	1013	CD1	LEU	A	133	-19.737	13.703	-11.645	1.00	20.36	A	
ATOM	1014	CD2	LEU	A	133	-19.398	11.374	-10.808	1.00	20.36	A	
ATOM	1015	C	LEU	A	133	-23.490	10.889	-9.976	1.00	23.95	A	
ATOM	1016	O	LEU	A	133	-23.321	10.464	-8.835	1.00	24.50	A	
ATOM	1017	N	GLU	A	134	-24.653	11.349	-10.428	1.00	24.99	A	
ATOM	1018	CA	GLU	A	134	-25.855	11.383	-9.619	1.00	25.76	A	
ATOM	1019	CB	GLU	A	134	-27.027	11.882	-10.457	1.00	28.60	A	
ATOM	1020	CG	GLU	A	134	-27.242	13.373	-10.379	1.00	34.21	A	40
ATOM	1021	CD	GLU	A	134	-27.894	13.791	-9.068	1.00	38.01	A	
ATOM	1022	OE1	GLU	A	134	-29.127	13.596	-8.931	1.00	40.41	A	
ATOM	1023	OE2	GLU	A	134	-27.175	14.300	-8.173	1.00	39.41	A	
ATOM	1024	C	GLU	A	134	-26.169	10.002	-9.081	1.00	25.10	A	
ATOM	1025	O	GLU	A	134	-26.307	9.797	-7.877	1.00	25.75	A	
ATOM	1026	N	LYS	A	135	-26.286	9.042	-9.980	1.00	23.93	A	
ATOM	1027	CA	LYS	A	135	-26.581	7.696	-9.550	1.00	22.05	A	
ATOM	1028	CB	LYS	A	135	-26.738	6.789	-10.767	1.00	21.87	A	

ATOM	1029	CG	LYS	A	135	-27.675	7.367	-11.806	1.00	22.27	A
ATOM	1030	CD	LYS	A	135	-28.199	6.301	-12.732	1.00	23.04	A
ATOM	1031	CE	LYS	A	135	-29.081	6.926	-13.792	1.00	24.13	A
ATOM	1032	NZ	LYS	A	135	-29.705	5.909	-14.672	1.00	25.19	A
ATOM	1033	C	LYS	A	135	-25.470	7.187	-8.645	1.00	20.93	A
ATOM	1034	O	LYS	A	135	-25.715	6.338	-7.810	1.00	22.80	A
ATOM	1035	N	PHE	A	136	-24.256	7.712	-8.800	1.00	19.44	A
ATOM	1036	CA	PHE	A	136	-23.123	7.276	-7.986	1.00	17.59	A
ATOM	1037	CB	PHE	A	136	-21.804	7.753	-8.623	1.00	16.15	A
ATOM	1038	CG	PHE	A	136	-20.553	7.155	-8.008	1.00	12.06	A
ATOM	1039	CD1	PHE	A	136	-20.380	5.777	-7.924	1.00	10.59	A
ATOM	1040	CD2	PHE	A	136	-19.523	7.986	-7.562	1.00	10.64	A
ATOM	1041	CE1	PHE	A	136	-19.194	5.235	-7.408	1.00	8.70	A
ATOM	1042	CE2	PHE	A	136	-18.333	7.461	-7.045	1.00	8.38	A
ATOM	1043	CZ	PHE	A	136	-18.170	6.080	-6.970	1.00	8.38	A
ATOM	1044	C	PHE	A	136	-23.263	7.820	-6.575	1.00	17.94	A
ATOM	1045	O	PHE	A	136	-23.060	7.094	-5.610	1.00	18.11	A
ATOM	1046	N	ASP	A	137	-23.608	9.097	-6.454	1.00	18.56	A
ATOM	1047	CA	ASP	A	137	-23.777	9.705	-5.140	1.00	20.78	A
ATOM	1048	CB	ASP	A	137	-24.020	11.199	-5.283	1.00	21.98	A
ATOM	1049	CG	ASP	A	137	-22.761	11.933	-5.650	1.00	26.64	A
ATOM	1050	OD1	ASP	A	137	-22.791	13.172	-5.803	1.00	28.97	A
ATOM	1051	OD2	ASP	A	137	-21.715	11.255	-5.780	1.00	29.46	A
ATOM	1052	C	ASP	A	137	-24.916	9.055	-4.381	1.00	21.56	A
ATOM	1053	O	ASP	A	137	-24.829	8.823	-3.180	1.00	20.68	A
ATOM	1054	N	LYS	A	138	-25.978	8.757	-5.114	1.00	23.89	A
ATOM	1055	CA	LYS	A	138	-27.163	8.119	-4.575	1.00	24.77	A
ATOM	1056	CB	LYS	A	138	-28.201	7.983	-5.685	1.00	26.49	A
ATOM	1057	CG	LYS	A	138	-29.590	8.464	-5.311	1.00	29.38	A
ATOM	1058	CD	LYS	A	138	-30.440	8.746	-6.551	1.00	31.73	A
ATOM	1059	CE	LYS	A	138	-30.787	7.464	-7.309	1.00	33.18	A
ATOM	1060	NZ	LYS	A	138	-31.684	6.561	-6.512	1.00	32.38	A
ATOM	1061	C	LYS	A	138	-26.834	6.738	-4.020	1.00	24.53	A
ATOM	1062	O	LYS	A	138	-27.283	6.368	-2.933	1.00	25.44	A
ATOM	1063	N	ALA	A	139	-26.047	5.981	-4.771	1.00	23.16	A
ATOM	1064	CA	ALA	A	139	-25.684	4.640	-4.365	1.00	22.42	A
ATOM	1065	CB	ALA	A	139	-25.192	3.859	-5.557	1.00	22.54	A
ATOM	1066	C	ALA	A	139	-24.631	4.653	-3.296	1.00	22.29	A
ATOM	1067	O	ALA	A	139	-24.315	3.619	-2.725	1.00	23.95	A
ATOM	1068	N	LEU	A	140	-24.091	5.823	-3.007	1.00	22.46	A
ATOM	1069	CA	LEU	A	140	-23.050	5.906	-2.002	1.00	22.59	A
ATOM	1070	CB	LEU	A	140	-21.923	6.819	-2.494	1.00	21.49	A
ATOM	1071	CG	LEU	A	140	-20.640	6.154	-2.992	1.00	20.22	A
ATOM	1072	CD1	LEU	A	140	-20.962	5.055	-3.974	1.00	20.98	A
ATOM	1073	CD2	LEU	A	140	-19.746	7.196	-3.618	1.00	19.16	A
ATOM	1074	C	LEU	A	140	-23.552	6.400	-0.661	1.00	23.85	A
ATOM	1075	O	LEU	A	140	-22.930	6.131	0.362	1.00	24.84	A
ATOM	1076	N	LYS	A	141	-24.684	7.098	-0.660	1.00	23.81	A
ATOM	1077	CA	LYS	A	141	-25.221	7.650	0.572	1.00	23.95	A
ATOM	1078	CB	LYS	A	141	-26.479	8.488	0.275	1.00	27.33	A
ATOM	1079	CG	LYS	A	141	-27.732	7.679	-0.062	1.00	31.67	A
ATOM	1080	CD	LYS	A	141	-28.961	8.581	-0.222	1.00	34.16	A
ATOM	1081	CE	LYS	A	141	-30.252	7.750	-0.167	1.00	35.86	A
ATOM	1082	NZ	LYS	A	141	-31.508	8.520	-0.454	1.00	34.90	A
ATOM	1083	C	LYS	A	141	-25.521	6.577	1.620	1.00	22.86	A
ATOM	1084	O	LYS	A	141	-25.814	6.886	2.776	1.00	23.16	A
ATOM	1085	N	ALA	A	142	-25.425	5.320	1.202	1.00	21.93	A
ATOM	1086	CA	ALA	A	142	-25.673	4.164	2.058	1.00	20.55	A
ATOM	1087	CB	ALA	A	142	-26.646	3.227	1.371	1.00	20.26	A
ATOM	1088	C	ALA	A	142	-24.373	3.399	2.385	1.00	20.23	A
ATOM	1089	O	ALA	A	142	-24.393	2.329	2.994	1.00	20.08	A

10

20

30

40

ATOM	1090	N	LEU	A	143	-23.241	3.928	1.957	1.00	19.08	A
ATOM	1091	CA	LEU	A	143	-21.983	3.284	2.249	1.00	16.71	A
ATOM	1092	CB	LEU	A	143	-21.222	2.995	0.957	1.00	16.66	A
ATOM	1093	CG	LEU	A	143	-21.938	2.027	0.009	1.00	14.82	A
ATOM	1094	CD1	LEU	A	143	-21.160	1.904	-1.280	1.00	11.61	A
ATOM	1095	CD2	LEU	A	143	-22.080	0.661	0.683	1.00	14.87	A
ATOM	1096	C	LEU	A	143	-21.186	4.210	3.152	1.00	16.35	A
ATOM	1097	O	LEU	A	143	-21.389	5.427	3.138	1.00	16.52	A
ATOM	1098	N	PRO	A	144	-20.266	3.639	3.954	1.00	16.35	A
ATOM	1099	CD	PRO	A	144	-20.060	2.183	4.085	1.00	15.80	A
ATOM	1100	CA	PRO	A	144	-19.410	4.356	4.896	1.00	14.08	A
ATOM	1101	CB	PRO	A	144	-19.073	3.278	5.904	1.00	15.09	A
ATOM	1102	CG	PRO	A	144	-18.889	2.090	5.023	1.00	14.40	A
ATOM	1103	C	PRO	A	144	-18.185	4.926	4.221	1.00	12.91	A
ATOM	1104	O	PRO	A	144	-17.054	4.622	4.612	1.00	11.28	A
ATOM	1105	N	MET	A	145	-18.419	5.753	3.204	1.00	11.90	A
ATOM	1106	CA	MET	A	145	-17.332	6.378	2.456	1.00	10.38	A
ATOM	1107	CB	MET	A	145	-17.820	6.851	1.083	1.00	10.21	A
ATOM	1108	CG	MET	A	145	-18.395	5.753	0.207	1.00	12.43	A
ATOM	1109	SD	MET	A	145	-17.224	4.412	-0.200	1.00	13.28	A
ATOM	1110	CE	MET	A	145	-17.618	3.241	1.092	1.00	14.67	A
ATOM	1111	C	MET	A	145	-16.819	7.566	3.229	1.00	9.66	A
ATOM	1112	O	MET	A	145	-17.605	8.384	3.689	1.00	11.74	A
ATOM	1113	N	HIS	A	146	-15.506	7.663	3.388	1.00	9.91	A
ATOM	1114	CA	HIS	A	146	-14.936	8.807	4.098	1.00	9.87	A
ATOM	1115	CB	HIS	A	146	-14.282	8.358	5.403	1.00	8.49	A
ATOM	1116	CG	HIS	A	146	-15.269	7.866	6.418	1.00	9.17	A
ATOM	1117	CD2	HIS	A	146	-15.920	8.512	7.415	1.00	8.75	A
ATOM	1118	ND1	HIS	A	146	-15.717	6.565	6.448	1.00	8.57	A
ATOM	1119	CE1	HIS	A	146	-16.599	6.427	7.422	1.00	7.28	A
ATOM	1120	NE2	HIS	A	146	-16.738	7.592	8.024	1.00	8.13	A
ATOM	1121	C	HIS	A	146	-13.946	9.581	3.233	1.00	8.88	A
ATOM	1122	O	HIS	A	146	-13.035	10.211	3.741	1.00	9.73	A
ATOM	1123	N	ILE	A	147	-14.158	9.542	1.923	1.00	10.01	A
ATOM	1124	CA	ILE	A	147	-13.315	10.234	0.954	1.00	9.28	A
ATOM	1125	CB	ILE	A	147	-11.833	9.773	1.028	1.00	9.29	A
ATOM	1126	CG2	ILE	A	147	-11.765	8.271	1.046	1.00	10.92	A
ATOM	1127	CG1	ILE	A	147	-11.054	10.332	-0.163	1.00	8.05	A
ATOM	1128	CD1	ILE	A	147	-9.542	10.152	-0.042	1.00	8.07	A
ATOM	1129	C	ILE	A	147	-13.862	9.957	-0.439	1.00	9.12	A
ATOM	1130	O	ILE	A	147	-14.181	8.812	-0.772	1.00	8.68	A
ATOM	1131	N	ARG	A	148	-13.993	11.011	-1.239	1.00	8.42	A
ATOM	1132	CA	ARG	A	148	-14.501	10.878	-2.607	1.00	10.40	A
ATOM	1133	CB	ARG	A	148	-15.975	11.295	-2.724	1.00	13.43	A
ATOM	1134	CG	ARG	A	148	-16.996	10.452	-1.996	1.00	19.51	A
ATOM	1135	CD	ARG	A	148	-17.301	10.971	-0.586	1.00	23.86	A
ATOM	1136	NE	ARG	A	148	-18.387	10.192	-0.002	1.00	27.00	A
ATOM	1137	CZ	ARG	A	148	-19.646	10.211	-0.439	1.00	29.04	A
ATOM	1138	NH1	ARG	A	148	-19.986	10.987	-1.461	1.00	29.76	A
ATOM	1139	NH2	ARG	A	148	-20.561	9.416	0.115	1.00	30.58	A
ATOM	1140	C	ARG	A	148	-13.729	11.790	-3.537	1.00	9.25	A
ATOM	1141	O	ARG	A	148	-13.368	12.896	-3.151	1.00	8.09	A
ATOM	1142	N	LEU	A	149	-13.497	11.346	-4.767	1.00	8.09	A
ATOM	1143	CA	LEU	A	149	-12.792	12.171	-5.741	1.00	8.72	A
ATOM	1144	CB	LEU	A	149	-11.347	11.686	-5.954	1.00	9.94	A
ATOM	1145	CG	LEU	A	149	-10.315	11.644	-4.821	1.00	11.17	A
ATOM	1146	CD1	LEU	A	149	-10.696	10.566	-3.809	1.00	13.78	A
ATOM	1147	CD2	LEU	A	149	-8.959	11.343	-5.398	1.00	11.11	A
ATOM	1148	C	LEU	A	149	-13.520	12.142	-7.088	1.00	9.46	A
ATOM	1149	O	LEU	A	149	-14.094	11.120	-7.486	1.00	8.08	A
ATOM	1150	N	SER	A	150	-13.491	13.272	-7.785	1.00	10.68	A

10

20

30

40

ATOM	1151	CA	SER	A	150	-14.108	13.391	-9.111	1.00	12.68	A
ATOM	1152	CB	SER	A	150	-15.379	14.239	-9.041	1.00	13.11	A
ATOM	1153	OG	SER	A	150	-15.921	14.443	-10.333	1.00	15.87	A
ATOM	1154	C	SER	A	150	-13.117	14.052	-10.076	1.00	12.26	A
ATOM	1155	O	SER	A	150	-12.519	15.077	-9.746	1.00	11.98	A
ATOM	1156	N	PHE	A	151	-12.979	13.506	-11.278	1.00	12.33	A
ATOM	1157	CA	PHE	A	151	-12.035	14.073	-12.231	1.00	14.30	A
ATOM	1158	CB	PHE	A	151	-11.174	12.934	-12.804	1.00	13.88	A
ATOM	1159	CG	PHE	A	151	-10.390	12.186	-11.754	1.00	14.26	A
ATOM	1160	CD1	PHE	A	151	-9.346	12.800	-11.068	1.00	13.10	A
ATOM	1161	CD2	PHE	A	151	-10.731	10.882	-11.413	1.00	14.46	A
ATOM	1162	CE1	PHE	A	151	-8.661	12.123	-10.055	1.00	12.62	A
ATOM	1163	CE2	PHE	A	151	-10.049	10.203	-10.402	1.00	14.91	A
ATOM	1164	CZ	PHE	A	151	-9.017	10.824	-9.723	1.00	13.40	A
ATOM	1165	C	PHE	A	151	-12.621	14.952	-13.361	1.00	14.36	A
ATOM	1166	O	PHE	A	151	-13.833	14.987	-13.570	1.00	13.80	A
ATOM	1167	N	ASN	A	152	-11.736	15.671	-14.053	1.00	15.86	A
ATOM	1168	CA	ASN	A	152	-12.095	16.544	-15.164	1.00	16.02	A
ATOM	1169	CB	ASN	A	152	-11.376	17.890	-15.097	1.00	18.74	A
ATOM	1170	CG	ASN	A	152	-11.397	18.498	-13.740	1.00	23.20	A
ATOM	1171	OD1	ASN	A	152	-10.753	19.522	-13.506	1.00	22.52	A
ATOM	1172	ND2	ASN	A	152	-12.145	17.877	-12.815	1.00	27.59	A
ATOM	1173	C	ASN	A	152	-11.596	15.925	-16.447	1.00	15.17	A
ATOM	1174	O	ASN	A	152	-10.651	15.141	-16.445	1.00	14.04	A
ATOM	1175	N	PRO	A	153	-12.199	16.315	-17.574	1.00	15.08	A
ATOM	1176	CD	PRO	A	153	-13.352	17.224	-17.726	1.00	15.27	A
ATOM	1177	CA	PRO	A	153	-11.778	15.791	-18.864	1.00	13.73	A
ATOM	1178	CB	PRO	A	153	-12.503	16.701	-19.839	1.00	12.37	A
ATOM	1179	CG	PRO	A	153	-13.791	16.948	-19.133	1.00	13.31	A
ATOM	1180	C	PRO	A	153	-10.259	15.885	-18.988	1.00	13.52	A
ATOM	1181	O	PRO	A	153	-9.603	14.920	-19.377	1.00	14.15	A
ATOM	1182	N	THR	A	154	-9.684	17.029	-18.629	1.00	12.52	A
ATOM	1183	CA	THR	A	154	-8.231	17.177	-18.747	1.00	11.18	A
ATOM	1184	CB	THR	A	154	-7.763	18.587	-18.357	1.00	9.17	A
ATOM	1185	OG1	THR	A	154	-8.404	19.554	-19.196	1.00	12.66	A
ATOM	1186	CG2	THR	A	154	-6.264	18.704	-18.522	1.00	6.13	A
ATOM	1187	C	THR	A	154	-7.477	16.194	-17.883	1.00	9.97	A
ATOM	1188	O	THR	A	154	-6.415	15.722	-18.263	1.00	9.78	A
ATOM	1189	N	GLN	A	155	-8.015	15.900	-16.709	1.00	10.79	A
ATOM	1190	CA	GLN	A	155	-7.342	14.980	-15.811	1.00	11.97	A
ATOM	1191	CB	GLN	A	155	-7.960	15.067	-14.435	1.00	10.76	A
ATOM	1192	CG	GLN	A	155	-7.894	16.455	-13.894	1.00	11.68	A
ATOM	1193	CD	GLN	A	155	-8.361	16.542	-12.473	1.00	11.87	A
ATOM	1194	OE1	GLN	A	155	-9.539	16.324	-12.169	1.00	9.48	A
ATOM	1195	NE2	GLN	A	155	-7.434	16.859	-11.579	1.00	12.87	A
ATOM	1196	C	GLN	A	155	-7.391	13.550	-16.312	1.00	13.34	A
ATOM	1197	O	GLN	A	155	-6.529	12.742	-15.978	1.00	15.38	A
ATOM	1198	N	LEU	A	156	-8.403	13.235	-17.112	1.00	13.70	A
ATOM	1199	CA	LEU	A	156	-8.532	11.904	-17.662	1.00	13.24	A
ATOM	1200	CB	LEU	A	156	-9.929	11.720	-18.238	1.00	10.39	A
ATOM	1201	CG	LEU	A	156	-11.052	11.820	-17.229	1.00	11.34	A
ATOM	1202	CD1	LEU	A	156	-12.388	11.688	-17.961	1.00	11.83	A
ATOM	1203	CD2	LEU	A	156	-10.913	10.747	-16.157	1.00	9.95	A
ATOM	1204	C	LEU	A	156	-7.490	11.667	-18.752	1.00	15.89	A
ATOM	1205	O	LEU	A	156	-7.306	10.543	-19.194	1.00	16.59	A
ATOM	1206	N	GLU	A	157	-6.824	12.733	-19.184	1.00	19.18	A
ATOM	1207	CA	GLU	A	157	-5.822	12.626	-20.225	1.00	23.89	A
ATOM	1208	CB	GLU	A	157	-5.570	13.984	-20.878	1.00	21.16	A
ATOM	1209	CG	GLU	A	157	-6.829	14.699	-21.299	1.00	21.05	A
ATOM	1210	CD	GLU	A	157	-6.534	15.965	-22.071	1.00	20.58	A
ATOM	1211	OE1	GLU	A	157	-5.525	16.629	-21.756	1.00	20.06	A

10

20

30

40

ATOM	1212	OE2	GLU	A	157	-7.311	16.302	-22.983	1.00	21.31	A
ATOM	1213	C	GLU	A	157	-4.522	12.088	-19.646	1.00	28.18	A
ATOM	1214	O	GLU	A	157	-3.538	11.905	-20.362	1.00	29.82	A
ATOM	1215	N	GLU	A	158	-4.517	11.835	-18.345	1.00	32.98	A
ATOM	1216	CA	GLU	A	158	-3.330	11.319	-17.681	1.00	38.78	A
ATOM	1217	CB	GLU	A	158	-2.996	12.164	-16.458	1.00	39.64	A
ATOM	1218	CG	GLU	A	158	-2.128	13.371	-16.796	1.00	44.59	A
ATOM	1219	CD	GLU	A	158	-0.665	13.000	-17.086	1.00	46.03	A
ATOM	1220	OE1	GLU	A	158	-0.419	11.941	-17.718	1.00	47.74	A
ATOM	1221	OE2	GLU	A	158	0.236	13.780	-16.692	1.00	45.88	A
ATOM	1222	C	GLU	A	158	-3.413	9.858	-17.275	1.00	42.20	A
ATOM	1223	O	GLU	A	158	-4.325	9.435	-16.551	1.00	42.84	A
ATOM	1224	N	GLN	A	159	-2.436	9.090	-17.750	1.00	45.59	A
ATOM	1225	CA	GLN	A	159	-2.349	7.664	-17.463	1.00	47.67	A
ATOM	1226	CB	GLN	A	159	-0.942	7.158	-17.786	1.00	48.76	A
ATOM	1227	CG	GLN	A	159	0.128	8.223	-17.656	1.00	50.01	A
ATOM	1228	CD	GLN	A	159	1.465	7.645	-17.258	1.00	51.72	A
ATOM	1229	OE1	GLN	A	159	1.926	6.648	-17.829	1.00	51.63	A
ATOM	1230	NE2	GLN	A	159	2.107	8.275	-16.275	1.00	52.16	A
ATOM	1231	C	GLN	A	159	-2.664	7.412	-16.001	1.00	48.11	A
ATOM	1232	O	GLN	A	159	-3.296	6.416	-15.659	1.00	48.73	A
ATOM	1233	N	CYS	A	160	-2.224	8.329	-15.144	1.00	48.60	A
ATOM	1234	CA	CYS	A	160	-2.454	8.209	-13.709	1.00	49.21	A
ATOM	1235	C	CYS	A	160	-3.262	9.371	-13.146	1.00	50.25	A
ATOM	1236	O	CYS	A	160	-3.207	9.640	-11.947	1.00	50.25	A
ATOM	1237	CB	CYS	A	160	-1.111	8.090	-12.970	1.00	48.31	A
ATOM	1238	SG	CYS	A	160	-0.706	6.398	-12.410	1.00	47.53	A
ATOM	1239	N	HIS	A	161	-4.010	10.052	-14.017	1.00	52.12	A
ATOM	1240	CA	HIS	A	161	-4.855	11.199	-13.631	1.00	53.87	A
ATOM	1241	CB	HIS	A	161	-6.062	10.722	-12.801	1.00	51.81	A
ATOM	1242	CG	HIS	A	161	-7.069	9.939	-13.586	1.00	50.36	A
ATOM	1243	CD2	HIS	A	161	-8.422	9.928	-13.542	1.00	49.28	A
ATOM	1244	ND1	HIS	A	161	-6.712	8.997	-14.530	1.00	50.71	A
ATOM	1245	CE1	HIS	A	161	-7.802	8.440	-15.030	1.00	49.63	A
ATOM	1246	NE2	HIS	A	161	-8.853	8.987	-14.446	1.00	49.13	A
ATOM	1247	C	HIS	A	161	-4.105	12.295	-12.856	1.00	55.61	A
ATOM	1248	O	HIS	A	161	-3.703	12.089	-11.701	1.00	55.42	A
ATOM	1249	N	ILE	A	162	-3.938	13.455	-13.504	1.00	57.43	A
ATOM	1250	CA	ILE	A	162	-3.253	14.631	-12.936	1.00	58.86	A
ATOM	1251	CB	ILE	A	162	-3.873	15.962	-13.480	1.00	58.80	A
ATOM	1252	CG2	ILE	A	162	-3.183	17.170	-12.812	1.00	58.56	A
ATOM	1253	CG1	ILE	A	162	-3.750	16.023	-15.012	1.00	57.83	A
ATOM	1254	CD1	ILE	A	162	-4.369	17.271	-15.642	1.00	55.94	A
ATOM	1255	C	ILE	A	162	-3.272	14.695	-11.400	1.00	59.78	A
ATOM	1256	OT1	ILE	A	162	-2.170	14.685	-10.788	1.00	59.36	A
ATOM	1257	OT2	ILE	A	162	-4.394	14.754	-10.837	1.00	60.08	A
ATOM	1258	CB	ASP	L	1	16.550	5.554	-25.535	1.00	16.37	L
ATOM	1259	CG	ASP	L	1	16.503	7.069	-25.599	1.00	19.69	L
ATOM	1260	OD1	ASP	L	1	16.752	7.733	-24.551	1.00	21.13	L
ATOM	1261	OD2	ASP	L	1	16.236	7.600	-26.702	1.00	18.80	L
ATOM	1262	C	ASP	L	1	15.914	3.511	-24.259	1.00	13.85	L
ATOM	1263	O	ASP	L	1	16.895	2.773	-24.238	1.00	15.08	L
ATOM	1264	N	ASP	L	1	17.141	5.276	-23.136	1.00	16.84	L
ATOM	1265	CA	ASP	L	1	16.101	5.010	-24.177	1.00	15.47	L
ATOM	1266	N	ILE	L	2	14.669	3.052	-24.335	1.00	11.38	L
ATOM	1267	CA	ILE	L	2	14.423	1.626	-24.435	1.00	8.80	L
ATOM	1268	CB	ILE	L	2	12.995	1.271	-23.982	1.00	8.68	L
ATOM	1269	CG2	ILE	L	2	12.795	-0.225	-24.067	1.00	6.83	L
ATOM	1270	CG1	ILE	L	2	12.771	1.771	-22.551	1.00	9.62	L
ATOM	1271	CD1	ILE	L	2	11.413	1.456	-21.968	1.00	8.82	L
ATOM	1272	C	ILE	L	2	14.643	1.214	-25.886	1.00	8.52	L

10

20

30

40

ATOM	1273	O	ILE	L	2	14.104	1.824	-26.816	1.00	4.81	L
ATOM	1274	N	VAL	L	3	15.474	0.195	-26.078	1.00	8.21	L
ATOM	1275	CA	VAL	L	3	15.778	-0.278	-27.422	1.00	7.79	L
ATOM	1276	CB	VAL	L	3	17.284	-0.578	-27.549	1.00	5.49	L
ATOM	1277	CG1	VAL	L	3	17.627	-0.990	-28.958	1.00	1.00	L
ATOM	1278	CG2	VAL	L	3	18.072	0.648	-27.135	1.00	5.03	L
ATOM	1279	C	VAL	L	3	14.959	-1.520	-27.769	1.00	9.17	L
ATOM	1280	O	VAL	L	3	15.054	-2.547	-27.098	1.00	11.84	L
ATOM	1281	N	MET	L	4	14.133	-1.417	-28.802	1.00	8.22	L
ATOM	1282	CA	MET	L	4	13.304	-2.543	-29.202	1.00	7.73	L
ATOM	1283	CB	MET	L	4	11.923	-2.055	-29.655	1.00	9.47	L
ATOM	1284	CG	MET	L	4	11.149	-1.225	-28.653	1.00	5.71	L
ATOM	1285	SD	MET	L	4	10.934	-2.041	-27.095	1.00	9.24	L
ATOM	1286	CE	MET	L	4	9.556	-3.115	-27.385	1.00	4.45	L
ATOM	1287	C	MET	L	4	13.978	-3.286	-30.350	1.00	8.02	L
ATOM	1288	O	MET	L	4	14.298	-2.685	-31.382	1.00	6.96	L
ATOM	1289	N	THR	L	5	14.196	-4.586	-30.173	1.00	8.30	L
ATOM	1290	CA	THR	L	5	14.835	-5.392	-31.210	1.00	8.27	L
ATOM	1291	CB	THR	L	5	16.100	-6.107	-30.656	1.00	8.90	L
ATOM	1292	OG1	THR	L	5	16.842	-5.200	-29.822	1.00	10.13	L
ATOM	1293	CG2	THR	L	5	16.993	-6.557	-31.794	1.00	7.36	L
ATOM	1294	C	THR	L	5	13.831	-6.423	-31.706	1.00	8.20	L
ATOM	1295	O	THR	L	5	13.344	-7.256	-30.940	1.00	7.90	L
ATOM	1296	N	GLN	L	6	13.484	-6.333	-32.984	1.00	9.47	L
ATOM	1297	CA	GLN	L	6	12.533	-7.268	-33.580	1.00	9.71	L
ATOM	1298	CB	GLN	L	6	11.683	-6.576	-34.635	1.00	9.96	L
ATOM	1299	CG	GLN	L	6	10.217	-6.389	-34.283	1.00	10.83	L
ATOM	1300	CD	GLN	L	6	9.560	-5.379	-35.227	1.00	12.71	L
ATOM	1301	OE1	GLN	L	6	9.754	-4.156	-35.100	1.00	11.89	L
ATOM	1302	NE2	GLN	L	6	8.812	-5.888	-36.204	1.00	11.00	L
ATOM	1303	C	GLN	L	6	13.283	-8.409	-34.223	1.00	9.95	L
ATOM	1304	O	GLN	L	6	14.476	-8.311	-34.513	1.00	9.91	L
ATOM	1305	N	SER	L	7	12.580	-9.501	-34.460	1.00	10.84	L
ATOM	1306	CA	SER	L	7	13.234	-10.652	-35.045	1.00	10.80	L
ATOM	1307	CB	SER	L	7	14.081	-11.315	-33.982	1.00	9.99	L
ATOM	1308	OG	SER	L	7	15.047	-12.144	-34.575	1.00	16.72	L
ATOM	1309	C	SER	L	7	12.191	-11.624	-35.554	1.00	10.08	L
ATOM	1310	O	SER	L	7	11.206	-11.886	-34.876	1.00	12.81	L
ATOM	1311	N	PRO	L	8	12.365	-12.131	-36.779	1.00	9.04	L
ATOM	1312	CD	PRO	L	8	11.571	-13.254	-37.308	1.00	7.85	L
ATOM	1313	CA	PRO	L	8	13.490	-11.816	-37.668	1.00	9.77	L
ATOM	1314	CB	PRO	L	8	13.490	-12.991	-38.640	1.00	8.02	L
ATOM	1315	CG	PRO	L	8	12.033	-13.328	-38.732	1.00	8.29	L
ATOM	1316	C	PRO	L	8	13.241	-10.474	-38.377	1.00	10.57	L
ATOM	1317	O	PRO	L	8	12.140	-9.923	-38.302	1.00	10.48	L
ATOM	1318	N	SER	L	9	14.251	-9.939	-39.052	1.00	11.09	L
ATOM	1319	CA	SER	L	9	14.070	-8.667	-39.757	1.00	13.69	L
ATOM	1320	CB	SER	L	9	15.426	-8.033	-40.090	1.00	15.41	L
ATOM	1321	OG	SER	L	9	16.465	-9.001	-40.081	1.00	20.93	L
ATOM	1322	C	SER	L	9	13.231	-8.841	-41.031	1.00	13.61	L
ATOM	1323	O	SER	L	9	12.517	-7.923	-41.456	1.00	11.42	L
ATOM	1324	N	SER	L	10	13.316	-10.024	-41.636	1.00	14.50	L
ATOM	1325	CA	SER	L	10	12.531	-10.330	-42.833	1.00	16.25	L
ATOM	1326	CB	SER	L	10	13.280	-9.938	-44.104	1.00	16.02	L
ATOM	1327	OG	SER	L	10	14.253	-10.900	-44.437	1.00	19.67	L
ATOM	1328	C	SER	L	10	12.202	-11.817	-42.850	1.00	15.53	L
ATOM	1329	O	SER	L	10	13.002	-12.648	-42.426	1.00	15.73	L
ATOM	1330	N	LEU	L	11	11.011	-12.143	-43.329	1.00	15.59	L
ATOM	1331	CA	LEU	L	11	10.571	-13.524	-43.361	1.00	16.29	L
ATOM	1332	CB	LEU	L	11	9.730	-13.789	-42.120	1.00	16.99	L
ATOM	1333	CG	LEU	L	11	9.261	-15.225	-41.963	1.00	18.29	L

10

20

30

40

ATOM	1334	CD1	LEU	L	11	10.338	-15.994	-41.199	1.00	19.78	L
ATOM	1335	CD2	LEU	L	11	7.929	-15.276	-41.212	1.00	17.06	L
ATOM	1336	C	LEU	L	11	9.748	-13.852	-44.609	1.00	17.00	L
ATOM	1337	O	LEU	L	11	9.089	-12.978	-45.171	1.00	19.02	L
ATOM	1338	N	SER	L	12	9.786	-15.109	-45.043	1.00	17.38	L
ATOM	1339	CA	SER	L	12	8.999	-15.533	-46.200	1.00	16.83	L
ATOM	1340	CB	SER	L	12	9.893	-15.852	-47.395	1.00	16.19	L
ATOM	1341	OG	SER	L	12	10.483	-14.670	-47.897	1.00	18.96	L
ATOM	1342	C	SER	L	12	8.229	-16.772	-45.792	1.00	15.74	L
ATOM	1343	O	SER	L	12	8.820	-17.778	-45.395	1.00	16.18	L
ATOM	1344	N	ALA	L	13	6.907	-16.689	-45.893	1.00	14.50	L
ATOM	1345	CA	ALA	L	13	6.040	-17.790	-45.510	1.00	13.88	L
ATOM	1346	CB	ALA	L	13	5.435	-17.524	-44.142	1.00	11.70	L
ATOM	1347	C	ALA	L	13	4.941	-18.025	-46.520	1.00	14.84	L
ATOM	1348	O	ALA	L	13	4.414	-17.080	-47.098	1.00	15.89	L
ATOM	1349	N	SER	L	14	4.590	-19.289	-46.726	1.00	16.55	L
ATOM	1350	CA	SER	L	14	3.548	-19.653	-47.686	1.00	18.52	L
ATOM	1351	CB	SER	L	14	3.584	-21.161	-47.953	1.00	21.34	L
ATOM	1352	OG	SER	L	14	4.906	-21.598	-48.266	1.00	25.96	L
ATOM	1353	C	SER	L	14	2.187	-19.280	-47.146	1.00	17.08	L
ATOM	1354	O	SER	L	14	1.926	-19.420	-45.954	1.00	15.37	L
ATOM	1355	N	VAL	L	15	1.321	-18.795	-48.025	1.00	18.37	L
ATOM	1356	CA	VAL	L	15	-0.022	-18.426	-47.602	1.00	20.11	L
ATOM	1357	CB	VAL	L	15	-0.895	-17.953	-48.814	1.00	19.65	L
ATOM	1358	CG1	VAL	L	15	-0.468	-18.683	-50.077	1.00	21.07	L
ATOM	1359	CG2	VAL	L	15	-2.386	-18.191	-48.526	1.00	16.68	L
ATOM	1360	C	VAL	L	15	-0.660	-19.631	-46.912	1.00	20.75	L
ATOM	1361	O	VAL	L	15	-0.853	-20.677	-47.520	1.00	21.60	L
ATOM	1362	N	GLY	L	16	-0.957	-19.483	-45.628	1.00	21.09	L
ATOM	1363	CA	GLY	L	16	-1.554	-20.579	-44.901	1.00	22.33	L
ATOM	1364	C	GLY	L	16	-0.814	-20.944	-43.632	1.00	23.59	L
ATOM	1365	O	GLY	L	16	-1.451	-21.194	-42.616	1.00	25.28	L
ATOM	1366	N	ASP	L	17	0.514	-20.979	-43.657	1.00	24.99	L
ATOM	1367	CA	ASP	L	17	1.230	-21.341	-42.436	1.00	27.99	L
ATOM	1368	CB	ASP	L	17	2.693	-21.717	-42.723	1.00	28.83	L
ATOM	1369	CG	ASP	L	17	3.458	-20.625	-43.424	1.00	29.50	L
ATOM	1370	OD1	ASP	L	17	3.262	-19.441	-43.048	1.00	31.11	L
ATOM	1371	OD2	ASP	L	17	4.271	-20.954	-44.329	1.00	27.86	L
ATOM	1372	C	ASP	L	17	1.160	-20.221	-41.407	1.00	29.07	L
ATOM	1373	O	ASP	L	17	0.811	-19.091	-41.747	1.00	30.22	L
ATOM	1374	N	ARG	L	18	1.473	-20.540	-40.150	1.00	29.29	L
ATOM	1375	CA	ARG	L	18	1.428	-19.550	-39.085	1.00	28.54	L
ATOM	1376	CB	ARG	L	18	0.964	-20.185	-37.758	1.00	30.31	L
ATOM	1377	CG	ARG	L	18	2.046	-20.954	-36.997	1.00	33.86	L
ATOM	1378	CD	ARG	L	18	1.515	-21.703	-35.764	1.00	35.75	L
ATOM	1379	NE	ARG	L	18	0.691	-20.880	-34.879	1.00	38.27	L
ATOM	1380	CZ	ARG	L	18	-0.645	-20.869	-34.882	1.00	39.93	L
ATOM	1381	NH1	ARG	L	18	-1.317	-21.642	-35.726	1.00	39.27	L
ATOM	1382	NH2	ARG	L	18	-1.316	-20.085	-34.037	1.00	40.51	L
ATOM	1383	C	ARG	L	18	2.814	-18.946	-38.934	1.00	27.76	L
ATOM	1384	O	ARG	L	18	3.829	-19.658	-38.958	1.00	27.29	L
ATOM	1385	N	VAL	L	19	2.858	-17.623	-38.810	1.00	26.27	L
ATOM	1386	CA	VAL	L	19	4.124	-16.924	-38.655	1.00	24.20	L
ATOM	1387	CB	VAL	L	19	4.290	-15.843	-39.743	1.00	24.36	L
ATOM	1388	CG1	VAL	L	19	3.975	-16.440	-41.112	1.00	25.14	L
ATOM	1389	CG2	VAL	L	19	3.387	-14.671	-39.464	1.00	26.02	L
ATOM	1390	C	VAL	L	19	4.209	-16.292	-37.278	1.00	22.08	L
ATOM	1391	O	VAL	L	19	3.190	-15.978	-36.676	1.00	20.97	L
ATOM	1392	N	THR	L	20	5.432	-16.132	-36.782	1.00	21.47	L
ATOM	1393	CA	THR	L	20	5.671	-15.541	-35.469	1.00	19.88	L
ATOM	1394	CB	THR	L	20	5.991	-16.619	-34.422	1.00	17.86	L

10

20

30

40

ATOM	1395	OG1	THR	L	20	4.866	-17.480	-34.259	1.00	18.26	L
ATOM	1396	CG2	THR	L	20	6.324	-15.994	-33.100	1.00	16.28	L
ATOM	1397	C	THR	L	20	6.847	-14.575	-35.499	1.00	20.30	L
ATOM	1398	O	THR	L	20	7.946	-14.931	-35.918	1.00	20.29	L
ATOM	1399	N	ILE	L	21	6.610	-13.351	-35.055	1.00	20.44	L
ATOM	1400	CA	ILE	L	21	7.658	-12.349	-35.000	1.00	20.12	L
ATOM	1401	CB	ILE	L	21	7.236	-11.072	-35.736	1.00	20.69	L
ATOM	1402	CG2	ILE	L	21	8.406	-10.088	-35.799	1.00	18.90	L
ATOM	1403	CG1	ILE	L	21	6.759	-11.441	-37.142	1.00	21.95	L
ATOM	1404	CD1	ILE	L	21	6.285	-10.252	-37.972	1.00	22.52	L
ATOM	1405	C	ILE	L	21	7.904	-12.024	-33.528	1.00	20.23	L
ATOM	1406	O	ILE	L	21	6.961	-11.872	-32.735	1.00	19.59	L
ATOM	1407	N	THR	L	22	9.174	-11.915	-33.169	1.00	19.11	L
ATOM	1408	CA	THR	L	22	9.534	-11.605	-31.801	1.00	19.72	L
ATOM	1409	CB	THR	L	22	10.651	-12.529	-31.291	1.00	19.77	L
ATOM	1410	OG1	THR	L	22	10.343	-13.878	-31.647	1.00	20.92	L
ATOM	1411	CG2	THR	L	22	10.773	-12.442	-29.770	1.00	17.04	L
ATOM	1412	C	THR	L	22	10.009	-10.172	-31.690	1.00	20.10	L
ATOM	1413	O	THR	L	22	10.498	-9.590	-32.660	1.00	19.87	L
ATOM	1414	N	CYS	L	23	9.848	-9.617	-30.493	1.00	20.03	L
ATOM	1415	CA	CYS	L	23	10.255	-8.257	-30.192	1.00	20.14	L
ATOM	1416	C	CYS	L	23	10.753	-8.272	-28.748	1.00	20.68	L
ATOM	1417	O	CYS	L	23	10.063	-8.777	-27.861	1.00	20.07	L
ATOM	1418	CB	CYS	L	23	9.050	-7.327	-30.361	1.00	19.95	L
ATOM	1419	SG	CYS	L	23	9.273	-5.579	-29.906	1.00	24.16	L
ATOM	1420	N	ARG	L	24	11.972	-7.776	-28.521	1.00	20.89	L
ATOM	1421	CA	ARG	L	24	12.538	-7.736	-27.172	1.00	19.57	L
ATOM	1422	CB	ARG	L	24	13.771	-8.629	-27.042	1.00	21.13	L
ATOM	1423	CG	ARG	L	24	13.464	-10.092	-27.137	1.00	23.44	L
ATOM	1424	CD	ARG	L	24	14.727	-10.917	-27.090	1.00	26.37	L
ATOM	1425	NE	ARG	L	24	14.457	-12.270	-27.558	1.00	30.08	L
ATOM	1426	CZ	ARG	L	24	14.080	-12.559	-28.794	1.00	32.01	L
ATOM	1427	NH1	ARG	L	24	13.935	-11.583	-29.695	1.00	34.19	L
ATOM	1428	NH2	ARG	L	24	13.831	-13.819	-29.112	1.00	32.69	L
ATOM	1429	C	ARG	L	24	12.927	-6.335	-26.809	1.00	18.40	L
ATOM	1430	O	ARG	L	24	13.490	-5.615	-27.629	1.00	18.93	L
ATOM	1431	N	ALA	L	25	12.628	-5.958	-25.568	1.00	17.14	L
ATOM	1432	CA	ALA	L	25	12.925	-4.624	-25.063	1.00	16.03	L
ATOM	1433	CB	ALA	L	25	11.804	-4.169	-24.158	1.00	16.46	L
ATOM	1434	C	ALA	L	25	14.249	-4.594	-24.317	1.00	15.36	L
ATOM	1435	O	ALA	L	25	14.662	-5.597	-23.742	1.00	14.07	L
ATOM	1436	N	SER	L	26	14.913	-3.442	-24.343	1.00	16.19	L
ATOM	1437	CA	SER	L	26	16.195	-3.277	-23.668	1.00	16.76	L
ATOM	1438	CB	SER	L	26	16.888	-1.996	-24.132	1.00	17.23	L
ATOM	1439	OG	SER	L	26	16.373	-0.865	-23.464	1.00	20.63	L
ATOM	1440	C	SER	L	26	16.003	-3.246	-22.149	1.00	16.15	L
ATOM	1441	O	SER	L	26	16.967	-3.188	-21.394	1.00	15.95	L
ATOM	1442	N	GLN	L	27	14.749	-3.260	-21.711	1.00	15.84	L
ATOM	1443	CA	GLN	L	27	14.416	-3.291	-20.289	1.00	14.82	L
ATOM	1444	CB	GLN	L	27	14.690	-1.950	-19.615	1.00	15.42	L
ATOM	1445	CG	GLN	L	27	13.719	-0.864	-19.989	1.00	17.28	L
ATOM	1446	CD	GLN	L	27	13.715	0.267	-18.991	1.00	19.54	L
ATOM	1447	OE1	GLN	L	27	14.671	1.046	-18.916	1.00	19.13	L
ATOM	1448	NE2	GLN	L	27	12.647	0.345	-18.184	1.00	21.52	L
ATOM	1449	C	GLN	L	27	12.933	-3.625	-20.170	1.00	13.71	L
ATOM	1450	O	GLN	L	27	12.190	-3.547	-21.152	1.00	11.47	L
ATOM	1451	N	GLY	L	28	12.507	-3.998	-18.970	1.00	12.79	L
ATOM	1452	CA	GLY	L	28	11.116	-4.345	-18.765	1.00	11.73	L
ATOM	1453	C	GLY	L	28	10.230	-3.167	-19.092	1.00	12.33	L
ATOM	1454	O	GLY	L	28	10.534	-2.029	-18.728	1.00	12.44	L
ATOM	1455	N	ILE	L	29	9.136	-3.437	-19.792	1.00	11.90	L

10

20

30

40

ATOM	1456	CA	ILE	L	29	8.206	-2.389	-20.166	1.00	12.68	L	
ATOM	1457	CB	ILE	L	29	8.252	-2.078	-21.664	1.00	11.70	L	
ATOM	1458	CG2	ILE	L	29	9.607	-1.483	-22.023	1.00	12.24	L	
ATOM	1459	CG1	ILE	L	29	7.948	-3.348	-22.465	1.00	12.26	L	
ATOM	1460	CD1	ILE	L	29	7.626	-3.110	-23.937	1.00	10.24	L	
ATOM	1461	C	ILE	L	29	6.800	-2.808	-19.828	1.00	14.29	L	
ATOM	1462	O	ILE	L	29	5.833	-2.365	-20.458	1.00	14.88	L	
ATOM	1463	N	SER	L	30	6.686	-3.681	-18.839	1.00	15.26	L	
ATOM	1464	CA	SER	L	30	5.373	-4.129	-18.422	1.00	16.96	L	
ATOM	1465	CB	SER	L	30	4.545	-2.903	-18.005	1.00	17.33	L	
ATOM	1466	OG	SER	L	30	3.175	-3.203	-17.824	1.00	18.85	L	
ATOM	1467	C	SER	L	30	4.721	-4.845	-19.600	1.00	17.57	L	10
ATOM	1468	O	SER	L	30	5.328	-5.689	-20.258	1.00	18.80	L	
ATOM	1469	N	SER	L	31	3.476	-4.492	-19.862	1.00	16.56	L	
ATOM	1470	CA	SER	L	31	2.737	-5.081	-20.956	1.00	16.37	L	
ATOM	1471	CB	SER	L	31	1.472	-5.751	-20.415	1.00	16.56	L	
ATOM	1472	OG	SER	L	31	0.798	-4.889	-19.505	1.00	17.23	L	
ATOM	1473	C	SER	L	31	2.375	-3.971	-21.939	1.00	15.72	L	
ATOM	1474	O	SER	L	31	1.424	-4.085	-22.727	1.00	14.38	L	
ATOM	1475	N	ARG	L	32	3.137	-2.886	-21.882	1.00	14.57	L	
ATOM	1476	CA	ARG	L	32	2.869	-1.761	-22.763	1.00	12.87	L	
ATOM	1477	CB	ARG	L	32	3.232	-0.432	-22.077	1.00	12.78	L	
ATOM	1478	CG	ARG	L	32	2.545	-0.190	-20.731	1.00	13.17	L	
ATOM	1479	CD	ARG	L	32	2.896	1.199	-20.286	1.00	16.26	L	
ATOM	1480	NE	ARG	L	32	2.682	1.484	-18.877	1.00	20.43	L	20
ATOM	1481	CZ	ARG	L	32	1.751	2.314	-18.409	1.00	24.20	L	
ATOM	1482	NH1	ARG	L	32	0.931	2.937	-19.255	1.00	23.63	L	
ATOM	1483	NH2	ARG	L	32	1.669	2.550	-17.095	1.00	21.89	L	
ATOM	1484	C	ARG	L	32	3.624	-1.888	-24.086	1.00	10.58	L	
ATOM	1485	O	ARG	L	32	4.626	-1.222	-24.312	1.00	11.04	L	
ATOM	1486	N	LEU	L	33	3.135	-2.759	-24.950	1.00	7.55	L	
ATOM	1487	CA	LEU	L	33	3.728	-2.953	-26.243	1.00	5.79	L	
ATOM	1488	CB	LEU	L	33	4.558	-4.233	-26.293	1.00	6.51	L	
ATOM	1489	CG	LEU	L	33	5.261	-4.460	-27.669	1.00	6.68	L	
ATOM	1490	CD1	LEU	L	33	6.728	-4.722	-27.445	1.00	5.42	L	
ATOM	1491	CD2	LEU	L	33	4.616	-5.605	-28.430	1.00	3.57	L	
ATOM	1492	C	LEU	L	33	2.613	-3.045	-27.273	1.00	4.13	L	
ATOM	1493	O	LEU	L	33	1.559	-3.640	-27.011	1.00	3.72	L	
ATOM	1494	N	ALA	L	34	2.857	-2.480	-28.454	1.00	3.03	L	30
ATOM	1495	CA	ALA	L	34	1.857	-2.507	-29.521	1.00	3.10	L	
ATOM	1496	CB	ALA	L	34	1.245	-1.114	-29.712	1.00	3.61	L	
ATOM	1497	C	ALA	L	34	2.455	-2.991	-30.820	1.00	2.38	L	
ATOM	1498	O	ALA	L	34	3.662	-2.950	-31.000	1.00	2.65	L	
ATOM	1499	N	TRP	L	35	1.594	-3.455	-31.715	1.00	3.03	L	
ATOM	1500	CA	TRP	L	35	2.016	-3.967	-33.007	1.00	4.01	L	
ATOM	1501	CB	TRP	L	35	1.714	-5.459	-33.112	1.00	5.67	L	
ATOM	1502	CG	TRP	L	35	2.557	-6.314	-32.225	1.00	7.10	L	
ATOM	1503	CD2	TRP	L	35	3.882	-6.790	-32.507	1.00	6.96	L	
ATOM	1504	CE2	TRP	L	35	4.308	-7.525	-31.380	1.00	7.48	L	
ATOM	1505	CE3	TRP	L	35	4.751	-6.663	-33.604	1.00	6.37	L	
ATOM	1506	CD1	TRP	L	35	2.242	-6.768	-30.973	1.00	5.81	L	
ATOM	1507	NE1	TRP	L	35	3.287	-7.493	-30.459	1.00	7.49	L	
ATOM	1508	CZ2	TRP	L	35	5.581	-8.140	-31.318	1.00	6.10	L	40
ATOM	1509	CZ3	TRP	L	35	6.012	-7.271	-33.541	1.00	5.88	L	
ATOM	1510	CH2	TRP	L	35	6.411	-8.002	-32.403	1.00	5.71	L	
ATOM	1511	C	TRP	L	35	1.310	-3.251	-34.147	1.00	4.05	L	
ATOM	1512	O	TRP	L	35	0.074	-3.220	-34.209	1.00	2.57	L	
ATOM	1513	N	TYR	L	36	2.099	-2.693	-35.055	1.00	2.93	L	
ATOM	1514	CA	TYR	L	36	1.522	-1.981	-36.169	1.00	3.86	L	
ATOM	1515	CB	TYR	L	36	2.035	-0.544	-36.209	1.00	1.42	L	
ATOM	1516	CG	TYR	L	36	1.701	0.264	-34.970	1.00	2.49	L	

ATOM	1517	CD1	TYR	L	36	0.469	0.885	-34.829	1.00	1.00	L
ATOM	1518	CE1	TYR	L	36	0.178	1.650	-33.715	1.00	1.00	L
ATOM	1519	CD2	TYR	L	36	2.635	0.427	-33.944	1.00	2.52	L
ATOM	1520	CE2	TYR	L	36	2.342	1.196	-32.819	1.00	1.93	L
ATOM	1521	CZ	TYR	L	36	1.109	1.807	-32.722	1.00	1.00	L
ATOM	1522	OH	TYR	L	36	0.838	2.597	-31.632	1.00	1.00	L
ATOM	1523	C	TYR	L	36	1.851	-2.671	-37.464	1.00	5.39	L
ATOM	1524	O	TYR	L	36	2.844	-3.388	-37.575	1.00	5.41	L
ATOM	1525	N	GLN	L	37	1.002	-2.455	-38.453	1.00	7.83	L
ATOM	1526	CA	GLN	L	37	1.207	-3.054	-39.754	1.00	9.39	L
ATOM	1527	CB	GLN	L	37	0.046	-3.980	-40.097	1.00	11.00	L
ATOM	1528	CG	GLN	L	37	0.086	-4.527	-41.501	1.00	9.81	L
ATOM	1529	CD	GLN	L	37	-1.129	-5.339	-41.803	1.00	10.26	L
ATOM	1530	OE1	GLN	L	37	-2.238	-4.815	-41.847	1.00	12.94	L
ATOM	1531	NE2	GLN	L	37	-0.941	-6.637	-41.983	1.00	13.63	L
ATOM	1532	C	GLN	L	37	1.274	-1.933	-40.766	1.00	10.97	L
ATOM	1533	O	GLN	L	37	0.415	-1.056	-40.787	1.00	11.76	L
ATOM	1534	N	GLN	L	38	2.296	-1.966	-41.609	1.00	13.25	L
ATOM	1535	CA	GLN	L	38	2.443	-0.946	-42.622	1.00	15.72	L
ATOM	1536	CB	GLN	L	38	3.562	0.023	-42.258	1.00	16.17	L
ATOM	1537	CG	GLN	L	38	3.619	1.227	-43.194	1.00	17.87	L
ATOM	1538	CD	GLN	L	38	4.854	2.054	-43.000	1.00	18.58	L
ATOM	1539	OE1	GLN	L	38	4.887	3.241	-43.360	1.00	18.70	L
ATOM	1540	NE2	GLN	L	38	5.896	1.436	-42.437	1.00	18.33	L
ATOM	1541	C	GLN	L	38	2.739	-1.530	-43.991	1.00	17.75	L
ATOM	1542	O	GLN	L	38	3.618	-2.372	-44.144	1.00	17.47	L
ATOM	1543	N	LYS	L	39	2.003	-1.051	-44.984	1.00	19.94	L
ATOM	1544	CA	LYS	L	39	2.172	-1.466	-46.360	1.00	20.60	L
ATOM	1545	CB	LYS	L	39	0.843	-1.990	-46.911	1.00	19.44	L
ATOM	1546	CG	LYS	L	39	0.372	-3.242	-46.214	1.00	18.77	L
ATOM	1547	CD	LYS	L	39	-1.043	-3.641	-46.559	1.00	18.38	L
ATOM	1548	CE	LYS	L	39	-1.314	-5.039	-45.989	1.00	19.75	L
ATOM	1549	NZ	LYS	L	39	-2.760	-5.437	-45.970	1.00	19.42	L
ATOM	1550	C	LYS	L	39	2.615	-0.225	-47.142	1.00	23.17	L
ATOM	1551	O	LYS	L	39	2.320	0.916	-46.762	1.00	22.18	L
ATOM	1552	N	PRO	L	40	3.319	-0.440	-48.258	1.00	25.17	L
ATOM	1553	CD	PRO	L	40	3.543	-1.778	-48.829	1.00	25.97	L
ATOM	1554	CA	PRO	L	40	3.846	0.591	-49.157	1.00	25.55	L
ATOM	1555	CB	PRO	L	40	4.172	-0.194	-50.417	1.00	25.75	L
ATOM	1556	CG	PRO	L	40	4.583	-1.491	-49.863	1.00	26.38	L
ATOM	1557	C	PRO	L	40	2.863	1.705	-49.444	1.00	25.25	L
ATOM	1558	O	PRO	L	40	1.775	1.467	-49.973	1.00	25.17	L
ATOM	1559	N	GLY	L	41	3.262	2.923	-49.101	1.00	24.69	L
ATOM	1560	CA	GLY	L	41	2.419	4.082	-49.343	1.00	23.52	L
ATOM	1561	C	GLY	L	41	1.056	4.091	-48.665	1.00	21.83	L
ATOM	1562	O	GLY	L	41	0.195	4.900	-49.004	1.00	20.85	L
ATOM	1563	N	LYS	L	42	0.848	3.200	-47.708	1.00	21.05	L
ATOM	1564	CA	LYS	L	42	-0.418	3.159	-47.017	1.00	20.64	L
ATOM	1565	CB	LYS	L	42	-1.022	1.758	-47.112	1.00	23.78	L
ATOM	1566	CG	LYS	L	42	-1.251	1.276	-48.549	1.00	27.37	L
ATOM	1567	CD	LYS	L	42	-1.686	-0.178	-48.582	1.00	29.55	L
ATOM	1568	CE	LYS	L	42	-1.463	-0.807	-49.960	1.00	31.53	L
ATOM	1569	NZ	LYS	L	42	-1.924	-2.247	-50.023	1.00	30.21	L
ATOM	1570	C	LYS	L	42	-0.235	3.567	-45.561	1.00	19.67	L
ATOM	1571	O	LYS	L	42	0.888	3.642	-45.057	1.00	22.24	L
ATOM	1572	N	ALA	L	43	-1.353	3.831	-44.895	1.00	17.35	L
ATOM	1573	CA	ALA	L	43	-1.379	4.238	-43.500	1.00	14.73	L
ATOM	1574	CB	ALA	L	43	-2.707	4.896	-43.197	1.00	13.07	L
ATOM	1575	C	ALA	L	43	-1.166	3.061	-42.561	1.00	13.46	L
ATOM	1576	O	ALA	L	43	-1.844	2.044	-42.655	1.00	13.73	L
ATOM	1577	N	PRO	L	44	-0.206	3.177	-41.639	1.00	11.50	L

10

20

30

40

ATOM	1578	CD	PRO	L	44	0.860	4.180	-41.480	1.00	9.68	L
ATOM	1579	CA	PRO	L	44	-0.007	2.050	-40.730	1.00	11.04	L
ATOM	1580	CB	PRO	L	44	1.101	2.552	-39.805	1.00	10.36	L
ATOM	1581	CG	PRO	L	44	1.920	3.409	-40.739	1.00	9.88	L
ATOM	1582	C	PRO	L	44	-1.307	1.721	-39.975	1.00	10.49	L
ATOM	1583	O	PRO	L	44	-2.161	2.583	-39.759	1.00	9.88	L
ATOM	1584	N	LYS	L	45	-1.453	0.459	-39.599	1.00	11.44	L
ATOM	1585	CA	LYS	L	45	-2.631	-0.005	-38.881	1.00	12.22	L
ATOM	1586	CB	LYS	L	45	-3.368	-1.063	-39.698	1.00	15.28	L
ATOM	1587	CG	LYS	L	45	-4.045	-0.532	-40.955	1.00	18.72	L
ATOM	1588	CD	LYS	L	45	-4.689	-1.651	-41.789	1.00	23.99	L
ATOM	1589	CE	LYS	L	45	-5.758	-2.410	-40.990	1.00	28.70	L
ATOM	1590	NZ	LYS	L	45	-6.539	-3.436	-41.781	1.00	30.44	L
ATOM	1591	C	LYS	L	45	-2.243	-0.599	-37.542	1.00	10.66	L
ATOM	1592	O	LYS	L	45	-1.270	-1.343	-37.433	1.00	11.06	L
ATOM	1593	N	LEU	L	46	-3.011	-0.271	-36.517	1.00	9.86	L
ATOM	1594	CA	LEU	L	46	-2.738	-0.780	-35.185	1.00	8.87	L
ATOM	1595	CB	LEU	L	46	-3.336	0.180	-34.147	1.00	9.27	L
ATOM	1596	CG	LEU	L	46	-3.140	0.020	-32.631	1.00	9.63	L
ATOM	1597	CD1	LEU	L	46	-4.354	-0.644	-32.037	1.00	9.45	L
ATOM	1598	CD2	LEU	L	46	-1.857	-0.768	-32.330	1.00	10.10	L
ATOM	1599	C	LEU	L	46	-3.382	-2.150	-35.103	1.00	8.10	L
ATOM	1600	O	LEU	L	46	-4.573	-2.287	-35.357	1.00	8.98	L
ATOM	1601	N	LEU	L	47	-2.593	-3.160	-34.757	1.00	7.67	L
ATOM	1602	CA	LEU	L	47	-3.109	-4.525	-34.662	1.00	6.84	L
ATOM	1603	CB	LEU	L	47	-2.148	-5.527	-35.320	1.00	5.42	L
ATOM	1604	CG	LEU	L	47	-1.750	-5.328	-36.793	1.00	6.34	L
ATOM	1605	CD1	LEU	L	47	-0.631	-6.286	-37.139	1.00	3.93	L
ATOM	1606	CD2	LEU	L	47	-2.960	-5.530	-37.695	1.00	5.28	L
ATOM	1607	C	LEU	L	47	-3.298	-4.949	-33.224	1.00	6.82	L
ATOM	1608	O	LEU	L	47	-4.347	-5.457	-32.860	1.00	6.11	L
ATOM	1609	N	ILE	L	48	-2.263	-4.732	-32.417	1.00	7.58	L
ATOM	1610	CA	ILE	L	48	-2.261	-5.145	-31.015	1.00	7.30	L
ATOM	1611	CB	ILE	L	48	-1.351	-6.420	-30.815	1.00	6.26	L
ATOM	1612	CG2	ILE	L	48	-1.227	-6.758	-29.342	1.00	2.73	L
ATOM	1613	CG1	ILE	L	48	-1.879	-7.611	-31.641	1.00	3.91	L
ATOM	1614	CD1	ILE	L	48	-3.265	-8.085	-31.244	1.00	5.88	L
ATOM	1615	C	ILE	L	48	-1.709	-4.047	-30.119	1.00	9.05	L
ATOM	1616	O	ILE	L	48	-0.800	-3.313	-30.513	1.00	9.25	L
ATOM	1617	N	TYR	L	49	-2.267	-3.930	-28.918	1.00	9.07	L
ATOM	1618	CA	TYR	L	49	-1.796	-2.955	-27.936	1.00	7.79	L
ATOM	1619	CB	TYR	L	49	-2.663	-1.698	-27.928	1.00	8.17	L
ATOM	1620	CG	TYR	L	49	-4.122	-1.920	-27.631	1.00	8.50	L
ATOM	1621	CD1	TYR	L	49	-4.986	-2.388	-28.610	1.00	8.58	L
ATOM	1622	CE1	TYR	L	49	-6.343	-2.525	-28.351	1.00	9.02	L
ATOM	1623	CD2	TYR	L	49	-4.650	-1.604	-26.383	1.00	6.91	L
ATOM	1624	CE2	TYR	L	49	-6.000	-1.739	-26.117	1.00	5.94	L
ATOM	1625	CZ	TYR	L	49	-6.843	-2.194	-27.102	1.00	7.73	L
ATOM	1626	OH	TYR	L	49	-8.196	-2.299	-26.855	1.00	8.78	L
ATOM	1627	C	TYR	L	49	-1.884	-3.647	-26.586	1.00	8.45	L
ATOM	1628	O	TYR	L	49	-2.469	-4.723	-26.476	1.00	7.21	L
ATOM	1629	N	ALA	L	50	-1.306	-3.042	-25.556	1.00	8.94	L
ATOM	1630	CA	ALA	L	50	-1.332	-3.661	-24.243	1.00	10.42	L
ATOM	1631	CB	ALA	L	50	-2.751	-3.633	-23.674	1.00	10.58	L
ATOM	1632	C	ALA	L	50	-0.837	-5.114	-24.366	1.00	11.72	L
ATOM	1633	O	ALA	L	50	-1.317	-6.023	-23.677	1.00	12.15	L
ATOM	1634	N	ALA	L	51	0.117	-5.322	-25.273	1.00	11.70	L
ATOM	1635	CA	ALA	L	51	0.727	-6.631	-25.523	1.00	9.42	L
ATOM	1636	CB	ALA	L	51	1.330	-7.173	-24.234	1.00	7.05	L
ATOM	1637	C	ALA	L	51	-0.173	-7.694	-26.159	1.00	9.55	L
ATOM	1638	O	ALA	L	51	0.275	-8.458	-27.015	1.00	8.26	L

10

20

30

40

ATOM	1639	N	SER	L	52	-1.439	-7.753	-25.763	1.00	9.60	L	
ATOM	1640	CA	SER	L	52	-2.315	-8.771	-26.328	1.00	10.62	L	
ATOM	1641	CB	SER	L	52	-2.398	-9.948	-25.363	1.00	10.40	L	
ATOM	1642	OG	SER	L	52	-2.708	-9.513	-24.050	1.00	10.76	L	
ATOM	1643	C	SER	L	52	-3.735	-8.345	-26.704	1.00	11.70	L	
ATOM	1644	O	SER	L	52	-4.538	-9.179	-27.112	1.00	12.32	L	
ATOM	1645	N	SER	L	53	-4.063	-7.070	-26.542	1.00	12.45	L	
ATOM	1646	CA	SER	L	53	-5.392	-6.620	-26.887	1.00	12.61	L	
ATOM	1647	CB	SER	L	53	-5.735	-5.353	-26.127	1.00	12.98	L	
ATOM	1648	OG	SER	L	53	-6.024	-5.669	-24.770	1.00	11.76	L	
ATOM	1649	C	SER	L	53	-5.434	-6.384	-28.380	1.00	14.27	L	
ATOM	1650	O	SER	L	53	-4.563	-5.711	-28.961	1.00	16.33	L	10
ATOM	1651	N	LEU	L	54	-6.448	-6.972	-28.998	1.00	12.16	L	
ATOM	1652	CA	LEU	L	54	-6.631	-6.882	-30.426	1.00	12.45	L	
ATOM	1653	CB	LEU	L	54	-7.256	-8.181	-30.925	1.00	12.18	L	
ATOM	1654	CG	LEU	L	54	-7.643	-8.244	-32.395	1.00	11.41	L	
ATOM	1655	CD1	LEU	L	54	-6.376	-8.187	-33.226	1.00	14.26	L	
ATOM	1656	CD2	LEU	L	54	-8.408	-9.519	-32.662	1.00	10.12	L	
ATOM	1657	C	LEU	L	54	-7.505	-5.699	-30.821	1.00	13.60	L	
ATOM	1658	O	LEU	L	54	-8.662	-5.606	-30.419	1.00	16.51	L	
ATOM	1659	N	GLN	L	55	-6.944	-4.798	-31.616	1.00	13.48	L	
ATOM	1660	CA	GLN	L	55	-7.668	-3.627	-32.096	1.00	14.51	L	
ATOM	1661	CB	GLN	L	55	-6.766	-2.832	-33.036	1.00	14.61	L	
ATOM	1662	CG	GLN	L	55	-7.487	-1.838	-33.930	1.00	14.24	L	
ATOM	1663	CD	GLN	L	55	-8.269	-0.805	-33.149	1.00	12.97	L	
ATOM	1664	OE1	GLN	L	55	-7.943	-0.504	-32.002	1.00	11.02	L	20
ATOM	1665	NE2	GLN	L	55	-9.292	-0.236	-33.777	1.00	13.96	L	
ATOM	1666	C	GLN	L	55	-8.942	-4.053	-32.829	1.00	15.51	L	
ATOM	1667	O	GLN	L	55	-8.971	-5.097	-33.496	1.00	16.22	L	
ATOM	1668	N	SER	L	56	-9.994	-3.254	-32.714	1.00	15.89	L	
ATOM	1669	CA	SER	L	56	-11.232	-3.609	-33.386	1.00	17.33	L	
ATOM	1670	CB	SER	L	56	-12.354	-2.646	-33.030	1.00	17.45	L	
ATOM	1671	OG	SER	L	56	-13.505	-2.971	-33.799	1.00	20.41	L	
ATOM	1672	C	SER	L	56	-11.052	-3.599	-34.889	1.00	17.72	L	
ATOM	1673	O	SER	L	56	-10.285	-2.807	-35.428	1.00	18.29	L	
ATOM	1674	N	GLY	L	57	-11.779	-4.477	-35.566	1.00	19.09	L	
ATOM	1675	CA	GLY	L	57	-11.685	-4.542	-37.011	1.00	19.73	L	
ATOM	1676	C	GLY	L	57	-10.493	-5.311	-37.551	1.00	20.28	L	
ATOM	1677	O	GLY	L	57	-10.216	-5.259	-38.749	1.00	22.53	L	30
ATOM	1678	N	VAL	L	58	-9.779	-6.001	-36.672	1.00	20.10	L	
ATOM	1679	CA	VAL	L	58	-8.639	-6.796	-37.080	1.00	20.30	L	
ATOM	1680	CB	VAL	L	58	-7.386	-6.488	-36.211	1.00	21.32	L	
ATOM	1681	CG1	VAL	L	58	-6.265	-7.495	-36.511	1.00	19.34	L	
ATOM	1682	CG2	VAL	L	58	-6.904	-5.074	-36.495	1.00	19.12	L	
ATOM	1683	C	VAL	L	58	-9.009	-8.264	-36.925	1.00	19.94	L	
ATOM	1684	O	VAL	L	58	-9.526	-8.678	-35.889	1.00	18.67	L	
ATOM	1685	N	PRO	L	59	-8.757	-9.065	-37.966	1.00	21.08	L	
ATOM	1686	CD	PRO	L	59	-8.083	-8.678	-39.214	1.00	20.13	L	
ATOM	1687	CA	PRO	L	59	-9.054	-10.500	-37.963	1.00	21.74	L	
ATOM	1688	CB	PRO	L	59	-8.499	-10.964	-39.306	1.00	21.19	L	
ATOM	1689	CG	PRO	L	59	-7.436	-9.961	-39.603	1.00	21.70	L	
ATOM	1690	C	PRO	L	59	-8.437	-11.242	-36.770	1.00	22.49	L	
ATOM	1691	O	PRO	L	59	-7.299	-10.991	-36.380	1.00	22.11	L	40
ATOM	1692	N	SER	L	60	-9.207	-12.164	-36.207	1.00	22.49	L	
ATOM	1693	CA	SER	L	60	-8.785	-12.928	-35.048	1.00	22.80	L	
ATOM	1694	CB	SER	L	60	-9.923	-13.845	-34.621	1.00	25.54	L	
ATOM	1695	OG	SER	L	60	-11.097	-13.085	-34.367	1.00	28.03	L	
ATOM	1696	C	SER	L	60	-7.510	-13.747	-35.223	1.00	22.02	L	
ATOM	1697	O	SER	L	60	-6.896	-14.162	-34.227	1.00	20.07	L	
ATOM	1698	N	ARG	L	61	-7.108	-13.982	-36.475	1.00	20.14	L	
ATOM	1699	CA	ARG	L	61	-5.897	-14.768	-36.735	1.00	19.34	L	

ATOM	1700	CB	ARG	L	61	-5.785	-15.149	-38.216	1.00	19.85	L	
ATOM	1701	CG	ARG	L	61	-5.642	-14.011	-39.193	1.00	19.55	L	
ATOM	1702	CD	ARG	L	61	-5.201	-14.557	-40.548	1.00	18.85	L	
ATOM	1703	NE	ARG	L	61	-4.882	-13.496	-41.510	1.00	18.60	L	
ATOM	1704	CZ	ARG	L	61	-5.791	-12.698	-42.066	1.00	18.92	L	
ATOM	1705	NH1	ARG	L	61	-7.071	-12.843	-41.760	1.00	19.33	L	
ATOM	1706	NH2	ARG	L	61	-5.429	-11.749	-42.918	1.00	17.42	L	
ATOM	1707	C	ARG	L	61	-4.611	-14.073	-36.265	1.00	18.31	L	
ATOM	1708	O	ARG	L	61	-3.560	-14.716	-36.123	1.00	17.76	L	
ATOM	1709	N	PHE	L	62	-4.711	-12.768	-36.014	1.00	16.50	L	
ATOM	1710	CA	PHE	L	62	-3.591	-11.994	-35.502	1.00	14.82	L	
ATOM	1711	CB	PHE	L	62	-3.683	-10.521	-35.896	1.00	13.22	L	10
ATOM	1712	CG	PHE	L	62	-3.259	-10.232	-37.296	1.00	11.96	L	
ATOM	1713	CD1	PHE	L	62	-4.194	-10.132	-38.318	1.00	11.33	L	
ATOM	1714	CD2	PHE	L	62	-1.914	-10.060	-37.597	1.00	12.51	L	
ATOM	1715	CE1	PHE	L	62	-3.789	-9.860	-39.635	1.00	12.01	L	
ATOM	1716	CE2	PHE	L	62	-1.494	-9.789	-38.906	1.00	12.70	L	
ATOM	1717	CZ	PHE	L	62	-2.433	-9.688	-39.929	1.00	11.60	L	
ATOM	1718	C	PHE	L	62	-3.708	-12.094	-33.996	1.00	15.02	L	
ATOM	1719	O	PHE	L	62	-4.782	-11.897	-33.425	1.00	14.54	L	
ATOM	1720	N	SER	L	63	-2.603	-12.404	-33.345	1.00	14.08	L	
ATOM	1721	CA	SER	L	63	-2.637	-12.535	-31.907	1.00	13.29	L	
ATOM	1722	CB	SER	L	63	-2.785	-14.020	-31.547	1.00	13.93	L	
ATOM	1723	OG	SER	L	63	-2.372	-14.294	-30.217	1.00	19.30	L	
ATOM	1724	C	SER	L	63	-1.341	-11.975	-31.373	1.00	12.67	L	
ATOM	1725	O	SER	L	63	-0.377	-11.831	-32.122	1.00	12.77	L	20
ATOM	1726	N	GLY	L	64	-1.313	-11.666	-30.082	1.00	11.59	L	
ATOM	1727	CA	GLY	L	64	-0.103	-11.137	-29.493	1.00	11.87	L	
ATOM	1728	C	GLY	L	64	0.019	-11.587	-28.068	1.00	12.34	L	
ATOM	1729	O	GLY	L	64	-0.988	-11.691	-27.376	1.00	12.02	L	
ATOM	1730	N	SER	L	65	1.242	-11.885	-27.638	1.00	14.21	L	
ATOM	1731	CA	SER	L	65	1.481	-12.309	-26.263	1.00	15.67	L	
ATOM	1732	CB	SER	L	65	1.411	-13.821	-26.144	1.00	17.02	L	
ATOM	1733	OG	SER	L	65	2.436	-14.431	-26.905	1.00	21.04	L	
ATOM	1734	C	SER	L	65	2.855	-11.853	-25.844	1.00	15.90	L	
ATOM	1735	O	SER	L	65	3.612	-11.325	-26.653	1.00	17.42	L	
ATOM	1736	N	GLY	L	66	3.173	-12.074	-24.576	1.00	15.84	L	
ATOM	1737	CA	GLY	L	66	4.464	-11.678	-24.061	1.00	15.61	L	
ATOM	1738	C	GLY	L	66	4.338	-10.874	-22.793	1.00	16.12	L	30
ATOM	1739	O	GLY	L	66	3.241	-10.464	-22.407	1.00	16.35	L	
ATOM	1740	N	SER	L	67	5.467	-10.649	-22.134	1.00	17.61	L	
ATOM	1741	CA	SER	L	67	5.458	-9.888	-20.898	1.00	18.73	L	
ATOM	1742	CB	SER	L	67	4.733	-10.686	-19.817	1.00	19.61	L	
ATOM	1743	OG	SER	L	67	4.853	-10.060	-18.555	1.00	24.17	L	
ATOM	1744	C	SER	L	67	6.866	-9.572	-20.441	1.00	18.10	L	
ATOM	1745	O	SER	L	67	7.790	-10.352	-20.666	1.00	19.07	L	
ATOM	1746	N	GLY	L	68	7.023	-8.430	-19.786	1.00	16.86	L	
ATOM	1747	CA	GLY	L	68	8.331	-8.055	-19.293	1.00	15.58	L	
ATOM	1748	C	GLY	L	68	9.251	-7.559	-20.389	1.00	14.93	L	
ATOM	1749	O	GLY	L	68	9.273	-6.371	-20.712	1.00	15.09	L	
ATOM	1750	N	THR	L	69	10.003	-8.474	-20.983	1.00	14.58	L	
ATOM	1751	CA	THR	L	69	10.932	-8.101	-22.042	1.00	13.89	L	
ATOM	1752	CB	THR	L	69	12.358	-8.443	-21.664	1.00	12.62	L	40
ATOM	1753	OG1	THR	L	69	12.695	-7.784	-20.444	1.00	11.61	L	
ATOM	1754	CG2	THR	L	69	13.309	-7.978	-22.739	1.00	14.73	L	
ATOM	1755	C	THR	L	69	10.695	-8.740	-23.398	1.00	14.85	L	
ATOM	1756	O	THR	L	69	11.043	-8.165	-24.421	1.00	15.44	L	
ATOM	1757	N	GLU	L	70	10.142	-9.941	-23.419	1.00	15.79	L	
ATOM	1758	CA	GLU	L	70	9.921	-10.589	-24.698	1.00	17.69	L	
ATOM	1759	CB	GLU	L	70	10.551	-11.987	-24.706	1.00	19.10	L	
ATOM	1760	CG	GLU	L	70	10.379	-12.728	-26.021	1.00	22.22	L	

ATOM	1761	CD	GLU	L	70	10.928	-14.127	-25.957	1.00	24.82	L
ATOM	1762	OE1	GLU	L	70	10.358	-14.952	-25.217	1.00	27.80	L
ATOM	1763	OE2	GLU	L	70	11.933	-14.412	-26.643	1.00	27.03	L
ATOM	1764	C	GLU	L	70	8.435	-10.656	-25.035	1.00	17.15	L
ATOM	1765	O	GLU	L	70	7.623	-11.105	-24.218	1.00	16.60	L
ATOM	1766	N	PHE	L	71	8.105	-10.191	-26.245	1.00	15.52	L
ATOM	1767	CA	PHE	L	71	6.739	-10.141	-26.776	1.00	12.84	L
ATOM	1768	CB	PHE	L	71	6.292	-8.694	-26.866	1.00	9.40	L
ATOM	1769	CG	PHE	L	71	6.236	-8.024	-25.544	1.00	9.01	L
ATOM	1770	CD1	PHE	L	71	5.043	-7.994	-24.816	1.00	6.35	L
ATOM	1771	CD2	PHE	L	71	7.395	-7.470	-24.988	1.00	7.48	L
ATOM	1772	CE1	PHE	L	71	5.002	-7.423	-23.552	1.00	7.02	L
ATOM	1773	CE2	PHE	L	71	7.368	-6.895	-23.721	1.00	8.02	L
ATOM	1774	CZ	PHE	L	71	6.168	-6.867	-22.990	1.00	7.39	L
ATOM	1775	C	PHE	L	71	6.688	-10.771	-28.153	1.00	13.30	L
ATOM	1776	O	PHE	L	71	7.689	-10.812	-28.857	1.00	14.78	L
ATOM	1777	N	THR	L	72	5.522	-11.252	-28.552	1.00	11.72	L
ATOM	1778	CA	THR	L	72	5.449	-11.884	-29.837	1.00	12.93	L
ATOM	1779	CB	THR	L	72	5.851	-13.382	-29.677	1.00	13.79	L
ATOM	1780	OG1	THR	L	72	5.871	-14.029	-30.955	1.00	16.29	L
ATOM	1781	CG2	THR	L	72	4.884	-14.093	-28.750	1.00	14.12	L
ATOM	1782	C	THR	L	72	4.112	-11.732	-30.578	1.00	14.12	L
ATOM	1783	O	THR	L	72	3.017	-11.877	-30.004	1.00	13.32	L
ATOM	1784	N	LEU	L	73	4.223	-11.418	-31.868	1.00	13.71	L
ATOM	1785	CA	LEU	L	73	3.068	-11.240	-32.746	1.00	13.61	L
ATOM	1786	CB	LEU	L	73	3.288	-10.048	-33.681	1.00	13.61	L
ATOM	1787	CG	LEU	L	73	2.285	-9.831	-34.820	1.00	12.11	L
ATOM	1788	CD1	LEU	L	73	0.937	-9.387	-34.247	1.00	11.81	L
ATOM	1789	CD2	LEU	L	73	2.831	-8.780	-35.766	1.00	11.75	L
ATOM	1790	C	LEU	L	73	2.940	-12.500	-33.577	1.00	13.74	L
ATOM	1791	O	LEU	L	73	3.887	-12.902	-34.252	1.00	14.87	L
ATOM	1792	N	THR	L	74	1.773	-13.124	-33.531	1.00	13.00	L
ATOM	1793	CA	THR	L	74	1.554	-14.347	-34.285	1.00	12.76	L
ATOM	1794	CB	THR	L	74	1.182	-15.517	-33.337	1.00	11.52	L
ATOM	1795	OG1	THR	L	74	2.251	-15.739	-32.410	1.00	9.59	L
ATOM	1796	CG2	THR	L	74	0.942	-16.779	-34.112	1.00	11.42	L
ATOM	1797	C	THR	L	74	0.431	-14.157	-35.302	1.00	14.52	L
ATOM	1798	O	THR	L	74	-0.611	-13.566	-34.999	1.00	13.39	L
ATOM	1799	N	ILE	L	75	0.655	-14.664	-36.507	1.00	16.24	L
ATOM	1800	CA	ILE	L	75	-0.324	-14.575	-37.575	1.00	19.83	L
ATOM	1801	CB	ILE	L	75	0.263	-13.885	-38.825	1.00	19.67	L
ATOM	1802	CG2	ILE	L	75	-0.818	-13.745	-39.902	1.00	18.59	L
ATOM	1803	CG1	ILE	L	75	0.850	-12.533	-38.437	1.00	19.11	L
ATOM	1804	CD1	ILE	L	75	1.501	-11.807	-39.572	1.00	17.61	L
ATOM	1805	C	ILE	L	75	-0.678	-16.002	-37.944	1.00	21.94	L
ATOM	1806	O	ILE	L	75	0.164	-16.729	-38.452	1.00	24.70	L
ATOM	1807	N	SER	L	76	-1.914	-16.408	-37.713	1.00	23.66	L
ATOM	1808	CA	SER	L	76	-2.287	-17.778	-38.016	1.00	26.41	L
ATOM	1809	CB	SER	L	76	-3.609	-18.105	-37.334	1.00	26.86	L
ATOM	1810	OG	SER	L	76	-3.430	-18.113	-35.939	1.00	28.66	L
ATOM	1811	C	SER	L	76	-2.358	-18.135	-39.491	1.00	27.72	L
ATOM	1812	O	SER	L	76	-1.348	-18.468	-40.109	1.00	26.56	L
ATOM	1813	N	SER	L	77	-3.563	-18.071	-40.048	1.00	29.97	L
ATOM	1814	CA	SER	L	77	-3.790	-18.392	-41.458	1.00	31.58	L
ATOM	1815	CB	SER	L	77	-5.293	-18.554	-41.711	1.00	33.53	L
ATOM	1816	OG	SER	L	77	-5.886	-19.442	-40.766	1.00	35.88	L
ATOM	1817	C	SER	L	77	-3.240	-17.287	-42.368	1.00	30.85	L
ATOM	1818	O	SER	L	77	-3.999	-16.466	-42.864	1.00	30.63	L
ATOM	1819	N	LEU	L	78	-1.928	-17.278	-42.596	1.00	30.53	L
ATOM	1820	CA	LEU	L	78	-1.301	-16.258	-43.429	1.00	30.15	L
ATOM	1821	CB	LEU	L	78	0.170	-16.605	-43.668	1.00	28.83	L

10

20

30

40

ATOM	1822	CG	LEU	L	78	1.088	-15.437	-44.047	1.00	28.76	L
ATOM	1823	CD1	LEU	L	78	1.268	-14.518	-42.853	1.00	28.55	L
ATOM	1824	CD2	LEU	L	78	2.440	-15.956	-44.511	1.00	28.72	L
ATOM	1825	C	LEU	L	78	-2.015	-16.083	-44.765	1.00	31.57	L
ATOM	1826	O	LEU	L	78	-2.232	-17.044	-45.496	1.00	32.52	L
ATOM	1827	N	GLN	L	79	-2.393	-14.850	-45.079	1.00	32.63	L
ATOM	1828	CA	GLN	L	79	-3.073	-14.576	-46.335	1.00	33.55	L
ATOM	1829	CB	GLN	L	79	-4.296	-13.709	-46.086	1.00	33.63	L
ATOM	1830	CG	GLN	L	79	-5.243	-14.244	-45.029	1.00	35.38	L
ATOM	1831	CD	GLN	L	79	-5.963	-15.507	-45.450	1.00	36.55	L
ATOM	1832	OE1	GLN	L	79	-6.674	-15.531	-46.457	1.00	38.30	L
ATOM	1833	NE2	GLN	L	79	-5.796	-16.564	-44.668	1.00	37.18	L
ATOM	1834	C	GLN	L	79	-2.125	-13.863	-47.304	1.00	34.40	L
ATOM	1835	O	GLN	L	79	-1.092	-13.315	-46.905	1.00	33.83	L
ATOM	1836	N	PRO	L	80	-2.473	-13.850	-48.596	1.00	34.60	L
ATOM	1837	CD	PRO	L	80	-3.736	-14.323	-49.186	1.00	34.49	L
ATOM	1838	CA	PRO	L	80	-1.641	-13.202	-49.611	1.00	34.81	L
ATOM	1839	CB	PRO	L	80	-2.377	-13.516	-50.901	1.00	35.12	L
ATOM	1840	CG	PRO	L	80	-3.816	-13.495	-50.448	1.00	35.60	L
ATOM	1841	C	PRO	L	80	-1.511	-11.705	-49.383	1.00	34.93	L
ATOM	1842	O	PRO	L	80	-0.559	-11.091	-49.858	1.00	36.49	L
ATOM	1843	N	GLU	L	81	-2.466	-11.119	-48.663	1.00	34.01	L
ATOM	1844	CA	GLU	L	81	-2.442	-9.687	-48.386	1.00	32.18	L
ATOM	1845	CB	GLU	L	81	-3.841	-9.089	-48.569	1.00	33.65	L
ATOM	1846	CG	GLU	L	81	-4.969	-10.115	-48.665	1.00	36.06	L
ATOM	1847	CD	GLU	L	81	-5.402	-10.622	-47.322	1.00	36.33	L
ATOM	1848	OE1	GLU	L	81	-6.230	-11.567	-47.274	1.00	35.64	L
ATOM	1849	OE2	GLU	L	81	-4.908	-10.059	-46.320	1.00	37.30	L
ATOM	1850	C	GLU	L	81	-1.885	-9.342	-47.007	1.00	30.05	L
ATOM	1851	O	GLU	L	81	-1.886	-8.182	-46.611	1.00	30.43	L
ATOM	1852	N	ASP	L	82	-1.403	-10.354	-46.291	1.00	27.93	L
ATOM	1853	CA	ASP	L	82	-0.807	-10.142	-44.985	1.00	26.19	L
ATOM	1854	CB	ASP	L	82	-0.855	-11.425	-44.150	1.00	26.09	L
ATOM	1855	CG	ASP	L	82	-2.219	-11.665	-43.540	1.00	26.98	L
ATOM	1856	OD1	ASP	L	82	-3.016	-10.704	-43.500	1.00	27.12	L
ATOM	1857	OD2	ASP	L	82	-2.498	-12.799	-43.086	1.00	26.87	L
ATOM	1858	C	ASP	L	82	0.639	-9.684	-45.164	1.00	25.38	L
ATOM	1859	O	ASP	L	82	1.377	-9.507	-44.191	1.00	25.53	L
ATOM	1860	N	PHE	L	83	1.034	-9.513	-46.423	1.00	24.11	L
ATOM	1861	CA	PHE	L	83	2.373	-9.055	-46.791	1.00	22.21	L
ATOM	1862	CB	PHE	L	83	2.555	-9.135	-48.304	1.00	24.70	L
ATOM	1863	CG	PHE	L	83	3.496	-8.112	-48.854	1.00	27.07	L
ATOM	1864	CD1	PHE	L	83	4.852	-8.143	-48.535	1.00	29.04	L
ATOM	1865	CD2	PHE	L	83	3.021	-7.095	-49.676	1.00	27.98	L
ATOM	1866	CE1	PHE	L	83	5.729	-7.169	-49.031	1.00	29.51	L
ATOM	1867	CE2	PHE	L	83	3.885	-6.115	-50.179	1.00	28.81	L
ATOM	1868	CZ	PHE	L	83	5.245	-6.150	-49.856	1.00	28.92	L
ATOM	1869	C	PHE	L	83	2.539	-7.611	-46.345	1.00	19.13	L
ATOM	1870	O	PHE	L	83	1.738	-6.748	-46.694	1.00	17.37	L
ATOM	1871	N	ALA	L	84	3.586	-7.348	-45.577	1.00	17.11	L
ATOM	1872	CA	ALA	L	84	3.829	-5.998	-45.083	1.00	14.54	L
ATOM	1873	CB	ALA	L	84	2.576	-5.475	-44.393	1.00	14.75	L
ATOM	1874	C	ALA	L	84	4.990	-5.969	-44.109	1.00	12.00	L
ATOM	1875	O	ALA	L	84	5.614	-6.993	-43.853	1.00	11.20	L
ATOM	1876	N	THR	L	85	5.287	-4.787	-43.580	1.00	10.99	L
ATOM	1877	CA	THR	L	85	6.343	-4.662	-42.576	1.00	9.98	L
ATOM	1878	CB	THR	L	85	7.239	-3.431	-42.768	1.00	10.55	L
ATOM	1879	OG1	THR	L	85	7.894	-3.485	-44.042	1.00	12.19	L
ATOM	1880	CG2	THR	L	85	8.290	-3.401	-41.656	1.00	9.30	L
ATOM	1881	C	THR	L	85	5.623	-4.495	-41.241	1.00	8.43	L
ATOM	1882	O	THR	L	85	4.729	-3.673	-41.120	1.00	6.48	L

10

20

30

40

ATOM	1883	N	TYR	L	86	5.997	-5.306	-40.259	1.00	8.48	L	
ATOM	1884	CA	TYR	L	86	5.391	-5.245	-38.949	1.00	7.21	L	
ATOM	1885	CB	TYR	L	86	5.028	-6.649	-38.460	1.00	6.82	L	
ATOM	1886	CG	TYR	L	86	3.949	-7.290	-39.306	1.00	6.34	L	
ATOM	1887	CD1	TYR	L	86	4.243	-7.762	-40.588	1.00	6.20	L	
ATOM	1888	CE1	TYR	L	86	3.253	-8.227	-41.429	1.00	6.26	L	
ATOM	1889	CD2	TYR	L	86	2.617	-7.319	-38.877	1.00	4.76	L	
ATOM	1890	CE2	TYR	L	86	1.602	-7.785	-39.714	1.00	5.10	L	
ATOM	1891	CZ	TYR	L	86	1.929	-8.236	-40.996	1.00	7.14	L	
ATOM	1892	OH	TYR	L	86	0.941	-8.659	-41.866	1.00	6.72	L	
ATOM	1893	C	TYR	L	86	6.373	-4.579	-37.995	1.00	7.26	L	
ATOM	1894	O	TYR	L	86	7.579	-4.870	-38.005	1.00	4.91	L	10
ATOM	1895	N	TYR	L	87	5.845	-3.677	-37.174	1.00	6.41	L	
ATOM	1896	CA	TYR	L	87	6.652	-2.933	-36.225	1.00	7.18	L	
ATOM	1897	CB	TYR	L	87	6.676	-1.444	-36.575	1.00	8.52	L	
ATOM	1898	CG	TYR	L	87	7.429	-1.033	-37.814	1.00	8.46	L	
ATOM	1899	CD1	TYR	L	87	6.774	-0.864	-39.030	1.00	9.06	L	
ATOM	1900	CE1	TYR	L	87	7.469	-0.430	-40.166	1.00	9.29	L	
ATOM	1901	CD2	TYR	L	87	8.800	-0.765	-37.761	1.00	8.75	L	
ATOM	1902	CE2	TYR	L	87	9.497	-0.336	-38.887	1.00	8.41	L	
ATOM	1903	CZ	TYR	L	87	8.831	-0.172	-40.080	1.00	8.83	L	
ATOM	1904	OH	TYR	L	87	9.539	0.236	-41.185	1.00	11.80	L	
ATOM	1905	C	TYR	L	87	6.099	-3.031	-34.825	1.00	7.93	L	
ATOM	1906	O	TYR	L	87	4.885	-2.992	-34.632	1.00	7.55	L	
ATOM	1907	N	CYS	L	88	6.977	-3.152	-33.840	1.00	8.98	L	20
ATOM	1908	CA	CYS	L	88	6.499	-3.166	-32.469	1.00	11.08	L	
ATOM	1909	C	CYS	L	88	6.912	-1.822	-31.879	1.00	9.49	L	
ATOM	1910	O	CYS	L	88	7.922	-1.246	-32.288	1.00	8.19	L	
ATOM	1911	CB	CYS	L	88	7.086	-4.336	-31.669	1.00	13.87	L	
ATOM	1912	SG	CYS	L	88	8.894	-4.471	-31.607	1.00	20.10	L	
ATOM	1913	N	GLN	L	89	6.116	-1.308	-30.948	1.00	7.20	L	
ATOM	1914	CA	GLN	L	89	6.407	-0.018	-30.327	1.00	6.74	L	
ATOM	1915	CB	GLN	L	89	5.560	1.069	-31.001	1.00	6.69	L	
ATOM	1916	CG	GLN	L	89	5.789	2.460	-30.496	1.00	6.01	L	
ATOM	1917	CD	GLN	L	89	4.544	3.052	-29.902	1.00	6.62	L	
ATOM	1918	OE1	GLN	L	89	3.475	3.034	-30.516	1.00	7.04	L	
ATOM	1919	NE2	GLN	L	89	4.669	3.591	-28.699	1.00	6.50	L	
ATOM	1920	C	GLN	L	89	6.122	-0.056	-28.827	1.00	6.25	L	
ATOM	1921	O	GLN	L	89	5.090	-0.584	-28.414	1.00	6.91	L	30
ATOM	1922	N	GLN	L	90	7.033	0.467	-28.002	1.00	4.40	L	
ATOM	1923	CA	GLN	L	90	6.784	0.480	-26.556	1.00	2.66	L	
ATOM	1924	CB	GLN	L	90	8.018	0.016	-25.758	1.00	2.41	L	
ATOM	1925	CG	GLN	L	90	9.279	0.918	-25.727	1.00	1.00	L	
ATOM	1926	CD	GLN	L	90	9.148	2.183	-24.860	1.00	1.97	L	
ATOM	1927	OE1	GLN	L	90	8.495	2.190	-23.802	1.00	1.00	L	
ATOM	1928	NE2	GLN	L	90	9.788	3.262	-25.311	1.00	1.00	L	
ATOM	1929	C	GLN	L	90	6.359	1.865	-26.082	1.00	3.53	L	
ATOM	1930	O	GLN	L	90	6.774	2.889	-26.635	1.00	1.89	L	
ATOM	1931	N	TYR	L	91	5.507	1.893	-25.068	1.00	4.57	L	
ATOM	1932	CA	TYR	L	91	5.053	3.153	-24.516	1.00	5.80	L	
ATOM	1933	CB	TYR	L	91	3.646	3.498	-25.013	1.00	5.04	L	
ATOM	1934	CG	TYR	L	91	2.594	2.439	-24.830	1.00	3.81	L	40
ATOM	1935	CD1	TYR	L	91	1.726	2.476	-23.745	1.00	2.40	L	
ATOM	1936	CE1	TYR	L	91	0.722	1.522	-23.601	1.00	3.37	L	
ATOM	1937	CD2	TYR	L	91	2.438	1.418	-25.774	1.00	4.35	L	
ATOM	1938	CE2	TYR	L	91	1.433	0.450	-25.643	1.00	4.21	L	
ATOM	1939	CZ	TYR	L	91	0.576	0.512	-24.548	1.00	4.57	L	
ATOM	1940	OH	TYR	L	91	-0.437	-0.423	-24.391	1.00	5.24	L	
ATOM	1941	C	TYR	L	91	5.106	3.122	-23.001	1.00	6.62	L	
ATOM	1942	O	TYR	L	91	4.224	3.610	-22.314	1.00	6.77	L	
ATOM	1943	N	HIS	L	92	6.187	2.565	-22.486	1.00	8.26	L	

ATOM	1944	CA	HIS	L	92	6.379	2.482	-21.055	1.00	9.83	L	
ATOM	1945	CB	HIS	L	92	7.304	1.307	-20.732	1.00	10.19	L	
ATOM	1946	CG	HIS	L	92	7.597	1.157	-19.277	1.00	13.25	L	
ATOM	1947	CD2	HIS	L	92	8.751	1.290	-18.579	1.00	14.04	L	
ATOM	1948	ND1	HIS	L	92	6.617	0.877	-18.351	1.00	15.26	L	
ATOM	1949	CE1	HIS	L	92	7.153	0.846	-17.143	1.00	15.88	L	
ATOM	1950	NE2	HIS	L	92	8.446	1.095	-17.254	1.00	14.69	L	
ATOM	1951	C	HIS	L	92	6.992	3.797	-20.592	1.00	9.20	L	
ATOM	1952	O	HIS	L	92	6.559	4.372	-19.608	1.00	10.88	L	
ATOM	1953	N	SER	L	93	8.020	4.257	-21.291	1.00	9.19	L	
ATOM	1954	CA	SER	L	93	8.664	5.515	-20.936	1.00	10.15	L	
ATOM	1955	CB	SER	L	93	9.917	5.274	-20.075	1.00	9.91	L	10
ATOM	1956	OG	SER	L	93	10.867	4.497	-20.754	1.00	9.93	L	
ATOM	1957	C	SER	L	93	9.037	6.274	-22.212	1.00	11.08	L	
ATOM	1958	O	SER	L	93	9.094	5.699	-23.300	1.00	13.59	L	
ATOM	1959	N	TYR	L	94	9.258	7.575	-22.080	1.00	11.16	L	
ATOM	1960	CA	TYR	L	94	9.645	8.405	-23.207	1.00	10.67	L	
ATOM	1961	CB	TYR	L	94	9.220	9.831	-22.952	1.00	10.20	L	
ATOM	1962	CG	TYR	L	94	7.750	10.031	-23.055	1.00	11.98	L	
ATOM	1963	CD1	TYR	L	94	7.126	10.063	-24.299	1.00	13.10	L	
ATOM	1964	CE1	TYR	L	94	5.764	10.284	-24.409	1.00	12.68	L	
ATOM	1965	CD2	TYR	L	94	6.970	10.214	-21.913	1.00	12.34	L	
ATOM	1966	CE2	TYR	L	94	5.606	10.434	-22.019	1.00	11.24	L	
ATOM	1967	CZ	TYR	L	94	5.017	10.473	-23.272	1.00	10.97	L	
ATOM	1968	OH	TYR	L	94	3.683	10.752	-23.393	1.00	12.39	L	20
ATOM	1969	C	TYR	L	94	11.152	8.359	-23.350	1.00	10.75	L	
ATOM	1970	O	TYR	L	94	11.864	8.329	-22.339	1.00	12.12	L	
ATOM	1971	N	PRO	L	95	11.659	8.378	-24.599	1.00	10.12	L	
ATOM	1972	CD	PRO	L	95	13.096	8.523	-24.881	1.00	10.42	L	
ATOM	1973	CA	PRO	L	95	10.891	8.452	-25.845	1.00	9.23	L	
ATOM	1974	CB	PRO	L	95	11.939	8.828	-26.890	1.00	10.36	L	
ATOM	1975	CG	PRO	L	95	13.074	9.396	-26.088	1.00	11.18	L	
ATOM	1976	C	PRO	L	95	10.259	7.125	-26.181	1.00	9.78	L	
ATOM	1977	O	PRO	L	95	10.742	6.054	-25.786	1.00	9.82	L	
ATOM	1978	N	TRP	L	96	9.171	7.189	-26.926	1.00	9.66	L	
ATOM	1979	CA	TRP	L	96	8.516	5.961	-27.329	1.00	8.38	L	
ATOM	1980	CB	TRP	L	96	7.080	6.265	-27.733	1.00	6.22	L	
ATOM	1981	CG	TRP	L	96	6.222	6.675	-26.553	1.00	6.85	L	
ATOM	1982	CD2	TRP	L	96	4.985	7.388	-26.614	1.00	5.61	L	30
ATOM	1983	CE2	TRP	L	96	4.444	7.404	-25.307	1.00	5.12	L	
ATOM	1984	CE3	TRP	L	96	4.276	8.003	-27.649	1.00	5.94	L	
ATOM	1985	CD1	TRP	L	96	6.390	6.310	-25.232	1.00	5.28	L	
ATOM	1986	NE1	TRP	L	96	5.319	6.743	-24.486	1.00	5.09	L	
ATOM	1987	CZ2	TRP	L	96	3.226	8.011	-25.012	1.00	4.95	L	
ATOM	1988	CZ3	TRP	L	96	3.063	8.607	-27.360	1.00	6.82	L	
ATOM	1989	CH2	TRP	L	96	2.546	8.603	-26.045	1.00	6.87	L	
ATOM	1990	C	TRP	L	96	9.331	5.389	-28.481	1.00	7.69	L	
ATOM	1991	O	TRP	L	96	9.669	6.098	-29.427	1.00	8.74	L	
ATOM	1992	N	THR	L	97	9.648	4.105	-28.400	1.00	6.85	L	
ATOM	1993	CA	THR	L	97	10.472	3.511	-29.424	1.00	5.66	L	
ATOM	1994	CB	THR	L	97	11.755	2.906	-28.839	1.00	5.83	L	
ATOM	1995	OG1	THR	L	97	12.374	3.857	-27.979	1.00	5.11	L	40
ATOM	1996	CG2	THR	L	97	12.736	2.559	-29.969	1.00	9.74	L	
ATOM	1997	C	THR	L	97	9.827	2.448	-30.254	1.00	5.70	L	
ATOM	1998	O	THR	L	97	8.964	1.712	-29.784	1.00	5.77	L	
ATOM	1999	N	PHE	L	98	10.268	2.377	-31.503	1.00	5.71	L	
ATOM	2000	CA	PHE	L	98	9.779	1.385	-32.417	1.00	5.89	L	
ATOM	2001	CB	PHE	L	98	9.439	2.032	-33.739	1.00	5.15	L	
ATOM	2002	CG	PHE	L	98	8.181	2.801	-33.716	1.00	4.13	L	
ATOM	2003	CD1	PHE	L	98	8.177	4.124	-33.316	1.00	5.60	L	
ATOM	2004	CD2	PHE	L	98	6.988	2.196	-34.091	1.00	4.22	L	

ATOM	2005	CE1	PHE	L	98	6.989	4.857	-33.293	1.00	7.42	L	
ATOM	2006	CE2	PHE	L	98	5.793	2.907	-34.075	1.00	6.81	L	
ATOM	2007	CZ	PHE	L	98	5.789	4.244	-33.673	1.00	7.48	L	
ATOM	2008	C	PHE	L	98	10.838	0.332	-32.625	1.00	7.27	L	
ATOM	2009	O	PHE	L	98	11.988	0.502	-32.219	1.00	8.89	L	
ATOM	2010	N	GLY	L	99	10.434	-0.780	-33.218	1.00	7.92	L	
ATOM	2011	CA	GLY	L	99	11.389	-1.824	-33.490	1.00	9.17	L	
ATOM	2012	C	GLY	L	99	11.865	-1.576	-34.911	1.00	9.56	L	
ATOM	2013	O	GLY	L	99	11.177	-0.905	-35.682	1.00	10.42	L	
ATOM	2014	N	GLN	L	100	13.028	-2.109	-35.267	1.00	9.40	L	
ATOM	2015	CA	GLN	L	100	13.551	-1.937	-36.604	1.00	9.59	L	
ATOM	2016	CB	GLN	L	100	14.878	-2.691	-36.751	1.00	8.63	L	10
ATOM	2017	CG	GLN	L	100	14.688	-4.183	-36.949	1.00	13.79	L	
ATOM	2018	CD	GLN	L	100	14.906	-4.984	-35.693	1.00	15.52	L	
ATOM	2019	OE1	GLN	L	100	14.629	-4.519	-34.583	1.00	16.85	L	
ATOM	2020	NE2	GLN	L	100	15.397	-6.213	-35.860	1.00	16.25	L	
ATOM	2021	C	GLN	L	100	12.527	-2.468	-37.621	1.00	9.72	L	
ATOM	2022	O	GLN	L	100	12.577	-2.128	-38.793	1.00	11.02	L	
ATOM	2023	N	GLY	L	101	11.600	-3.308	-37.179	1.00	8.67	L	
ATOM	2024	CA	GLY	L	101	10.612	-3.835	-38.108	1.00	10.14	L	
ATOM	2025	C	GLY	L	101	10.929	-5.179	-38.768	1.00	10.68	L	
ATOM	2026	O	GLY	L	101	12.091	-5.550	-38.941	1.00	10.81	L	
ATOM	2027	N	THR	L	102	9.882	-5.907	-39.145	1.00	10.02	L	
ATOM	2028	CA	THR	L	102	10.019	-7.212	-39.782	1.00	10.68	L	
ATOM	2029	CB	THR	L	102	9.391	-8.306	-38.919	1.00	10.47	L	
ATOM	2030	OG1	THR	L	102	10.062	-8.363	-37.657	1.00	12.78	L	20
ATOM	2031	CG2	THR	L	102	9.482	-9.642	-39.605	1.00	9.34	L	
ATOM	2032	C	THR	L	102	9.302	-7.227	-41.125	1.00	12.44	L	
ATOM	2033	O	THR	L	102	8.083	-7.049	-41.176	1.00	12.34	L	
ATOM	2034	N	LYS	L	103	10.038	-7.460	-42.207	1.00	12.98	L	
ATOM	2035	CA	LYS	L	103	9.422	-7.471	-43.528	1.00	14.84	L	
ATOM	2036	CB	LYS	L	103	10.385	-6.893	-44.567	1.00	15.63	L	
ATOM	2037	CG	LYS	L	103	9.767	-6.747	-45.945	1.00	18.74	L	
ATOM	2038	CD	LYS	L	103	10.845	-6.785	-47.009	1.00	21.41	L	
ATOM	2039	CE	LYS	L	103	10.264	-6.625	-48.396	1.00	22.44	L	
ATOM	2040	NZ	LYS	L	103	9.589	-5.300	-48.528	1.00	23.85	L	
ATOM	2041	C	LYS	L	103	8.974	-8.871	-43.943	1.00	14.71	L	
ATOM	2042	O	LYS	L	103	9.794	-9.778	-44.132	1.00	15.12	L	
ATOM	2043	N	LEU	L	104	7.666	-9.031	-44.112	1.00	14.45	L	30
ATOM	2044	CA	LEU	L	104	7.091	-10.325	-44.468	1.00	14.60	L	
ATOM	2045	CB	LEU	L	104	5.972	-10.670	-43.481	1.00	11.99	L	
ATOM	2046	CG	LEU	L	104	5.099	-11.881	-43.764	1.00	11.10	L	
ATOM	2047	CD1	LEU	L	104	5.932	-13.135	-43.663	1.00	11.33	L	
ATOM	2048	CD2	LEU	L	104	3.942	-11.917	-42.770	1.00	11.59	L	
ATOM	2049	C	LEU	L	104	6.562	-10.423	-45.892	1.00	15.97	L	
ATOM	2050	O	LEU	L	104	5.579	-9.775	-46.258	1.00	16.90	L	
ATOM	2051	N	GLU	L	105	7.223	-11.236	-46.701	1.00	16.86	L	
ATOM	2052	CA	GLU	L	105	6.762	-11.411	-48.063	1.00	19.59	L	
ATOM	2053	CB	GLU	L	105	7.919	-11.295	-49.046	1.00	20.51	L	
ATOM	2054	CG	GLU	L	105	8.883	-12.420	-48.980	1.00	20.99	L	
ATOM	2055	CD	GLU	L	105	8.948	-13.134	-50.299	1.00	21.61	L	
ATOM	2056	OE1	GLU	L	105	9.142	-12.436	-51.313	1.00	22.37	L	
ATOM	2057	OE2	GLU	L	105	8.809	-14.376	-50.328	1.00	21.64	L	40
ATOM	2058	C	GLU	L	105	6.094	-12.771	-48.168	1.00	20.32	L	
ATOM	2059	O	GLU	L	105	6.404	-13.685	-47.398	1.00	20.09	L	
ATOM	2060	N	ILE	L	106	5.169	-12.898	-49.111	1.00	21.44	L	
ATOM	2061	CA	ILE	L	106	4.446	-14.143	-49.276	1.00	23.43	L	
ATOM	2062	CB	ILE	L	106	3.028	-13.889	-49.771	1.00	22.83	L	
ATOM	2063	CG2	ILE	L	106	2.236	-15.179	-49.698	1.00	22.89	L	
ATOM	2064	CG1	ILE	L	106	2.389	-12.769	-48.945	1.00	20.99	L	
ATOM	2065	CD1	ILE	L	106	2.379	-13.024	-47.451	1.00	20.39	L	

ATOM	2066	C	ILE	L	106	5.121	-15.103	-50.230	1.00	24.93	L	
ATOM	2067	O	ILE	L	106	5.380	-14.771	-51.387	1.00	24.17	L	
ATOM	2068	N	LYS	L	107	5.409	-16.296	-49.722	1.00	28.03	L	
ATOM	2069	CA	LYS	L	107	6.045	-17.327	-50.515	1.00	30.61	L	
ATOM	2070	CB	LYS	L	107	6.328	-18.571	-49.679	1.00	32.10	L	
ATOM	2071	CG	LYS	L	107	7.301	-19.534	-50.336	1.00	34.09	L	
ATOM	2072	CD	LYS	L	107	8.721	-19.326	-49.823	1.00	36.04	L	
ATOM	2073	CE	LYS	L	107	8.846	-19.791	-48.369	1.00	36.60	L	
ATOM	2074	NZ	LYS	L	107	10.213	-19.608	-47.801	1.00	37.56	L	
ATOM	2075	C	LYS	L	107	5.041	-17.670	-51.579	1.00	31.41	L	
ATOM	2076	O	LYS	L	107	3.827	-17.614	-51.373	1.00	31.92	L	
ATOM	2077	N	ARG	L	108	5.536	-18.025	-52.734	1.00	31.09	L	10
ATOM	2078	CA	ARG	L	108	4.608	-18.351	-53.773	1.00	30.67	L	
ATOM	2079	CB	ARG	L	108	4.218	-17.065	-54.487	1.00	29.56	L	
ATOM	2080	CG	ARG	L	108	2.983	-17.166	-55.316	1.00	29.55	L	
ATOM	2081	CD	ARG	L	108	3.044	-16.154	-56.428	1.00	29.00	L	
ATOM	2082	NE	ARG	L	108	3.220	-16.825	-57.705	1.00	30.73	L	
ATOM	2083	CZ	ARG	L	108	2.221	-17.208	-58.491	1.00	31.28	L	
ATOM	2084	NH1	ARG	L	108	0.967	-16.966	-58.125	1.00	32.82	L	
ATOM	2085	NH2	ARG	L	108	2.473	-17.856	-59.628	1.00	30.38	L	
ATOM	2086	C	ARG	L	108	5.292	-19.314	-54.710	1.00	30.78	L	
ATOM	2087	O	ARG	L	108	6.516	-19.477	-54.662	1.00	30.73	L	
ATOM	2885	CB	GLN	H	1	-17.228	9.372	-41.991	1.00	38.03	H	
ATOM	2886	CG	GLN	H	1	-17.154	10.882	-41.725	1.00	41.63	H	
ATOM	2887	CD	GLN	H	1	-18.494	11.453	-41.221	1.00	44.22	H	20
ATOM	2888	OE1	GLN	H	1	-19.539	11.258	-41.860	1.00	45.30	H	
ATOM	2889	NE2	GLN	H	1	-18.464	12.166	-40.083	1.00	44.03	H	
ATOM	2890	C	GLN	H	1	-14.757	9.019	-41.817	1.00	31.13	H	
ATOM	2891	O	GLN	H	1	-14.172	10.095	-41.886	1.00	31.51	H	
ATOM	2892	N	GLN	H	1	-16.184	7.270	-42.783	1.00	34.00	H	
ATOM	2893	CA	GLN	H	1	-15.992	8.747	-42.656	1.00	34.12	H	
ATOM	2894	N	VAL	H	2	-14.367	8.024	-41.031	1.00	26.54	H	
ATOM	2895	CA	VAL	H	2	-13.212	8.138	-40.155	1.00	23.34	H	
ATOM	2896	CB	VAL	H	2	-13.245	7.012	-39.131	1.00	22.59	H	
ATOM	2897	CG1	VAL	H	2	-13.829	5.784	-39.774	1.00	21.51	H	
ATOM	2898	CG2	VAL	H	2	-11.850	6.738	-38.596	1.00	22.41	H	
ATOM	2899	C	VAL	H	2	-11.892	8.101	-40.926	1.00	21.85	H	
ATOM	2900	O	VAL	H	2	-11.568	7.107	-41.560	1.00	22.10	H	
ATOM	2901	N	SER	H	3	-11.121	9.179	-40.868	1.00	20.36	H	30
ATOM	2902	CA	SER	H	3	-9.858	9.213	-41.596	1.00	18.47	H	
ATOM	2903	CB	SER	H	3	-10.141	9.399	-43.095	1.00	18.64	H	
ATOM	2904	OG	SER	H	3	-10.823	10.625	-43.336	1.00	18.79	H	
ATOM	2905	C	SER	H	3	-8.909	10.315	-41.108	1.00	16.35	H	
ATOM	2906	O	SER	H	3	-9.301	11.207	-40.349	1.00	14.67	H	
ATOM	2907	N	LEU	H	4	-7.655	10.245	-41.545	1.00	14.24	H	
ATOM	2908	CA	LEU	H	4	-6.668	11.258	-41.184	1.00	14.54	H	
ATOM	2909	CB	LEU	H	4	-5.672	10.723	-40.157	1.00	13.53	H	
ATOM	2910	CG	LEU	H	4	-6.211	10.379	-38.766	1.00	13.76	H	
ATOM	2911	CD1	LEU	H	4	-5.092	9.717	-37.965	1.00	12.35	H	
ATOM	2912	CD2	LEU	H	4	-6.742	11.635	-38.063	1.00	11.54	H	
ATOM	2913	C	LEU	H	4	-5.913	11.687	-42.427	1.00	14.67	H	
ATOM	2914	O	LEU	H	4	-5.243	10.867	-43.049	1.00	15.74	H	40
ATOM	2915	N	ARG	H	5	-6.024	12.964	-42.788	1.00	15.44	H	
ATOM	2916	CA	ARG	H	5	-5.350	13.478	-43.975	1.00	17.23	H	
ATOM	2917	CB	ARG	H	5	-6.361	14.004	-45.003	1.00	20.91	H	
ATOM	2918	CG	ARG	H	5	-7.130	12.917	-45.748	1.00	26.83	H	
ATOM	2919	CD	ARG	H	5	-7.934	13.525	-46.904	1.00	34.28	H	
ATOM	2920	NE	ARG	H	5	-9.324	13.826	-46.553	1.00	38.31	H	
ATOM	2921	CZ	ARG	H	5	-10.294	12.916	-46.470	1.00	41.05	H	
ATOM	2922	NH1	ARG	H	5	-10.030	11.638	-46.708	1.00	41.35	H	
ATOM	2923	NH2	ARG	H	5	-11.537	13.283	-46.169	1.00	42.82	H	

ATOM	2924	C	ARG	H	5	-4.358	14.567	-43.655	1.00	15.33	H
ATOM	2925	O	ARG	H	5	-4.731	15.672	-43.252	1.00	15.11	H
ATOM	2926	N	GLU	H	6	-3.082	14.252	-43.830	1.00	14.48	H
ATOM	2927	CA	GLU	H	6	-2.043	15.240	-43.555	1.00	13.53	H
ATOM	2928	CB	GLU	H	6	-0.837	14.591	-42.848	1.00	10.37	H
ATOM	2929	CG	GLU	H	6	-0.242	13.379	-43.502	1.00	10.69	H
ATOM	2930	CD	GLU	H	6	-0.904	12.053	-43.105	1.00	12.25	H
ATOM	2931	OE1	GLU	H	6	-1.689	11.509	-43.910	1.00	11.59	H
ATOM	2932	OE2	GLU	H	6	-0.622	11.540	-41.999	1.00	11.51	H
ATOM	2933	C	GLU	H	6	-1.595	16.021	-44.790	1.00	11.79	H
ATOM	2934	O	GLU	H	6	-1.707	15.556	-45.914	1.00	11.18	H
ATOM	2935	N	SER	H	7	-1.120	17.236	-44.576	1.00	12.26	H
ATOM	2936	CA	SER	H	7	-0.672	18.049	-45.684	1.00	12.42	H
ATOM	2937	CB	SER	H	7	-1.867	18.735	-46.366	1.00	9.88	H
ATOM	2938	OG	SER	H	7	-2.516	19.601	-45.461	1.00	8.60	H
ATOM	2939	C	SER	H	7	0.302	19.099	-45.169	1.00	13.19	H
ATOM	2940	O	SER	H	7	0.463	19.295	-43.950	1.00	11.90	H
ATOM	2941	N	GLY	H	8	0.934	19.777	-46.120	1.00	13.68	H
ATOM	2942	CA	GLY	H	8	1.892	20.813	-45.801	1.00	13.72	H
ATOM	2943	C	GLY	H	8	3.277	20.422	-46.251	1.00	13.27	H
ATOM	2944	O	GLY	H	8	4.133	21.279	-46.429	1.00	14.46	H
ATOM	2945	N	GLY	H	9	3.493	19.125	-46.446	1.00	13.04	H
ATOM	2946	CA	GLY	H	9	4.802	18.651	-46.855	1.00	13.75	H
ATOM	2947	C	GLY	H	9	5.258	19.190	-48.193	1.00	14.12	H
ATOM	2948	O	GLY	H	9	4.449	19.475	-49.070	1.00	14.64	H
ATOM	2949	N	GLY	H	10	6.569	19.324	-48.335	1.00	12.90	H
ATOM	2950	CA	GLY	H	10	7.147	19.815	-49.562	1.00	11.12	H
ATOM	2951	C	GLY	H	10	8.640	19.951	-49.395	1.00	12.16	H
ATOM	2952	O	GLY	H	10	9.231	19.397	-48.460	1.00	14.47	H
ATOM	2953	N	LEU	H	11	9.254	20.695	-50.301	1.00	11.81	H
ATOM	2954	CA	LEU	H	11	10.695	20.902	-50.264	1.00	11.20	H
ATOM	2955	CB	LEU	H	11	11.194	21.229	-51.666	1.00	11.52	H
ATOM	2956	CG	LEU	H	11	12.655	21.626	-51.772	1.00	9.91	H
ATOM	2957	CD1	LEU	H	11	13.531	20.399	-51.735	1.00	9.46	H
ATOM	2958	CD2	LEU	H	11	12.840	22.394	-53.039	1.00	11.08	H
ATOM	2959	C	LEU	H	11	10.970	22.065	-49.336	1.00	10.64	H
ATOM	2960	O	LEU	H	11	10.341	23.103	-49.445	1.00	11.74	H
ATOM	2961	N	VAL	H	12	11.895	21.898	-48.412	1.00	11.07	H
ATOM	2962	CA	VAL	H	12	12.199	22.984	-47.500	1.00	11.68	H
ATOM	2963	CB	VAL	H	12	11.525	22.744	-46.117	1.00	11.62	H
ATOM	2964	CG1	VAL	H	12	11.994	21.426	-45.533	1.00	11.18	H
ATOM	2965	CG2	VAL	H	12	11.831	23.881	-45.177	1.00	10.48	H
ATOM	2966	C	VAL	H	12	13.714	23.124	-47.362	1.00	11.68	H
ATOM	2967	O	VAL	H	12	14.449	22.135	-47.333	1.00	11.18	H
ATOM	2968	N	GLN	H	13	14.178	24.364	-47.284	1.00	13.31	H
ATOM	2969	CA	GLN	H	13	15.606	24.628	-47.187	1.00	15.00	H
ATOM	2970	CB	GLN	H	13	15.919	26.019	-47.755	1.00	15.90	H
ATOM	2971	CG	GLN	H	13	16.193	26.029	-49.271	1.00	16.90	H
ATOM	2972	CD	GLN	H	13	16.243	27.430	-49.863	1.00	18.00	H
ATOM	2973	OE1	GLN	H	13	16.870	28.332	-49.308	1.00	18.96	H
ATOM	2974	NE2	GLN	H	13	15.597	27.611	-51.009	1.00	18.93	H
ATOM	2975	C	GLN	H	13	16.152	24.501	-45.777	1.00	13.89	H
ATOM	2976	O	GLN	H	13	15.469	24.805	-44.806	1.00	14.83	H
ATOM	2977	N	PRO	H	14	17.402	24.044	-45.647	1.00	13.23	H
ATOM	2978	CD	PRO	H	14	18.348	23.638	-46.699	1.00	13.82	H
ATOM	2979	CA	PRO	H	14	18.001	23.893	-44.319	1.00	12.61	H
ATOM	2980	CB	PRO	H	14	19.445	23.511	-44.630	1.00	11.95	H
ATOM	2981	CG	PRO	H	14	19.321	22.762	-45.916	1.00	13.51	H
ATOM	2982	C	PRO	H	14	17.895	25.206	-43.561	1.00	12.29	H
ATOM	2983	O	PRO	H	14	18.215	26.265	-44.089	1.00	13.56	H
ATOM	2984	N	GLY	H	15	17.415	25.127	-42.329	1.00	11.52	H

10

20

30

40

ATOM	2985	CA	GLY	H	15	17.278	26.320	-41.529	1.00	10.23	H
ATOM	2986	C	GLY	H	15	15.918	26.977	-41.625	1.00	11.22	H
ATOM	2987	O	GLY	H	15	15.526	27.715	-40.724	1.00	9.73	H
ATOM	2988	N	ARG	H	16	15.186	26.719	-42.702	1.00	12.69	H
ATOM	2989	CA	ARG	H	16	13.877	27.342	-42.854	1.00	14.66	H
ATOM	2990	CB	ARG	H	16	13.435	27.319	-44.314	1.00	18.56	H
ATOM	2991	CG	ARG	H	16	14.241	28.208	-45.227	1.00	21.98	H
ATOM	2992	CD	ARG	H	16	13.934	29.663	-44.974	1.00	25.86	H
ATOM	2993	NE	ARG	H	16	14.396	30.485	-46.095	1.00	32.22	H
ATOM	2994	CZ	ARG	H	16	13.815	30.518	-47.295	1.00	34.94	H
ATOM	2995	NH1	ARG	H	16	12.732	29.783	-47.529	1.00	36.64	H
ATOM	2996	NH2	ARG	H	16	14.333	31.255	-48.274	1.00	36.71	H
ATOM	2997	C	ARG	H	16	12.875	26.594	-42.005	1.00	14.25	H
ATOM	2998	O	ARG	H	16	13.233	25.638	-41.321	1.00	14.28	H
ATOM	2999	N	SER	H	17	11.623	27.037	-42.029	1.00	13.56	H
ATOM	3000	CA	SER	H	17	10.585	26.376	-41.248	1.00	12.76	H
ATOM	3001	CB	SER	H	17	10.251	27.185	-39.976	1.00	10.97	H
ATOM	3002	OG	SER	H	17	9.880	28.517	-40.261	1.00	10.44	H
ATOM	3003	C	SER	H	17	9.338	26.116	-42.083	1.00	12.50	H
ATOM	3004	O	SER	H	17	8.999	26.880	-42.990	1.00	11.82	H
ATOM	3005	N	LEU	H	18	8.672	25.012	-41.763	1.00	12.08	H
ATOM	3006	CA	LEU	H	18	7.480	24.574	-42.471	1.00	12.12	H
ATOM	3007	CB	LEU	H	18	7.854	23.397	-43.366	1.00	12.29	H
ATOM	3008	CG	LEU	H	18	6.806	22.856	-44.314	1.00	15.26	H
ATOM	3009	CD1	LEU	H	18	6.544	23.892	-45.426	1.00	16.99	H
ATOM	3010	CD2	LEU	H	18	7.298	21.565	-44.932	1.00	14.85	H
ATOM	3011	C	LEU	H	18	6.409	24.131	-41.469	1.00	12.46	H
ATOM	3012	O	LEU	H	18	6.740	23.668	-40.376	1.00	13.86	H
ATOM	3013	N	ARG	H	19	5.134	24.269	-41.837	1.00	11.69	H
ATOM	3014	CA	ARG	H	19	4.053	23.858	-40.949	1.00	11.63	H
ATOM	3015	CB	ARG	H	19	3.108	25.010	-40.584	1.00	13.15	H
ATOM	3016	CG	ARG	H	19	2.323	24.705	-39.311	1.00	17.79	H
ATOM	3017	CD	ARG	H	19	1.220	25.700	-39.011	1.00	20.71	H
ATOM	3018	NE	ARG	H	19	0.145	25.586	-39.985	1.00	24.55	H
ATOM	3019	CZ	ARG	H	19	-1.106	25.997	-39.786	1.00	26.15	H
ATOM	3020	NH1	ARG	H	19	-1.453	26.559	-38.629	1.00	27.90	H
ATOM	3021	NH2	ARG	H	19	-2.011	25.833	-40.750	1.00	23.19	H
ATOM	3022	C	ARG	H	19	3.232	22.752	-41.554	1.00	10.59	H
ATOM	3023	O	ARG	H	19	2.636	22.908	-42.622	1.00	11.48	H
ATOM	3024	N	LEU	H	20	3.195	21.625	-40.856	1.00	8.72	H
ATOM	3025	CA	LEU	H	20	2.431	20.459	-41.299	1.00	6.73	H
ATOM	3026	CB	LEU	H	20	3.193	19.198	-40.933	1.00	5.77	H
ATOM	3027	CG	LEU	H	20	3.855	18.376	-42.018	1.00	6.73	H
ATOM	3028	CD1	LEU	H	20	4.504	19.241	-43.114	1.00	5.43	H
ATOM	3029	CD2	LEU	H	20	4.875	17.511	-41.312	1.00	4.29	H
ATOM	3030	C	LEU	H	20	1.076	20.433	-40.599	1.00	5.76	H
ATOM	3031	O	LEU	H	20	0.984	20.689	-39.406	1.00	6.95	H
ATOM	3032	N	SER	H	21	0.026	20.111	-41.329	1.00	5.05	H
ATOM	3033	CA	SER	H	21	-1.271	20.061	-40.691	1.00	5.74	H
ATOM	3034	CB	SER	H	21	-2.160	21.227	-41.124	1.00	5.27	H
ATOM	3035	OG	SER	H	21	-2.582	21.072	-42.462	1.00	8.84	H
ATOM	3036	C	SER	H	21	-1.929	18.744	-41.036	1.00	5.36	H
ATOM	3037	O	SER	H	21	-1.707	18.214	-42.121	1.00	2.68	H
ATOM	3038	N	CYS	H	22	-2.698	18.215	-40.083	1.00	7.14	H
ATOM	3039	CA	CYS	H	22	-3.415	16.950	-40.221	1.00	9.56	H
ATOM	3040	C	CYS	H	22	-4.910	17.166	-39.980	1.00	9.14	H
ATOM	3041	O	CYS	H	22	-5.308	17.596	-38.894	1.00	7.69	H
ATOM	3042	CB	CYS	H	22	-2.922	15.911	-39.204	1.00	11.39	H
ATOM	3043	SG	CYS	H	22	-3.763	14.298	-39.439	1.00	13.19	H
ATOM	3044	N	THR	H	23	-5.731	16.873	-40.989	1.00	8.90	H
ATOM	3045	CA	THR	H	23	-7.184	17.020	-40.872	1.00	9.76	H

10

20

30

40

ATOM	3046	CB	THR	H	23	-7.819	17.476	-42.177	1.00	10.09	H
ATOM	3047	OG1	THR	H	23	-7.296	18.758	-42.534	1.00	12.65	H
ATOM	3048	CG2	THR	H	23	-9.335	17.552	-42.022	1.00	8.41	H
ATOM	3049	C	THR	H	23	-7.862	15.714	-40.488	1.00	9.51	H
ATOM	3050	O	THR	H	23	-7.682	14.686	-41.152	1.00	9.77	H
ATOM	3051	N	ALA	H	24	-8.664	15.771	-39.430	1.00	7.58	H
ATOM	3052	CA	ALA	H	24	-9.375	14.601	-38.941	1.00	6.53	H
ATOM	3053	CB	ALA	H	24	-9.189	14.512	-37.453	1.00	5.54	H
ATOM	3054	C	ALA	H	24	-10.873	14.590	-39.280	1.00	6.84	H
ATOM	3055	O	ALA	H	24	-11.472	15.630	-39.561	1.00	6.30	H
ATOM	3056	N	SER	H	25	-11.468	13.402	-39.268	1.00	7.53	H
ATOM	3057	CA	SER	H	25	-12.891	13.275	-39.529	1.00	9.12	H
ATOM	3058	CB	SER	H	25	-13.207	13.521	-41.003	1.00	10.49	H
ATOM	3059	OG	SER	H	25	-12.900	12.376	-41.778	1.00	13.85	H
ATOM	3060	C	SER	H	25	-13.392	11.900	-39.138	1.00	8.68	H
ATOM	3061	O	SER	H	25	-12.610	10.959	-39.071	1.00	9.15	H
ATOM	3062	N	GLY	H	26	-14.694	11.803	-38.863	1.00	7.31	H
ATOM	3063	CA	GLY	H	26	-15.294	10.534	-38.512	1.00	5.63	H
ATOM	3064	C	GLY	H	26	-15.259	10.129	-37.052	1.00	6.29	H
ATOM	3065	O	GLY	H	26	-15.746	9.043	-36.718	1.00	6.85	H
ATOM	3066	N	PHE	H	27	-14.676	10.970	-36.195	1.00	5.39	H
ATOM	3067	CA	PHE	H	27	-14.602	10.703	-34.764	1.00	3.21	H
ATOM	3068	CB	PHE	H	27	-13.394	9.836	-34.430	1.00	3.38	H
ATOM	3069	CG	PHE	H	27	-12.069	10.493	-34.681	1.00	6.17	H
ATOM	3070	CD1	PHE	H	27	-11.388	11.128	-33.649	1.00	7.13	H
ATOM	3071	CD2	PHE	H	27	-11.485	10.459	-35.948	1.00	8.80	H
ATOM	3072	CE1	PHE	H	27	-10.129	11.725	-33.872	1.00	8.38	H
ATOM	3073	CE2	PHE	H	27	-10.224	11.053	-36.192	1.00	7.26	H
ATOM	3074	CZ	PHE	H	27	-9.546	11.687	-35.145	1.00	7.99	H
ATOM	3075	C	PHE	H	27	-14.534	12.027	-34.038	1.00	3.40	H
ATOM	3076	O	PHE	H	27	-14.437	13.059	-34.677	1.00	2.87	H
ATOM	3077	N	THR	H	28	-14.622	12.007	-32.710	1.00	5.40	H
ATOM	3078	CA	THR	H	28	-14.601	13.243	-31.932	1.00	6.21	H
ATOM	3079	CB	THR	H	28	-15.466	13.120	-30.668	1.00	6.55	H
ATOM	3080	OG1	THR	H	28	-16.790	12.732	-31.047	1.00	7.06	H
ATOM	3081	CG2	THR	H	28	-15.537	14.448	-29.940	1.00	5.57	H
ATOM	3082	C	THR	H	28	-13.178	13.618	-31.539	1.00	8.34	H
ATOM	3083	O	THR	H	28	-12.650	13.174	-30.513	1.00	7.70	H
ATOM	3084	N	PHE	H	29	-12.586	14.471	-32.366	1.00	9.20	H
ATOM	3085	CA	PHE	H	29	-11.219	14.939	-32.223	1.00	8.64	H
ATOM	3086	CB	PHE	H	29	-11.023	16.179	-33.108	1.00	6.86	H
ATOM	3087	CG	PHE	H	29	-9.588	16.496	-33.401	1.00	5.50	H
ATOM	3088	CD1	PHE	H	29	-8.792	15.590	-34.095	1.00	4.60	H
ATOM	3089	CD2	PHE	H	29	-9.033	17.706	-32.999	1.00	4.43	H
ATOM	3090	CE1	PHE	H	29	-7.466	15.879	-34.382	1.00	5.04	H
ATOM	3091	CE2	PHE	H	29	-7.706	18.005	-33.281	1.00	4.00	H
ATOM	3092	CZ	PHE	H	29	-6.923	17.089	-33.977	1.00	5.16	H
ATOM	3093	C	PHE	H	29	-10.706	15.231	-30.821	1.00	9.74	H
ATOM	3094	O	PHE	H	29	-9.661	14.697	-30.422	1.00	8.35	H
ATOM	3095	N	ARG	H	30	-11.421	16.073	-30.077	1.00	12.71	H
ATOM	3096	CA	ARG	H	30	-10.984	16.465	-28.728	1.00	14.89	H
ATOM	3097	CB	ARG	H	30	-11.880	17.577	-28.172	1.00	18.34	H
ATOM	3098	CG	ARG	H	30	-13.328	17.141	-28.001	1.00	25.22	H
ATOM	3099	CD	ARG	H	30	-14.242	18.281	-27.550	1.00	30.89	H
ATOM	3100	NE	ARG	H	30	-14.174	18.521	-26.112	1.00	34.44	H
ATOM	3101	CZ	ARG	H	30	-14.768	19.538	-25.477	1.00	37.44	H
ATOM	3102	NH1	ARG	H	30	-15.486	20.435	-26.150	1.00	36.31	H
ATOM	3103	NH2	ARG	H	30	-14.647	19.660	-24.153	1.00	37.84	H
ATOM	3104	C	ARG	H	30	-10.960	15.307	-27.739	1.00	14.44	H
ATOM	3105	O	ARG	H	30	-10.426	15.442	-26.641	1.00	14.72	H
ATOM	3106	N	HIS	H	31	-11.522	14.170	-28.134	1.00	13.78	H

10

20

30

40

ATOM	3107	CA	HIS	H	31	-11.580	13.006	-27.263	1.00	13.18	H
ATOM	3108	CB	HIS	H	31	-12.850	12.186	-27.530	1.00	14.12	H
ATOM	3109	CG	HIS	H	31	-14.089	12.735	-26.899	1.00	14.52	H
ATOM	3110	CD2	HIS	H	31	-14.314	13.900	-26.247	1.00	14.13	H
ATOM	3111	ND1	HIS	H	31	-15.279	12.046	-26.883	1.00	13.70	H
ATOM	3112	CE1	HIS	H	31	-16.190	12.761	-26.244	1.00	15.24	H
ATOM	3113	NE2	HIS	H	31	-15.628	13.888	-25.850	1.00	14.50	H
ATOM	3114	C	HIS	H	31	-10.408	12.073	-27.426	1.00	12.58	H
ATOM	3115	O	HIS	H	31	-10.392	10.995	-26.834	1.00	14.16	H
ATOM	3116	N	HIS	H	32	-9.434	12.467	-28.229	1.00	12.49	H
ATOM	3117	CA	HIS	H	32	-8.304	11.585	-28.478	1.00	12.89	H
ATOM	3118	CB	HIS	H	32	-8.545	10.851	-29.808	1.00	13.05	H
ATOM	3119	CG	HIS	H	32	-9.697	9.889	-29.761	1.00	12.70	H
ATOM	3120	CD2	HIS	H	32	-10.988	10.023	-30.149	1.00	12.40	H
ATOM	3121	ND1	HIS	H	32	-9.592	8.631	-29.209	1.00	12.19	H
ATOM	3122	CE1	HIS	H	32	-10.768	8.029	-29.258	1.00	13.35	H
ATOM	3123	NE2	HIS	H	32	-11.633	8.852	-29.822	1.00	12.35	H
ATOM	3124	C	HIS	H	32	-6.976	12.326	-28.504	1.00	12.49	H
ATOM	3125	O	HIS	H	32	-6.920	13.476	-28.918	1.00	14.67	H
ATOM	3126	N	GLY	H	33	-5.914	11.687	-28.026	1.00	11.48	H
ATOM	3127	CA	GLY	H	33	-4.611	12.327	-28.063	1.00	10.32	H
ATOM	3128	C	GLY	H	33	-4.052	12.137	-29.461	1.00	8.82	H
ATOM	3129	O	GLY	H	33	-4.339	11.127	-30.101	1.00	10.42	H
ATOM	3130	N	MET	H	34	-3.276	13.086	-29.965	1.00	7.85	H
ATOM	3131	CA	MET	H	34	-2.721	12.935	-31.320	1.00	6.64	H
ATOM	3132	CB	MET	H	34	-3.173	14.090	-32.218	1.00	4.40	H
ATOM	3133	CG	MET	H	34	-4.710	14.204	-32.374	1.00	4.44	H
ATOM	3134	SD	MET	H	34	-5.426	12.756	-33.283	1.00	3.13	H
ATOM	3135	CE	MET	H	34	-4.669	12.931	-34.869	1.00	3.16	H
ATOM	3136	C	MET	H	34	-1.201	12.896	-31.281	1.00	6.08	H
ATOM	3137	O	MET	H	34	-0.575	13.439	-30.381	1.00	5.25	H
ATOM	3138	N	THR	H	35	-0.607	12.267	-32.274	1.00	6.01	H
ATOM	3139	CA	THR	H	35	0.828	12.175	-32.290	1.00	7.01	H
ATOM	3140	CB	THR	H	35	1.292	10.851	-31.608	1.00	9.35	H
ATOM	3141	OG1	THR	H	35	2.719	10.707	-31.709	1.00	10.60	H
ATOM	3142	CG2	THR	H	35	0.633	9.661	-32.289	1.00	10.35	H
ATOM	3143	C	THR	H	35	1.383	12.231	-33.710	1.00	5.93	H
ATOM	3144	O	THR	H	35	0.672	11.965	-34.690	1.00	4.87	H
ATOM	3145	N	TRP	H	36	2.659	12.591	-33.812	1.00	5.33	H
ATOM	3146	CA	TRP	H	36	3.335	12.655	-35.097	1.00	3.82	H
ATOM	3147	CB	TRP	H	36	4.005	14.005	-35.327	1.00	1.93	H
ATOM	3148	CG	TRP	H	36	3.059	15.064	-35.776	1.00	3.01	H
ATOM	3149	CD2	TRP	H	36	2.500	15.209	-37.090	1.00	2.59	H
ATOM	3150	CE2	TRP	H	36	1.656	16.338	-37.063	1.00	1.00	H
ATOM	3151	CE3	TRP	H	36	2.632	14.491	-38.285	1.00	2.19	H
ATOM	3152	CD1	TRP	H	36	2.540	16.079	-35.029	1.00	1.86	H
ATOM	3153	NE1	TRP	H	36	1.699	16.849	-35.796	1.00	1.16	H
ATOM	3154	CZ2	TRP	H	36	0.953	16.773	-38.178	1.00	1.00	H
ATOM	3155	CZ3	TRP	H	36	1.930	14.923	-39.395	1.00	1.00	H
ATOM	3156	CH2	TRP	H	36	1.100	16.057	-39.334	1.00	1.00	H
ATOM	3157	C	TRP	H	36	4.406	11.617	-35.091	1.00	3.68	H
ATOM	3158	O	TRP	H	36	5.195	11.544	-34.152	1.00	4.93	H
ATOM	3159	N	VAL	H	37	4.429	10.803	-36.130	1.00	3.07	H
ATOM	3160	CA	VAL	H	37	5.465	9.794	-36.254	1.00	4.69	H
ATOM	3161	CB	VAL	H	37	4.895	8.340	-36.114	1.00	5.17	H
ATOM	3162	CG1	VAL	H	37	5.994	7.335	-36.345	1.00	4.96	H
ATOM	3163	CG2	VAL	H	37	4.315	8.126	-34.732	1.00	4.23	H
ATOM	3164	C	VAL	H	37	6.075	10.005	-37.645	1.00	4.66	H
ATOM	3165	O	VAL	H	37	5.371	10.340	-38.593	1.00	5.19	H
ATOM	3166	N	ARG	H	38	7.383	9.846	-37.776	1.00	5.35	H
ATOM	3167	CA	ARG	H	38	8.000	10.039	-39.082	1.00	5.57	H

10

20

30

40

ATOM	3168	CB	ARG	H	38	8.897	11.272	-39.068	1.00	7.67	H
ATOM	3169	CG	ARG	H	38	10.129	11.136	-38.196	1.00	6.25	H
ATOM	3170	CD	ARG	H	38	10.940	12.385	-38.305	1.00	6.36	H
ATOM	3171	NE	ARG	H	38	12.058	12.368	-37.388	1.00	9.42	H
ATOM	3172	CZ	ARG	H	38	12.969	13.319	-37.330	1.00	8.80	H
ATOM	3173	NH1	ARG	H	38	12.879	14.351	-38.151	1.00	9.68	H
ATOM	3174	NH2	ARG	H	38	13.947	13.249	-36.439	1.00	9.99	H
ATOM	3175	C	ARG	H	38	8.822	8.842	-39.497	1.00	4.93	H
ATOM	3176	O	ARG	H	38	9.135	7.964	-38.693	1.00	4.06	H
ATOM	3177	N	GLN	H	39	9.203	8.840	-40.759	1.00	5.54	H
ATOM	3178	CA	GLN	H	39	9.986	7.751	-41.295	1.00	7.45	H
ATOM	3179	CB	GLN	H	39	9.056	6.716	-41.914	1.00	6.58	H
ATOM	3180	CG	GLN	H	39	9.751	5.495	-42.440	1.00	6.23	H
ATOM	3181	CD	GLN	H	39	8.780	4.490	-42.991	1.00	7.57	H
ATOM	3182	OE1	GLN	H	39	8.002	4.790	-43.895	1.00	9.72	H
ATOM	3183	NE2	GLN	H	39	8.809	3.288	-42.446	1.00	7.92	H
ATOM	3184	C	GLN	H	39	10.949	8.280	-42.342	1.00	8.66	H
ATOM	3185	O	GLN	H	39	10.532	8.690	-43.433	1.00	9.98	H
ATOM	3186	N	ALA	H	40	12.237	8.275	-42.001	1.00	10.55	H
ATOM	3187	CA	ALA	H	40	13.281	8.761	-42.901	1.00	11.32	H
ATOM	3188	CB	ALA	H	40	14.598	8.882	-42.161	1.00	9.49	H
ATOM	3189	C	ALA	H	40	13.412	7.792	-44.062	1.00	12.45	H
ATOM	3190	O	ALA	H	40	13.185	6.595	-43.904	1.00	12.06	H
ATOM	3191	N	PRO	H	41	13.774	8.298	-45.250	1.00	14.18	H
ATOM	3192	CD	PRO	H	41	14.084	9.704	-45.562	1.00	13.94	H
ATOM	3193	CA	PRO	H	41	13.926	7.458	-46.440	1.00	14.90	H
ATOM	3194	CB	PRO	H	41	14.757	8.333	-47.364	1.00	13.64	H
ATOM	3195	CG	PRO	H	41	14.172	9.691	-47.081	1.00	13.81	H
ATOM	3196	C	PRO	H	41	14.565	6.108	-46.165	1.00	16.86	H
ATOM	3197	O	PRO	H	41	15.683	6.018	-45.644	1.00	16.32	H
ATOM	3198	N	GLY	H	42	13.830	5.053	-46.508	1.00	18.46	H
ATOM	3199	CA	GLY	H	42	14.317	3.699	-46.294	1.00	19.28	H
ATOM	3200	C	GLY	H	42	14.764	3.427	-44.863	1.00	20.26	H
ATOM	3201	O	GLY	H	42	15.795	2.798	-44.637	1.00	21.03	H
ATOM	3202	N	LYS	H	43	14.000	3.899	-43.884	1.00	20.62	H
ATOM	3203	CA	LYS	H	43	14.351	3.665	-42.487	1.00	19.70	H
ATOM	3204	CB	LYS	H	43	14.981	4.923	-41.890	1.00	20.93	H
ATOM	3205	CG	LYS	H	43	16.185	5.411	-42.686	1.00	22.44	H
ATOM	3206	CD	LYS	H	43	17.345	4.434	-42.632	1.00	23.53	H
ATOM	3207	CE	LYS	H	43	17.977	4.468	-41.247	1.00	27.18	H
ATOM	3208	NZ	LYS	H	43	19.111	3.504	-41.050	1.00	28.98	H
ATOM	3209	C	LYS	H	43	13.071	3.280	-41.758	1.00	17.81	H
ATOM	3210	O	LYS	H	43	11.991	3.297	-42.361	1.00	17.97	H
ATOM	3211	N	GLY	H	44	13.189	2.923	-40.483	1.00	15.15	H
ATOM	3212	CA	GLY	H	44	12.023	2.520	-39.718	1.00	13.55	H
ATOM	3213	C	GLY	H	44	11.220	3.666	-39.138	1.00	12.70	H
ATOM	3214	O	GLY	H	44	11.564	4.831	-39.331	1.00	13.60	H
ATOM	3215	N	LEU	H	45	10.150	3.342	-38.418	1.00	10.34	H
ATOM	3216	CA	LEU	H	45	9.312	4.371	-37.823	1.00	8.11	H
ATOM	3217	CB	LEU	H	45	8.006	3.765	-37.319	1.00	6.67	H
ATOM	3218	CG	LEU	H	45	7.016	3.285	-38.384	1.00	6.00	H
ATOM	3219	CD1	LEU	H	45	5.807	2.634	-37.700	1.00	6.82	H
ATOM	3220	CD2	LEU	H	45	6.567	4.447	-39.220	1.00	4.53	H
ATOM	3221	C	LEU	H	45	10.010	5.088	-36.680	1.00	8.20	H
ATOM	3222	O	LEU	H	45	10.840	4.514	-35.975	1.00	8.35	H
ATOM	3223	N	GLU	H	46	9.683	6.361	-36.516	1.00	6.89	H
ATOM	3224	CA	GLU	H	46	10.261	7.134	-35.440	1.00	5.45	H
ATOM	3225	CB	GLU	H	46	11.459	7.906	-35.946	1.00	6.53	H
ATOM	3226	CG	GLU	H	46	12.370	8.384	-34.853	1.00	8.96	H
ATOM	3227	CD	GLU	H	46	13.090	9.655	-35.223	1.00	11.41	H
ATOM	3228	OE1	GLU	H	46	13.534	9.759	-36.407	1.00	7.77	H

10

20

30

40

ATOM	3229	OE2	GLU	H	46	13.211	10.539	-34.320	1.00	13.45	H
ATOM	3230	C	GLU	H	46	9.241	8.109	-34.864	1.00	5.60	H
ATOM	3231	O	GLU	H	46	8.712	8.967	-35.575	1.00	6.68	H
ATOM	3232	N	TRP	H	47	8.978	7.981	-33.571	1.00	4.36	H
ATOM	3233	CA	TRP	H	47	8.028	8.841	-32.886	1.00	3.67	H
ATOM	3234	CB	TRP	H	47	7.788	8.320	-31.481	1.00	4.95	H
ATOM	3235	CG	TRP	H	47	6.989	9.246	-30.659	1.00	4.60	H
ATOM	3236	CD2	TRP	H	47	7.482	10.057	-29.587	1.00	4.44	H
ATOM	3237	CE2	TRP	H	47	6.387	10.818	-29.102	1.00	4.11	H
ATOM	3238	CE3	TRP	H	47	8.748	10.217	-28.989	1.00	2.69	H
ATOM	3239	CD1	TRP	H	47	5.649	9.529	-30.784	1.00	3.52	H
ATOM	3240	NE1	TRP	H	47	5.285	10.475	-29.846	1.00	5.11	H
ATOM	3241	CZ2	TRP	H	47	6.520	11.730	-28.042	1.00	1.81	H
ATOM	3242	CZ3	TRP	H	47	8.883	11.122	-27.938	1.00	1.00	H
ATOM	3243	CH2	TRP	H	47	7.770	11.869	-27.475	1.00	1.00	H
ATOM	3244	C	TRP	H	47	8.579	10.237	-32.816	1.00	2.64	H
ATOM	3245	O	TRP	H	47	9.745	10.425	-32.486	1.00	5.55	H
ATOM	3246	N	VAL	H	48	7.744	11.227	-33.084	1.00	2.44	H
ATOM	3247	CA	VAL	H	48	8.222	12.605	-33.075	1.00	1.81	H
ATOM	3248	CB	VAL	H	48	7.825	13.292	-34.408	1.00	1.31	H
ATOM	3249	CG1	VAL	H	48	8.401	14.689	-34.498	1.00	1.00	H
ATOM	3250	CG2	VAL	H	48	8.286	12.444	-35.562	1.00	1.00	H
ATOM	3251	C	VAL	H	48	7.708	13.413	-31.883	1.00	3.22	H
ATOM	3252	O	VAL	H	48	8.488	13.833	-31.032	1.00	2.46	H
ATOM	3253	N	ALA	H	49	6.398	13.621	-31.823	1.00	3.27	H
ATOM	3254	CA	ALA	H	49	5.802	14.384	-30.745	1.00	4.78	H
ATOM	3255	CB	ALA	H	49	5.819	15.866	-31.110	1.00	3.76	H
ATOM	3256	C	ALA	H	49	4.356	13.912	-30.505	1.00	5.83	H
ATOM	3257	O	ALA	H	49	3.700	13.365	-31.406	1.00	4.82	H
ATOM	3258	N	SER	H	50	3.874	14.135	-29.285	1.00	4.82	H
ATOM	3259	CA	SER	H	50	2.526	13.768	-28.922	1.00	4.97	H
ATOM	3260	CB	SER	H	50	2.516	12.512	-28.059	1.00	5.14	H
ATOM	3261	OG	SER	H	50	2.568	11.365	-28.878	1.00	6.92	H
ATOM	3262	C	SER	H	50	1.815	14.898	-28.220	1.00	5.98	H
ATOM	3263	O	SER	H	50	2.435	15.801	-27.670	1.00	5.57	H
ATOM	3264	N	LEU	H	51	0.495	14.816	-28.224	1.00	7.39	H
ATOM	3265	CA	LEU	H	51	-0.340	15.847	-27.652	1.00	8.22	H
ATOM	3266	CB	LEU	H	51	-0.651	16.828	-28.769	1.00	9.05	H
ATOM	3267	CG	LEU	H	51	-1.506	18.005	-28.376	1.00	10.34	H
ATOM	3268	CD1	LEU	H	51	-0.678	18.875	-27.452	1.00	11.80	H
ATOM	3269	CD2	LEU	H	51	-1.934	18.776	-29.592	1.00	10.62	H
ATOM	3270	C	LEU	H	51	-1.646	15.252	-27.116	1.00	9.09	H
ATOM	3271	O	LEU	H	51	-2.244	14.386	-27.757	1.00	11.36	H
ATOM	3272	N	SER	H	52	-2.112	15.730	-25.970	1.00	7.37	H
ATOM	3273	CA	SER	H	52	-3.364	15.220	-25.428	1.00	7.34	H
ATOM	3274	CB	SER	H	52	-3.453	15.487	-23.920	1.00	6.67	H
ATOM	3275	OG	SER	H	52	-3.234	16.851	-23.580	1.00	6.96	H
ATOM	3276	C	SER	H	52	-4.573	15.823	-26.142	1.00	8.92	H
ATOM	3277	O	SER	H	52	-4.423	16.691	-27.009	1.00	9.13	H
ATOM	3278	N	GLY	H	53	-5.769	15.369	-25.764	1.00	8.62	H
ATOM	3279	CA	GLY	H	53	-6.986	15.856	-26.388	1.00	6.90	H
ATOM	3280	C	GLY	H	53	-7.165	17.339	-26.198	1.00	5.00	H
ATOM	3281	O	GLY	H	53	-7.542	18.062	-27.120	1.00	4.67	H
ATOM	3282	N	SER	H	54	-6.900	17.800	-24.990	1.00	4.14	H
ATOM	3283	CA	SER	H	54	-7.025	19.224	-24.690	1.00	6.17	H
ATOM	3284	CB	SER	H	54	-7.028	19.434	-23.173	1.00	6.62	H
ATOM	3285	OG	SER	H	54	-5.841	18.929	-22.561	1.00	4.64	H
ATOM	3286	C	SER	H	54	-5.842	19.957	-25.320	1.00	7.53	H
ATOM	3287	O	SER	H	54	-5.965	21.101	-25.751	1.00	6.08	H
ATOM	3288	N	GLY	H	55	-4.697	19.277	-25.368	1.00	8.59	H
ATOM	3289	CA	GLY	H	55	-3.516	19.868	-25.956	1.00	9.92	H

10

20

30

40

ATOM	3290	C	GLY	H	55	-2.648	20.537	-24.916	1.00	10.79	H
ATOM	3291	O	GLY	H	55	-1.634	21.174	-25.232	1.00	8.31	H
ATOM	3292	N	THR	H	56	-3.050	20.398	-23.659	1.00	12.24	H
ATOM	3293	CA	THR	H	56	-2.303	20.999	-22.558	1.00	12.50	H
ATOM	3294	CB	THR	H	56	-3.195	21.164	-21.302	1.00	11.85	H
ATOM	3295	OG1	THR	H	56	-3.497	19.879	-20.739	1.00	11.11	H
ATOM	3296	CG2	THR	H	56	-4.483	21.866	-21.670	1.00	11.04	H
ATOM	3297	C	THR	H	56	-1.089	20.152	-22.191	1.00	11.96	H
ATOM	3298	O	THR	H	56	-0.203	20.601	-21.466	1.00	11.88	H
ATOM	3299	N	LYS	H	57	-1.052	18.924	-22.695	1.00	11.02	H
ATOM	3300	CA	LYS	H	57	0.062	18.047	-22.407	1.00	9.97	H
ATOM	3301	CB	LYS	H	57	-0.400	16.818	-21.626	1.00	8.17	H
ATOM	3302	CG	LYS	H	57	-1.011	17.145	-20.277	1.00	9.71	H
ATOM	3303	CD	LYS	H	57	-1.297	15.893	-19.467	1.00	10.00	H
ATOM	3304	CE	LYS	H	57	-2.760	15.785	-19.084	1.00	11.05	H
ATOM	3305	NZ	LYS	H	57	-3.188	16.841	-18.138	1.00	12.83	H
ATOM	3306	C	LYS	H	57	0.698	17.628	-23.707	1.00	9.96	H
ATOM	3307	O	LYS	H	57	0.085	16.933	-24.507	1.00	11.40	H
ATOM	3308	N	THR	H	58	1.930	18.069	-23.929	1.00	9.40	H
ATOM	3309	CA	THR	H	58	2.626	17.714	-25.154	1.00	8.99	H
ATOM	3310	CB	THR	H	58	2.922	18.939	-26.023	1.00	8.49	H
ATOM	3311	OG1	THR	H	58	4.147	19.530	-25.596	1.00	9.58	H
ATOM	3312	CG2	THR	H	58	1.826	19.960	-25.889	1.00	6.38	H
ATOM	3313	C	THR	H	58	3.938	17.060	-24.777	1.00	9.30	H
ATOM	3314	O	THR	H	58	4.415	17.236	-23.663	1.00	8.22	H
ATOM	3315	N	HIS	H	59	4.508	16.305	-25.717	1.00	9.24	H
ATOM	3316	CA	HIS	H	59	5.769	15.595	-25.519	1.00	8.03	H
ATOM	3317	CB	HIS	H	59	5.499	14.189	-24.981	1.00	11.10	H
ATOM	3318	CG	HIS	H	59	5.068	14.158	-23.547	1.00	14.76	H
ATOM	3319	CD2	HIS	H	59	3.838	14.042	-22.991	1.00	16.75	H
ATOM	3320	ND1	HIS	H	59	5.960	14.219	-22.500	1.00	15.55	H
ATOM	3321	CE1	HIS	H	59	5.300	14.135	-21.355	1.00	16.99	H
ATOM	3322	NE2	HIS	H	59	4.012	14.026	-21.626	1.00	16.44	H
ATOM	3323	C	HIS	H	59	6.534	15.505	-26.841	1.00	6.73	H
ATOM	3324	O	HIS	H	59	5.947	15.238	-27.892	1.00	4.86	H
ATOM	3325	N	PHE	H	60	7.844	15.735	-26.776	1.00	6.24	H
ATOM	3326	CA	PHE	H	60	8.691	15.707	-27.963	1.00	6.73	H
ATOM	3327	CB	PHE	H	60	9.258	17.098	-28.259	1.00	6.25	H
ATOM	3328	CG	PHE	H	60	8.223	18.165	-28.368	1.00	8.88	H
ATOM	3329	CD1	PHE	H	60	7.732	18.795	-27.226	1.00	10.51	H
ATOM	3330	CD2	PHE	H	60	7.700	18.516	-29.604	1.00	10.03	H
ATOM	3331	CE1	PHE	H	60	6.724	19.760	-27.311	1.00	9.17	H
ATOM	3332	CE2	PHE	H	60	6.697	19.474	-29.701	1.00	10.91	H
ATOM	3333	CZ	PHE	H	60	6.207	20.099	-28.543	1.00	11.27	H
ATOM	3334	C	PHE	H	60	9.851	14.743	-27.810	1.00	6.57	H
ATOM	3335	O	PHE	H	60	10.119	14.263	-26.720	1.00	6.46	H
ATOM	3336	N	ALA	H	61	10.524	14.469	-28.922	1.00	8.14	H
ATOM	3337	CA	ALA	H	61	11.684	13.589	-28.956	1.00	10.25	H
ATOM	3338	CB	ALA	H	61	11.711	12.818	-30.262	1.00	9.23	H
ATOM	3339	C	ALA	H	61	12.891	14.521	-28.863	1.00	11.89	H
ATOM	3340	O	ALA	H	61	12.857	15.623	-29.413	1.00	13.75	H
ATOM	3341	N	ASP	H	62	13.953	14.094	-28.188	1.00	13.51	H
ATOM	3342	CA	ASP	H	62	15.124	14.953	-28.047	1.00	15.64	H
ATOM	3343	CB	ASP	H	62	16.236	14.230	-27.277	1.00	18.66	H
ATOM	3344	CG	ASP	H	62	16.077	14.365	-25.771	1.00	23.55	H
ATOM	3345	OD1	ASP	H	62	16.797	13.650	-25.022	1.00	26.30	H
ATOM	3346	OD2	ASP	H	62	15.234	15.197	-25.333	1.00	25.44	H
ATOM	3347	C	ASP	H	62	15.657	15.493	-29.364	1.00	14.78	H
ATOM	3348	O	ASP	H	62	15.992	16.672	-29.464	1.00	16.08	H
ATOM	3349	N	SER	H	63	15.706	14.648	-30.379	1.00	13.12	H
ATOM	3350	CA	SER	H	63	16.222	15.072	-31.667	1.00	13.50	H

10

20

30

40

ATOM	3351	CB	SER	H	63	16.283	13.885	-32.615	1.00	14.56	H
ATOM	3352	OG	SER	H	63	14.980	13.365	-32.822	1.00	18.30	H
ATOM	3353	C	SER	H	63	15.397	16.165	-32.326	1.00	13.14	H
ATOM	3354	O	SER	H	63	15.734	16.635	-33.411	1.00	12.97	H
ATOM	3355	N	VAL	H	64	14.325	16.594	-31.686	1.00	12.76	H
ATOM	3356	CA	VAL	H	64	13.498	17.595	-32.324	1.00	13.21	H
ATOM	3357	CB	VAL	H	64	12.316	16.857	-33.044	1.00	12.72	H
ATOM	3358	CG1	VAL	H	64	10.991	17.103	-32.335	1.00	13.63	H
ATOM	3359	CG2	VAL	H	64	12.269	17.237	-34.479	1.00	10.90	H
ATOM	3360	C	VAL	H	64	13.021	18.673	-31.340	1.00	13.76	H
ATOM	3361	O	VAL	H	64	12.543	19.749	-31.732	1.00	11.87	H
ATOM	3362	N	LYS	H	65	13.172	18.384	-30.052	1.00	16.05	H
ATOM	3363	CA	LYS	H	65	12.772	19.323	-29.013	1.00	17.75	H
ATOM	3364	CB	LYS	H	65	13.103	18.787	-27.617	1.00	20.48	H
ATOM	3365	CG	LYS	H	65	12.768	19.806	-26.531	1.00	24.24	H
ATOM	3366	CD	LYS	H	65	12.539	19.177	-25.177	1.00	26.75	H
ATOM	3367	CE	LYS	H	65	12.065	20.228	-24.186	1.00	29.20	H
ATOM	3368	NZ	LYS	H	65	11.806	19.649	-22.835	1.00	30.30	H
ATOM	3369	C	LYS	H	65	13.467	20.654	-29.196	1.00	16.93	H
ATOM	3370	O	LYS	H	65	14.672	20.707	-29.452	1.00	17.42	H
ATOM	3371	N	GLY	H	66	12.701	21.725	-29.040	1.00	15.98	H
ATOM	3372	CA	GLY	H	66	13.255	23.047	-29.210	1.00	15.03	H
ATOM	3373	C	GLY	H	66	13.106	23.481	-30.652	1.00	15.31	H
ATOM	3374	O	GLY	H	66	13.118	24.669	-30.945	1.00	17.76	H
ATOM	3375	N	ARG	H	67	12.972	22.540	-31.574	1.00	12.33	H
ATOM	3376	CA	ARG	H	67	12.823	22.955	-32.950	1.00	11.57	H
ATOM	3377	CB	ARG	H	67	13.784	22.198	-33.856	1.00	11.70	H
ATOM	3378	CG	ARG	H	67	15.254	22.497	-33.600	1.00	9.21	H
ATOM	3379	CD	ARG	H	67	16.113	21.818	-34.641	1.00	6.92	H
ATOM	3380	NE	ARG	H	67	15.869	20.379	-34.681	1.00	6.37	H
ATOM	3381	CZ	ARG	H	67	15.526	19.713	-35.778	1.00	7.25	H
ATOM	3382	NH1	ARG	H	67	15.386	20.350	-36.934	1.00	9.14	H
ATOM	3383	NH2	ARG	H	67	15.300	18.413	-35.719	1.00	6.47	H
ATOM	3384	C	ARG	H	67	11.402	22.732	-33.415	1.00	12.38	H
ATOM	3385	O	ARG	H	67	10.849	23.543	-34.143	1.00	13.55	H
ATOM	3386	N	PHE	H	68	10.804	21.632	-32.983	1.00	12.18	H
ATOM	3387	CA	PHE	H	68	9.448	21.319	-33.381	1.00	11.31	H
ATOM	3388	CB	PHE	H	68	9.351	19.850	-33.769	1.00	11.86	H
ATOM	3389	CG	PHE	H	68	9.971	19.516	-35.099	1.00	12.06	H
ATOM	3390	CD1	PHE	H	68	10.973	20.313	-35.653	1.00	11.71	H
ATOM	3391	CD2	PHE	H	68	9.583	18.351	-35.776	1.00	11.05	H
ATOM	3392	CE1	PHE	H	68	11.584	19.953	-36.859	1.00	11.42	H
ATOM	3393	CE2	PHE	H	68	10.186	17.981	-36.980	1.00	9.57	H
ATOM	3394	CZ	PHE	H	68	11.188	18.779	-37.527	1.00	9.82	H
ATOM	3395	C	PHE	H	68	8.436	21.611	-32.291	1.00	12.02	H
ATOM	3396	O	PHE	H	68	8.684	21.376	-31.110	1.00	12.67	H
ATOM	3397	N	THR	H	69	7.283	22.127	-32.693	1.00	11.69	H
ATOM	3398	CA	THR	H	69	6.233	22.416	-31.735	1.00	10.64	H
ATOM	3399	CB	THR	H	69	6.103	23.948	-31.456	1.00	10.59	H
ATOM	3400	OG1	THR	H	69	4.719	24.297	-31.351	1.00	14.40	H
ATOM	3401	CG2	THR	H	69	6.737	24.771	-32.569	1.00	11.79	H
ATOM	3402	C	THR	H	69	4.910	21.841	-32.244	1.00	9.62	H
ATOM	3403	O	THR	H	69	4.450	22.170	-33.337	1.00	9.39	H
ATOM	3404	N	ILE	H	70	4.316	20.962	-31.440	1.00	7.95	H
ATOM	3405	CA	ILE	H	70	3.044	20.325	-31.773	1.00	6.64	H
ATOM	3406	CB	ILE	H	70	2.937	18.914	-31.124	1.00	5.97	H
ATOM	3407	CG2	ILE	H	70	2.930	19.046	-29.621	1.00	3.75	H
ATOM	3408	CG1	ILE	H	70	1.667	18.200	-31.605	1.00	5.93	H
ATOM	3409	CD1	ILE	H	70	1.677	16.710	-31.399	1.00	5.04	H
ATOM	3410	C	ILE	H	70	1.897	21.189	-31.254	1.00	5.92	H
ATOM	3411	O	ILE	H	70	2.041	21.831	-30.219	1.00	7.78	H

10

20

30

40

ATOM	3412	N	SER	H	71	0.775	21.205	-31.970	1.00	4.08	H	
ATOM	3413	CA	SER	H	71	-0.408	21.972	-31.570	1.00	3.29	H	
ATOM	3414	CB	SER	H	71	-0.267	23.449	-31.943	1.00	1.76	H	
ATOM	3415	OG	SER	H	71	0.300	23.593	-33.232	1.00	5.75	H	
ATOM	3416	C	SER	H	71	-1.645	21.384	-32.230	1.00	2.94	H	
ATOM	3417	O	SER	H	71	-1.545	20.614	-33.185	1.00	1.59	H	
ATOM	3418	N	ARG	H	72	-2.812	21.764	-31.728	1.00	3.54	H	
ATOM	3419	CA	ARG	H	72	-4.081	21.231	-32.216	1.00	4.48	H	
ATOM	3420	CB	ARG	H	72	-4.441	20.016	-31.343	1.00	4.63	H	
ATOM	3421	CG	ARG	H	72	-5.849	19.970	-30.810	1.00	5.35	H	
ATOM	3422	CD	ARG	H	72	-5.940	19.277	-29.466	1.00	4.98	H	
ATOM	3423	NE	ARG	H	72	-5.546	17.865	-29.437	1.00	6.58	H	10
ATOM	3424	CZ	ARG	H	72	-6.289	16.841	-29.867	1.00	7.67	H	
ATOM	3425	NH1	ARG	H	72	-7.484	17.035	-30.386	1.00	7.98	H	
ATOM	3426	NH2	ARG	H	72	-5.854	15.598	-29.742	1.00	9.34	H	
ATOM	3427	C	ARG	H	72	-5.167	22.289	-32.161	1.00	5.09	H	
ATOM	3428	O	ARG	H	72	-5.086	23.194	-31.351	1.00	5.98	H	
ATOM	3429	N	ASP	H	73	-6.164	22.196	-33.036	1.00	7.54	H	
ATOM	3430	CA	ASP	H	73	-7.261	23.166	-33.032	1.00	10.50	H	
ATOM	3431	CB	ASP	H	73	-7.214	24.030	-34.297	1.00	12.67	H	
ATOM	3432	CG	ASP	H	73	-8.309	25.111	-34.327	1.00	13.54	H	
ATOM	3433	OD1	ASP	H	73	-9.429	24.831	-33.863	1.00	12.69	H	
ATOM	3434	OD2	ASP	H	73	-8.049	26.231	-34.832	1.00	14.66	H	
ATOM	3435	C	ASP	H	73	-8.613	22.447	-32.957	1.00	11.07	H	
ATOM	3436	O	ASP	H	73	-9.191	22.093	-33.983	1.00	11.19	H	
ATOM	3437	N	ASN	H	74	-9.122	22.262	-31.748	1.00	11.92	H	20
ATOM	3438	CA	ASN	H	74	-10.390	21.589	-31.565	1.00	13.93	H	
ATOM	3439	CB	ASN	H	74	-10.538	21.139	-30.115	1.00	13.39	H	
ATOM	3440	CG	ASN	H	74	-9.502	20.112	-29.727	1.00	15.07	H	
ATOM	3441	OD1	ASN	H	74	-9.020	19.368	-30.581	1.00	15.70	H	
ATOM	3442	ND2	ASN	H	74	-9.163	20.045	-28.444	1.00	14.48	H	
ATOM	3443	C	ASN	H	74	-11.579	22.456	-31.962	1.00	16.05	H	
ATOM	3444	O	ASN	H	74	-12.340	22.924	-31.116	1.00	18.94	H	
ATOM	3445	N	SER	H	75	-11.727	22.683	-33.257	1.00	16.45	H	
ATOM	3446	CA	SER	H	75	-12.820	23.484	-33.786	1.00	16.17	H	
ATOM	3447	CB	SER	H	75	-12.491	24.974	-33.745	1.00	17.32	H	
ATOM	3448	OG	SER	H	75	-11.878	25.333	-32.521	1.00	20.43	H	
ATOM	3449	C	SER	H	75	-12.884	23.070	-35.223	1.00	17.41	H	
ATOM	3450	O	SER	H	75	-13.954	22.830	-35.774	1.00	19.91	H	30
ATOM	3451	N	ASN	H	76	-11.703	22.992	-35.825	1.00	16.64	H	
ATOM	3452	CA	ASN	H	76	-11.568	22.611	-37.217	1.00	15.45	H	
ATOM	3453	CB	ASN	H	76	-10.637	23.590	-37.947	1.00	17.04	H	
ATOM	3454	CG	ASN	H	76	-9.302	23.775	-37.232	1.00	20.41	H	
ATOM	3455	OD1	ASN	H	76	-8.938	23.003	-36.336	1.00	21.95	H	
ATOM	3456	ND2	ASN	H	76	-8.558	24.796	-37.636	1.00	21.39	H	
ATOM	3457	C	ASN	H	76	-11.019	21.196	-37.340	1.00	13.63	H	
ATOM	3458	O	ASN	H	76	-10.672	20.771	-38.436	1.00	11.77	H	
ATOM	3459	N	ASN	H	77	-10.934	20.479	-36.222	1.00	11.14	H	
ATOM	3460	CA	ASN	H	77	-10.419	19.112	-36.239	1.00	11.22	H	
ATOM	3461	CB	ASN	H	77	-11.383	18.193	-36.977	1.00	12.73	H	
ATOM	3462	CG	ASN	H	77	-12.674	17.980	-36.224	1.00	16.20	H	
ATOM	3463	OD1	ASN	H	77	-13.517	17.176	-36.630	1.00	17.08	H	
ATOM	3464	ND2	ASN	H	77	-12.840	18.702	-35.109	1.00	18.52	H	40
ATOM	3465	C	ASN	H	77	-9.064	19.001	-36.919	1.00	11.03	H	
ATOM	3466	O	ASN	H	77	-8.846	18.114	-37.748	1.00	10.80	H	
ATOM	3467	N	THR	H	78	-8.157	19.900	-36.565	1.00	8.71	H	
ATOM	3468	CA	THR	H	78	-6.852	19.919	-37.178	1.00	7.47	H	
ATOM	3469	CB	THR	H	78	-6.651	21.223	-37.953	1.00	9.54	H	
ATOM	3470	OG1	THR	H	78	-7.779	21.447	-38.801	1.00	11.42	H	
ATOM	3471	CG2	THR	H	78	-5.401	21.149	-38.813	1.00	9.06	H	
ATOM	3472	C	THR	H	78	-5.704	19.757	-36.208	1.00	7.12	H	

ATOM	3473	O	THR	H	78	-5.692	20.332	-35.119	1.00	4.88	H
ATOM	3474	N	LEU	H	79	-4.728	18.959	-36.626	1.00	6.47	H
ATOM	3475	CA	LEU	H	79	-3.548	18.700	-35.823	1.00	6.13	H
ATOM	3476	CB	LEU	H	79	-3.339	17.188	-35.672	1.00	3.73	H
ATOM	3477	CG	LEU	H	79	-2.217	16.691	-34.754	1.00	2.93	H
ATOM	3478	CD1	LEU	H	79	-0.978	16.427	-35.533	1.00	1.00	H
ATOM	3479	CD2	LEU	H	79	-1.970	17.684	-33.647	1.00	2.62	H
ATOM	3480	C	LEU	H	79	-2.385	19.345	-36.562	1.00	6.55	H
ATOM	3481	O	LEU	H	79	-2.199	19.119	-37.743	1.00	6.69	H
ATOM	3482	N	TYR	H	80	-1.621	20.167	-35.863	1.00	6.40	H
ATOM	3483	CA	TYR	H	80	-0.495	20.836	-36.469	1.00	7.17	H
ATOM	3484	CB	TYR	H	80	-0.607	22.341	-36.206	1.00	6.40	H
ATOM	3485	CG	TYR	H	80	-1.840	22.956	-36.818	1.00	7.53	H
ATOM	3486	CD1	TYR	H	80	-1.955	23.089	-38.195	1.00	7.52	H
ATOM	3487	CE1	TYR	H	80	-3.110	23.592	-38.784	1.00	7.14	H
ATOM	3488	CD2	TYR	H	80	-2.920	23.351	-36.028	1.00	7.68	H
ATOM	3489	CE2	TYR	H	80	-4.083	23.855	-36.607	1.00	8.61	H
ATOM	3490	CZ	TYR	H	80	-4.169	23.970	-37.994	1.00	8.93	H
ATOM	3491	OH	TYR	H	80	-5.332	24.446	-38.576	1.00	10.76	H
ATOM	3492	C	TYR	H	80	0.859	20.317	-35.945	1.00	9.01	H
ATOM	3493	O	TYR	H	80	0.945	19.633	-34.909	1.00	7.86	H
ATOM	3494	N	LEU	H	81	1.906	20.667	-36.691	1.00	9.72	H
ATOM	3495	CA	LEU	H	81	3.289	20.356	-36.370	1.00	9.06	H
ATOM	3496	CB	LEU	H	81	3.706	18.993	-36.914	1.00	8.70	H
ATOM	3497	CG	LEU	H	81	5.192	18.669	-36.656	1.00	7.92	H
ATOM	3498	CD1	LEU	H	81	5.449	18.645	-35.145	1.00	7.49	H
ATOM	3499	CD2	LEU	H	81	5.574	17.343	-37.284	1.00	3.90	H
ATOM	3500	C	LEU	H	81	4.127	21.444	-37.021	1.00	10.37	H
ATOM	3501	O	LEU	H	81	4.178	21.552	-38.256	1.00	9.62	H
ATOM	3502	N	GLN	H	82	4.756	22.259	-36.172	1.00	11.89	H
ATOM	3503	CA	GLN	H	82	5.627	23.362	-36.590	1.00	12.40	H
ATOM	3504	CB	GLN	H	82	5.477	24.554	-35.643	1.00	11.73	H
ATOM	3505	CG	GLN	H	82	6.116	25.822	-36.160	1.00	13.56	H
ATOM	3506	CD	GLN	H	82	5.432	26.305	-37.406	1.00	13.55	H
ATOM	3507	OE1	GLN	H	82	4.204	26.380	-37.451	1.00	13.14	H
ATOM	3508	NE2	GLN	H	82	6.214	26.645	-38.426	1.00	12.96	H
ATOM	3509	C	GLN	H	82	7.081	22.901	-36.562	1.00	12.65	H
ATOM	3510	O	GLN	H	82	7.633	22.606	-35.497	1.00	11.89	H
ATOM	3511	N	MET	H	83	7.685	22.850	-37.742	1.00	13.04	H
ATOM	3512	CA	MET	H	83	9.072	22.442	-37.893	1.00	13.26	H
ATOM	3513	CB	MET	H	83	9.203	21.476	-39.076	1.00	13.61	H
ATOM	3514	CG	MET	H	83	8.251	20.267	-39.014	1.00	13.89	H
ATOM	3515	SD	MET	H	83	8.630	18.987	-40.303	1.00	10.43	H
ATOM	3516	CE	MET	H	83	7.431	19.442	-41.574	1.00	10.13	H
ATOM	3517	C	MET	H	83	9.944	23.664	-38.135	1.00	12.74	H
ATOM	3518	O	MET	H	83	9.885	24.244	-39.221	1.00	12.35	H
ATOM	3519	N	ASP	H	84	10.726	24.064	-37.129	1.00	12.16	H
ATOM	3520	CA	ASP	H	84	11.614	25.219	-37.276	1.00	13.74	H
ATOM	3521	CB	ASP	H	84	11.416	26.247	-36.155	1.00	15.64	H
ATOM	3522	CG	ASP	H	84	9.972	26.738	-36.035	1.00	19.86	H
ATOM	3523	OD1	ASP	H	84	9.331	27.059	-37.079	1.00	19.64	H
ATOM	3524	OD2	ASP	H	84	9.480	26.817	-34.875	1.00	22.08	H
ATOM	3525	C	ASP	H	84	13.066	24.762	-37.284	1.00	14.11	H
ATOM	3526	O	ASP	H	84	13.414	23.741	-36.691	1.00	13.48	H
ATOM	3527	N	ASN	H	85	13.907	25.541	-37.956	1.00	14.96	H
ATOM	3528	CA	ASN	H	85	15.328	25.250	-38.101	1.00	14.80	H
ATOM	3529	CB	ASN	H	85	16.078	25.539	-36.798	1.00	16.03	H
ATOM	3530	CG	ASN	H	85	17.589	25.441	-36.957	1.00	17.56	H
ATOM	3531	OD1	ASN	H	85	18.199	26.153	-37.758	1.00	20.22	H
ATOM	3532	ND2	ASN	H	85	18.199	24.552	-36.196	1.00	20.29	H
ATOM	3533	C	ASN	H	85	15.508	23.795	-38.510	1.00	14.22	H

10

20

30

40

ATOM	3534	O	ASN	H	85	16.154	23.012	-37.800	1.00	15.62	H
ATOM	3535	N	VAL	H	86	14.941	23.442	-39.666	1.00	12.38	H
ATOM	3536	CA	VAL	H	86	15.013	22.073	-40.172	1.00	10.44	H
ATOM	3537	CB	VAL	H	86	14.026	21.831	-41.351	1.00	8.45	H
ATOM	3538	CG1	VAL	H	86	12.606	22.045	-40.891	1.00	3.18	H
ATOM	3539	CG2	VAL	H	86	14.357	22.741	-42.521	1.00	8.04	H
ATOM	3540	C	VAL	H	86	16.388	21.635	-40.632	1.00	10.36	H
ATOM	3541	O	VAL	H	86	17.037	22.310	-41.426	1.00	10.28	H
ATOM	3542	N	ARG	H	87	16.819	20.493	-40.116	1.00	11.49	H
ATOM	3543	CA	ARG	H	87	18.094	19.917	-40.487	1.00	13.66	H
ATOM	3544	CB	ARG	H	87	18.714	19.147	-39.319	1.00	14.95	H
ATOM	3545	CG	ARG	H	87	18.626	19.789	-37.937	1.00	17.51	H
ATOM	3546	CD	ARG	H	87	19.444	18.934	-36.976	1.00	19.96	H
ATOM	3547	NE	ARG	H	87	19.129	19.055	-35.552	1.00	22.00	H
ATOM	3548	CZ	ARG	H	87	19.207	20.173	-34.840	1.00	24.13	H
ATOM	3549	NH1	ARG	H	87	19.579	21.315	-35.415	1.00	26.64	H
ATOM	3550	NH2	ARG	H	87	18.951	20.135	-33.537	1.00	23.82	H
ATOM	3551	C	ARG	H	87	17.815	18.929	-41.619	1.00	15.16	H
ATOM	3552	O	ARG	H	87	16.659	18.641	-41.938	1.00	15.01	H
ATOM	3553	N	ASP	H	88	18.881	18.392	-42.201	1.00	17.98	H
ATOM	3554	CA	ASP	H	88	18.781	17.421	-43.289	1.00	20.08	H
ATOM	3555	CB	ASP	H	88	20.197	17.139	-43.812	1.00	23.69	H
ATOM	3556	CG	ASP	H	88	21.061	18.413	-43.875	1.00	29.04	H
ATOM	3557	OD1	ASP	H	88	20.911	19.212	-44.842	1.00	30.25	H
ATOM	3558	OD2	ASP	H	88	21.887	18.620	-42.944	1.00	31.49	H
ATOM	3559	C	ASP	H	88	18.110	16.141	-42.770	1.00	19.34	H
ATOM	3560	O	ASP	H	88	17.316	15.507	-43.471	1.00	17.14	H
ATOM	3561	N	GLU	H	89	18.435	15.802	-41.524	1.00	20.05	H
ATOM	3562	CA	GLU	H	89	17.928	14.626	-40.835	1.00	20.41	H
ATOM	3563	CB	GLU	H	89	18.623	14.491	-39.484	1.00	23.61	H
ATOM	3564	CG	GLU	H	89	20.141	14.591	-39.567	1.00	30.26	H
ATOM	3565	CD	GLU	H	89	20.637	16.031	-39.604	1.00	33.35	H
ATOM	3566	OE1	GLU	H	89	20.360	16.764	-38.625	1.00	36.26	H
ATOM	3567	OE2	GLU	H	89	21.304	16.423	-40.595	1.00	34.20	H
ATOM	3568	C	GLU	H	89	16.415	14.647	-40.636	1.00	18.53	H
ATOM	3569	O	GLU	H	89	15.821	13.677	-40.171	1.00	18.64	H
ATOM	3570	N	ASP	H	90	15.783	15.757	-40.968	1.00	16.04	H
ATOM	3571	CA	ASP	H	90	14.350	15.813	-40.832	1.00	13.47	H
ATOM	3572	CB	ASP	H	90	13.901	17.237	-40.509	1.00	13.36	H
ATOM	3573	CG	ASP	H	90	14.319	17.678	-39.111	1.00	13.47	H
ATOM	3574	OD1	ASP	H	90	14.207	16.875	-38.153	1.00	12.70	H
ATOM	3575	OD2	ASP	H	90	14.747	18.841	-38.960	1.00	13.27	H
ATOM	3576	C	ASP	H	90	13.639	15.296	-42.083	1.00	11.74	H
ATOM	3577	O	ASP	H	90	12.421	15.162	-42.082	1.00	11.55	H
ATOM	3578	N	THR	H	91	14.379	15.000	-43.150	1.00	10.83	H
ATOM	3579	CA	THR	H	91	13.739	14.477	-44.359	1.00	9.48	H
ATOM	3580	CB	THR	H	91	14.758	14.316	-45.534	1.00	7.81	H
ATOM	3581	OG1	THR	H	91	15.200	15.615	-45.947	1.00	7.57	H
ATOM	3582	CG2	THR	H	91	14.111	13.659	-46.748	1.00	6.29	H
ATOM	3583	C	THR	H	91	13.084	13.138	-44.019	1.00	8.73	H
ATOM	3584	O	THR	H	91	13.738	12.204	-43.531	1.00	8.19	H
ATOM	3585	N	ALA	H	92	11.776	13.068	-44.241	1.00	8.36	H
ATOM	3586	CA	ALA	H	92	11.017	11.852	-43.951	1.00	8.03	H
ATOM	3587	CB	ALA	H	92	11.149	11.491	-42.471	1.00	6.60	H
ATOM	3588	C	ALA	H	92	9.548	12.009	-44.290	1.00	6.21	H
ATOM	3589	O	ALA	H	92	9.092	13.092	-44.669	1.00	3.46	H
ATOM	3590	N	ILE	H	93	8.823	10.905	-44.157	1.00	6.09	H
ATOM	3591	CA	ILE	H	93	7.399	10.905	-44.390	1.00	6.84	H
ATOM	3592	CB	ILE	H	93	6.920	9.571	-44.932	1.00	6.37	H
ATOM	3593	CG2	ILE	H	93	5.416	9.615	-45.139	1.00	6.16	H
ATOM	3594	CG1	ILE	H	93	7.606	9.289	-46.259	1.00	7.33	H

10

20

30

40

ATOM	3595	CD1	ILE	H	93	7.328	7.897	-46.781	1.00	8.98	H
ATOM	3596	C	ILE	H	93	6.796	11.126	-43.023	1.00	6.45	H
ATOM	3597	O	ILE	H	93	6.982	10.309	-42.134	1.00	7.71	H
ATOM	3598	N	TYR	H	94	6.127	12.254	-42.828	1.00	7.32	H
ATOM	3599	CA	TYR	H	94	5.536	12.521	-41.527	1.00	8.20	H
ATOM	3600	CB	TYR	H	94	5.547	14.022	-41.207	1.00	7.72	H
ATOM	3601	CG	TYR	H	94	6.930	14.526	-40.868	1.00	6.95	H
ATOM	3602	CD1	TYR	H	94	7.942	14.513	-41.825	1.00	6.29	H
ATOM	3603	CE1	TYR	H	94	9.235	14.867	-41.513	1.00	6.51	H
ATOM	3604	CD2	TYR	H	94	7.252	14.927	-39.569	1.00	7.60	H
ATOM	3605	CE2	TYR	H	94	8.552	15.290	-39.241	1.00	8.06	H
ATOM	3606	CZ	TYR	H	94	9.544	15.250	-40.232	1.00	7.37	H
ATOM	3607	OH	TYR	H	94	10.844	15.565	-39.926	1.00	7.51	H
ATOM	3608	C	TYR	H	94	4.128	11.974	-41.467	1.00	8.37	H
ATOM	3609	O	TYR	H	94	3.231	12.385	-42.217	1.00	8.36	H
ATOM	3610	N	TYR	H	95	3.950	11.015	-40.572	1.00	7.89	H
ATOM	3611	CA	TYR	H	95	2.658	10.387	-40.373	1.00	7.44	H
ATOM	3612	CB	TYR	H	95	2.824	8.887	-40.112	1.00	7.20	H
ATOM	3613	CG	TYR	H	95	3.349	8.085	-41.279	1.00	6.80	H
ATOM	3614	CD1	TYR	H	95	2.508	7.660	-42.295	1.00	6.39	H
ATOM	3615	CE1	TYR	H	95	2.994	6.925	-43.365	1.00	8.93	H
ATOM	3616	CD2	TYR	H	95	4.689	7.757	-41.360	1.00	6.07	H
ATOM	3617	CE2	TYR	H	95	5.186	7.027	-42.419	1.00	8.64	H
ATOM	3618	CZ	TYR	H	95	4.336	6.608	-43.425	1.00	10.04	H
ATOM	3619	OH	TYR	H	95	4.834	5.866	-44.482	1.00	13.38	H
ATOM	3620	C	TYR	H	95	1.888	10.998	-39.209	1.00	6.27	H
ATOM	3621	O	TYR	H	95	2.431	11.316	-38.153	1.00	4.94	H
ATOM	3622	N	CYS	H	96	0.593	11.129	-39.431	1.00	8.19	H
ATOM	3623	CA	CYS	H	96	-0.370	11.655	-38.470	1.00	7.75	H
ATOM	3624	C	CYS	H	96	-1.075	10.462	-37.805	1.00	6.55	H
ATOM	3625	O	CYS	H	96	-1.678	9.647	-38.505	1.00	6.33	H
ATOM	3626	CB	CYS	H	96	-1.396	12.450	-39.250	1.00	8.73	H
ATOM	3627	SG	CYS	H	96	-2.753	13.021	-38.248	1.00	18.02	H
ATOM	3628	N	ALA	H	97	-1.024	10.343	-36.482	1.00	5.62	H
ATOM	3629	CA	ALA	H	97	-1.708	9.217	-35.842	1.00	6.65	H
ATOM	3630	CB	ALA	H	97	-0.705	8.135	-35.433	1.00	4.88	H
ATOM	3631	C	ALA	H	97	-2.591	9.600	-34.652	1.00	7.14	H
ATOM	3632	O	ALA	H	97	-2.270	10.525	-33.889	1.00	6.80	H
ATOM	3633	N	LYS	H	98	-3.706	8.876	-34.504	1.00	7.33	H
ATOM	3634	CA	LYS	H	98	-4.695	9.107	-33.435	1.00	6.92	H
ATOM	3635	CB	LYS	H	98	-6.118	9.141	-34.047	1.00	7.96	H
ATOM	3636	CG	LYS	H	98	-7.243	8.683	-33.099	1.00	8.65	H
ATOM	3637	CD	LYS	H	98	-8.577	8.713	-33.793	1.00	7.93	H
ATOM	3638	CE	LYS	H	98	-9.632	8.044	-32.957	1.00	8.38	H
ATOM	3639	NZ	LYS	H	98	-9.289	6.614	-32.781	1.00	11.17	H
ATOM	3640	C	LYS	H	98	-4.631	8.081	-32.291	1.00	5.55	H
ATOM	3641	O	LYS	H	98	-4.677	6.876	-32.522	1.00	4.02	H
ATOM	3642	N	ALA	H	99	-4.526	8.582	-31.063	1.00	5.94	H
ATOM	3643	CA	ALA	H	99	-4.466	7.744	-29.870	1.00	6.05	H
ATOM	3644	CB	ALA	H	99	-3.893	8.530	-28.713	1.00	5.32	H
ATOM	3645	C	ALA	H	99	-5.851	7.215	-29.498	1.00	6.38	H
ATOM	3646	O	ALA	H	99	-6.880	7.829	-29.806	1.00	6.74	H
ATOM	3647	N	LYS	H	100	-5.863	6.073	-28.823	1.00	6.25	H
ATOM	3648	CA	LYS	H	100	-7.109	5.446	-28.432	1.00	6.98	H
ATOM	3649	CB	LYS	H	100	-6.862	4.012	-27.966	1.00	7.85	H
ATOM	3650	CG	LYS	H	100	-8.137	3.260	-27.666	1.00	8.20	H
ATOM	3651	CD	LYS	H	100	-7.854	1.843	-27.230	1.00	10.16	H
ATOM	3652	CE	LYS	H	100	-7.573	0.930	-28.401	1.00	11.45	H
ATOM	3653	NZ	LYS	H	100	-8.683	0.917	-29.389	1.00	10.69	H
ATOM	3654	C	LYS	H	100	-7.833	6.209	-27.337	1.00	7.43	H
ATOM	3655	O	LYS	H	100	-9.067	6.222	-27.292	1.00	7.57	H

10

20

30

40

ATOM	3656	N	ARG	H	101	-7.068	6.848	-26.455	1.00	6.66	H
ATOM	3657	CA	ARG	H	101	-7.667	7.591	-25.355	1.00	5.82	H
ATOM	3658	CB	ARG	H	101	-7.125	7.080	-24.033	1.00	7.35	H
ATOM	3659	CG	ARG	H	101	-6.901	5.583	-24.024	1.00	8.88	H
ATOM	3660	CD	ARG	H	101	-6.708	5.089	-22.605	1.00	10.61	H
ATOM	3661	NE	ARG	H	101	-7.985	4.767	-21.985	1.00	11.45	H
ATOM	3662	CZ	ARG	H	101	-8.324	5.114	-20.755	1.00	13.93	H
ATOM	3663	NH1	ARG	H	101	-7.479	5.808	-19.996	1.00	17.72	H
ATOM	3664	NH2	ARG	H	101	-9.504	4.753	-20.281	1.00	12.33	H
ATOM	3665	C	ARG	H	101	-7.432	9.085	-25.459	1.00	4.76	H
ATOM	3666	O	ARG	H	101	-6.777	9.534	-26.393	1.00	6.34	H
ATOM	3667	N	VAL	H	102	-7.960	9.848	-24.501	1.00	3.31	H
ATOM	3668	CA	VAL	H	102	-7.815	11.302	-24.516	1.00	1.00	H
ATOM	3669	CB	VAL	H	102	-8.656	12.030	-23.457	1.00	2.44	H
ATOM	3670	CG1	VAL	H	102	-9.799	12.724	-24.127	1.00	1.07	H
ATOM	3671	CG2	VAL	H	102	-9.099	11.083	-22.353	1.00	1.00	H
ATOM	3672	C	VAL	H	102	-6.434	11.817	-24.301	1.00	1.00	H
ATOM	3673	O	VAL	H	102	-6.142	12.932	-24.688	1.00	1.36	H
ATOM	3674	N	GLY	H	103	-5.592	11.034	-23.650	1.00	1.00	H
ATOM	3675	CA	GLY	H	103	-4.246	11.501	-23.422	1.00	2.80	H
ATOM	3676	C	GLY	H	103	-3.334	10.895	-24.457	1.00	5.14	H
ATOM	3677	O	GLY	H	103	-3.778	10.171	-25.335	1.00	5.99	H
ATOM	3678	N	ALA	H	104	-2.057	11.224	-24.381	1.00	7.98	H
ATOM	3679	CA	ALA	H	104	-1.081	10.647	-25.281	1.00	11.22	H
ATOM	3680	CB	ALA	H	104	0.259	11.310	-25.052	1.00	12.12	H
ATOM	3681	C	ALA	H	104	-1.080	9.230	-24.730	1.00	13.71	H
ATOM	3682	O	ALA	H	104	-0.454	8.956	-23.703	1.00	16.89	H
ATOM	3683	N	THR	H	105	-1.808	8.339	-25.383	1.00	12.18	H
ATOM	3684	CA	THR	H	105	-1.913	6.979	-24.889	1.00	10.87	H
ATOM	3685	CB	THR	H	105	-3.137	6.300	-25.540	1.00	11.27	H
ATOM	3686	OG1	THR	H	105	-4.258	7.186	-25.458	1.00	11.02	H
ATOM	3687	CG2	THR	H	105	-3.497	5.020	-24.828	1.00	11.22	H
ATOM	3688	C	THR	H	105	-0.646	6.143	-25.097	1.00	10.95	H
ATOM	3689	O	THR	H	105	-0.193	5.472	-24.173	1.00	11.18	H
ATOM	3690	N	GLY	H	106	-0.080	6.193	-26.303	1.00	9.89	H
ATOM	3691	CA	GLY	H	106	1.108	5.422	-26.610	1.00	8.03	H
ATOM	3692	C	GLY	H	106	0.873	4.532	-27.821	1.00	9.08	H
ATOM	3693	O	GLY	H	106	1.806	4.189	-28.551	1.00	8.94	H
ATOM	3694	N	TYR	H	107	-0.381	4.152	-28.041	1.00	9.04	H
ATOM	3695	CA	TYR	H	107	-0.722	3.318	-29.178	1.00	7.70	H
ATOM	3696	CB	TYR	H	107	-1.167	1.918	-28.728	1.00	7.28	H
ATOM	3697	CG	TYR	H	107	-2.176	1.870	-27.621	1.00	6.75	H
ATOM	3698	CD1	TYR	H	107	-3.531	1.704	-27.889	1.00	7.50	H
ATOM	3699	CE1	TYR	H	107	-4.461	1.622	-26.868	1.00	9.33	H
ATOM	3700	CD2	TYR	H	107	-1.773	1.954	-26.308	1.00	7.00	H
ATOM	3701	CE2	TYR	H	107	-2.680	1.871	-25.281	1.00	8.83	H
ATOM	3702	CZ	TYR	H	107	-4.029	1.706	-25.552	1.00	11.18	H
ATOM	3703	OH	TYR	H	107	-4.940	1.646	-24.498	1.00	13.47	H
ATOM	3704	C	TYR	H	107	-1.793	4.036	-29.970	1.00	8.28	H
ATOM	3705	O	TYR	H	107	-2.670	4.694	-29.404	1.00	8.79	H
ATOM	3706	N	PHE	H	108	-1.707	3.904	-31.290	1.00	8.59	H
ATOM	3707	CA	PHE	H	108	-2.618	4.594	-32.194	1.00	7.43	H
ATOM	3708	CB	PHE	H	108	-1.803	5.633	-32.928	1.00	6.07	H
ATOM	3709	CG	PHE	H	108	-0.641	6.100	-32.138	1.00	3.15	H
ATOM	3710	CD1	PHE	H	108	-0.828	6.931	-31.033	1.00	3.84	H
ATOM	3711	CD2	PHE	H	108	0.631	5.640	-32.428	1.00	1.87	H
ATOM	3712	CE1	PHE	H	108	0.251	7.304	-30.206	1.00	1.62	H
ATOM	3713	CE2	PHE	H	108	1.720	5.998	-31.621	1.00	2.47	H
ATOM	3714	CZ	PHE	H	108	1.529	6.834	-30.503	1.00	1.15	H
ATOM	3715	C	PHE	H	108	-3.343	3.712	-33.189	1.00	7.78	H
ATOM	3716	O	PHE	H	108	-2.716	3.093	-34.041	1.00	7.98	H

10

20

30

40

ATOM	3717	N	ASP	H	109	-4.671	3.703	-33.092	1.00	7.48	H
ATOM	3718	CA	ASP	H	109	-5.522	2.904	-33.958	1.00	6.76	H
ATOM	3719	CB	ASP	H	109	-6.827	2.525	-33.251	1.00	8.37	H
ATOM	3720	CG	ASP	H	109	-7.497	3.708	-32.566	1.00	9.76	H
ATOM	3721	OD1	ASP	H	109	-7.446	4.836	-33.080	1.00	12.11	H
ATOM	3722	OD2	ASP	H	109	-8.092	3.513	-31.496	1.00	11.64	H
ATOM	3723	C	ASP	H	109	-5.867	3.540	-35.287	1.00	6.63	H
ATOM	3724	O	ASP	H	109	-6.497	2.904	-36.137	1.00	7.36	H
ATOM	3725	N	LEU	H	110	-5.466	4.782	-35.500	1.00	5.24	H
ATOM	3726	CA	LEU	H	110	-5.786	5.398	-36.781	1.00	5.19	H
ATOM	3727	CB	LEU	H	110	-7.013	6.295	-36.650	1.00	4.04	H
ATOM	3728	CG	LEU	H	110	-7.465	6.907	-37.979	1.00	4.58	H
ATOM	3729	CD1	LEU	H	110	-7.936	5.827	-38.912	1.00	1.00	H
ATOM	3730	CD2	LEU	H	110	-8.592	7.914	-37.717	1.00	6.43	H
ATOM	3731	C	LEU	H	110	-4.624	6.200	-37.298	1.00	5.51	H
ATOM	3732	O	LEU	H	110	-4.076	7.038	-36.592	1.00	6.65	H
ATOM	3733	N	TRP	H	111	-4.247	5.957	-38.538	1.00	4.26	H
ATOM	3734	CA	TRP	H	111	-3.132	6.702	-39.088	1.00	4.57	H
ATOM	3735	CB	TRP	H	111	-1.912	5.790	-39.296	1.00	3.02	H
ATOM	3736	CG	TRP	H	111	-1.291	5.208	-38.059	1.00	1.95	H
ATOM	3737	CD2	TRP	H	111	0.081	5.316	-37.665	1.00	1.00	H
ATOM	3738	CE2	TRP	H	111	0.246	4.528	-36.503	1.00	1.00	H
ATOM	3739	CE3	TRP	H	111	1.189	6.001	-38.187	1.00	1.00	H
ATOM	3740	CD1	TRP	H	111	-1.890	4.389	-37.140	1.00	2.44	H
ATOM	3741	NE1	TRP	H	111	-0.971	3.975	-36.206	1.00	1.00	H
ATOM	3742	CZ2	TRP	H	111	1.482	4.401	-35.851	1.00	1.00	H
ATOM	3743	CZ3	TRP	H	111	2.412	5.882	-37.549	1.00	1.00	H
ATOM	3744	CH2	TRP	H	111	2.553	5.084	-36.387	1.00	2.97	H
ATOM	3745	C	TRP	H	111	-3.534	7.310	-40.423	1.00	5.19	H
ATOM	3746	O	TRP	H	111	-4.602	7.016	-40.963	1.00	4.62	H
ATOM	3747	N	GLY	H	112	-2.669	8.178	-40.933	1.00	6.36	H
ATOM	3748	CA	GLY	H	112	-2.917	8.808	-42.209	1.00	7.94	H
ATOM	3749	C	GLY	H	112	-1.848	8.270	-43.134	1.00	9.94	H
ATOM	3750	O	GLY	H	112	-0.962	7.545	-42.674	1.00	7.59	H
ATOM	3751	N	ARG	H	113	-1.911	8.609	-44.420	1.00	12.17	H
ATOM	3752	CA	ARG	H	113	-0.918	8.130	-45.387	1.00	14.63	H
ATOM	3753	CB	ARG	H	113	-1.415	8.357	-46.821	1.00	19.69	H
ATOM	3754	CG	ARG	H	113	-2.716	7.645	-47.220	1.00	26.76	H
ATOM	3755	CD	ARG	H	113	-3.136	7.992	-48.682	1.00	32.39	H
ATOM	3756	NE	ARG	H	113	-3.098	9.435	-48.981	1.00	36.17	H
ATOM	3757	CZ	ARG	H	113	-3.435	9.974	-50.154	1.00	39.14	H
ATOM	3758	NH1	ARG	H	113	-3.844	9.194	-51.153	1.00	40.77	H
ATOM	3759	NH2	ARG	H	113	-3.348	11.291	-50.334	1.00	39.73	H
ATOM	3760	C	ARG	H	113	0.459	8.801	-45.236	1.00	13.93	H
ATOM	3761	O	ARG	H	113	1.454	8.288	-45.747	1.00	14.13	H
ATOM	3762	N	GLY	H	114	0.508	9.949	-44.560	1.00	12.46	H
ATOM	3763	CA	GLY	H	114	1.763	10.660	-44.373	1.00	10.52	H
ATOM	3764	C	GLY	H	114	2.053	11.683	-45.468	1.00	9.35	H
ATOM	3765	O	GLY	H	114	1.436	11.642	-46.527	1.00	8.23	H
ATOM	3766	N	THR	H	115	2.963	12.618	-45.192	1.00	8.71	H
ATOM	3767	CA	THR	H	115	3.398	13.635	-46.151	1.00	6.50	H
ATOM	3768	CB	THR	H	115	3.021	15.043	-45.753	1.00	7.27	H
ATOM	3769	OG1	THR	H	115	1.952	14.999	-44.822	1.00	9.76	H
ATOM	3770	CG2	THR	H	115	2.636	15.855	-46.966	1.00	7.54	H
ATOM	3771	C	THR	H	115	4.925	13.624	-46.129	1.00	7.01	H
ATOM	3772	O	THR	H	115	5.554	13.574	-45.055	1.00	2.98	H
ATOM	3773	N	LEU	H	116	5.511	13.699	-47.318	1.00	6.85	H
ATOM	3774	CA	LEU	H	116	6.953	13.701	-47.463	1.00	6.07	H
ATOM	3775	CB	LEU	H	116	7.352	13.132	-48.812	1.00	5.44	H
ATOM	3776	CG	LEU	H	116	8.812	13.352	-49.199	1.00	5.58	H
ATOM	3777	CD1	LEU	H	116	9.727	12.426	-48.399	1.00	3.24	H

10

20

30

40

ATOM	3778	CD2	LEU	H	116	8.941	13.099	-50.685	1.00	5.27	H
ATOM	3779	C	LEU	H	116	7.531	15.082	-47.350	1.00	7.43	H
ATOM	3780	O	LEU	H	116	7.132	15.997	-48.059	1.00	9.44	H
ATOM	3781	N	VAL	H	117	8.481	15.228	-46.443	1.00	9.93	H
ATOM	3782	CA	VAL	H	117	9.151	16.500	-46.275	1.00	11.48	H
ATOM	3783	CB	VAL	H	117	9.107	16.966	-44.817	1.00	11.24	H
ATOM	3784	CG1	VAL	H	117	9.929	18.231	-44.648	1.00	11.87	H
ATOM	3785	CG2	VAL	H	117	7.675	17.217	-44.418	1.00	11.74	H
ATOM	3786	C	VAL	H	117	10.587	16.250	-46.706	1.00	11.33	H
ATOM	3787	O	VAL	H	117	11.247	15.342	-46.187	1.00	10.03	H
ATOM	3788	N	THR	H	118	11.049	17.032	-47.677	1.00	11.55	H
ATOM	3789	CA	THR	H	118	12.412	16.898	-48.182	1.00	13.80	H
ATOM	3790	CB	THR	H	118	12.469	16.720	-49.714	1.00	12.54	H
ATOM	3791	OG1	THR	H	118	11.597	15.658	-50.113	1.00	17.37	H
ATOM	3792	CG2	THR	H	118	13.880	16.398	-50.147	1.00	11.46	H
ATOM	3793	C	THR	H	118	13.156	18.177	-47.889	1.00	15.05	H
ATOM	3794	O	THR	H	118	12.809	19.235	-48.422	1.00	16.32	H
ATOM	3795	N	VAL	H	119	14.176	18.102	-47.048	1.00	14.62	H
ATOM	3796	CA	VAL	H	119	14.932	19.302	-46.763	1.00	15.25	H
ATOM	3797	CB	VAL	H	119	15.212	19.441	-45.249	1.00	15.70	H
ATOM	3798	CG1	VAL	H	119	15.740	18.137	-44.684	1.00	18.79	H
ATOM	3799	CG2	VAL	H	119	16.205	20.559	-45.013	1.00	14.10	H
ATOM	3800	C	VAL	H	119	16.242	19.309	-47.544	1.00	15.85	H
ATOM	3801	O	VAL	H	119	17.170	18.567	-47.232	1.00	15.88	H
ATOM	3802	N	SER	H	120	16.297	20.129	-48.589	1.00	17.32	H
ATOM	3803	CA	SER	H	120	17.511	20.245	-49.385	1.00	18.51	H
ATOM	3804	CB	SER	H	120	17.491	19.307	-50.597	1.00	18.68	H
ATOM	3805	OG	SER	H	120	17.034	19.984	-51.754	1.00	16.68	H
ATOM	3806	C	SER	H	120	17.669	21.665	-49.879	1.00	19.18	H
ATOM	3807	O	SER	H	120	16.789	22.509	-49.698	1.00	16.51	H
ATOM	3808	N	SER	H	121	18.808	21.908	-50.518	1.00	21.95	H
ATOM	3809	CA	SER	H	121	19.120	23.215	-51.069	1.00	23.17	H
ATOM	3810	CB	SER	H	121	20.568	23.602	-50.719	1.00	22.76	H
ATOM	3811	OG	SER	H	121	20.655	24.126	-49.404	1.00	23.27	H
ATOM	3812	C	SER	H	121	18.890	23.299	-52.584	1.00	23.84	H
ATOM	3813	O	SER	H	121	18.862	24.394	-53.122	1.00	24.66	H

10

20

30

【 0 1 1 2 】

【表 9】

rBLG-His6, rBLG-His6 T18Y および rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y のアミノ酸配列を示した。His6 タグは斜体で示し、変異したアミノ酸は太字および下線で示した。

rBLG-His6:

1	LIVTQTMKGL	DIQKVAGTWY	SLAMAASDIS	LLDAQSAPLR	10
41	VYVEELKPTP	EGDLEILLQK	WENGECQKK	IIAEKTKIPA	
81	VFKIDALNEN	KVLVLDTDYK	KYLLFCMENS	AEPEQSLVCQ	
121	CLVRTPEVDD	EALEKFDKAL	KALPMHIRLS	FNPTQLEEQC	
161	HIHHHHHH (配列番号 9)				

rBLG-His6 T18Y:

1	LIVTQTMKGL	DIQKVAG <u>Y</u> WY	SLAMAASDIS	LLDAQSAPLR	
41	VYVEELKPTP	EGDLEILLQK	WENGECQKK	IIAEKTKIPA	
81	VFKIDALNEN	KVLVLDTDYK	KYLLFCMENS	AEPEQSLVCQ	
121	CLVRTPEVDD	EALEKFDKAL	KALPMHIRLS	FNPTQLEEQC	20
161	HIHHHHHH (配列番号 10)				

rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y:

1	LIVTQTMKGL	DIQKVAG <u>Y</u> WY	SLAMAASDIS	LLDAQSAPLR	
41	VYVE <u>Y</u> LKPTP	EGDLEI <u>Y</u> LQK	WENGECQKK	IIAEKTKIPA	
81	VFKIDALNEN	KVLVLDTDYK	KYLLFCMENS	AEPEQSLVCQ	
121	CLVRTPEVDD	EALEKFDKAL	KALPMHIRLS	FNPTQLEEQC	
161	HIHHHHHH (配列番号 11)				

30

【表 10】

rBLG-His6 変異体、rBLG-His6 T18Y変異体および rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y 変異体の PCR増幅に使用したプライマー。制限酵素部位は斜体で示した。重複する領域および停止コドンには下線を引いた。変異したコドンは、太字、下線および斜体で示した。

SfiI *NcoI*

プライマー1. GAA TCC GCG ***GCC CAG CCG*** *GCC ATG GCC CTG ATT GTG ACC*

10

HindIII 停止

プライマー2. TTA CTC AAG *CTT* TTA ATG GTG ATG GTG ATG ATG AAT ATG GCA
CTG TTC TTC CAG C

StuI

プライマー3. CC ATG AAA *GGC* CTG GAT ATT CAG AAA GTG GCG GGC **TAC** TGG
TAT AGC C

20

プライマー5と重複する領域

プライマー4. **ATA** AAT TTC CAG ATC GCC TTC CGG GGT CGG TTT CAG **ATA** TTC
CAC ATA CAC ACG C

プライマー4と重複する領域

プライマー5. GGC GAT CTG GAA ATT **TAT** CTG CAG AAA TGG G

30

【0114】

【表 1 1】

D1 IgE FabのnBLG、rBLG-His6 およびその変異体に対する会合定数と解離定数
(図 2 4 参照)。

	nBLG	rBLGHis	T18Y	三重 変異体
Kd (1/s)	$4.8e^{-3}$	$8.2e^{-3}$	$8.2e^{-2}$	-
Ka (1/Ms)	$1.8e^6$	$9.61e^5$	$1.3e^5$	-
KD (M)	$2.7e^{-9}$	$8.5e^{-9}$	$6.1e^{-7}$	-
KA (1/M)	$3.2e^8$	$1.2e^8$	$1.6e^6$	-

- Argos, P. (1988) Protein Engineering, 2, 101-113.
- Banerjee, B., Wang, X., Kelly, K.J., Fink, J.N., Sussman, G.L., and Kurup, V.P. (1997) J. Immunol. 159, 5724-5732.
- Barbas III, C.F., Kang, A.S., Lerner, R.A., and Benkovic, S.J. (1991) Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 88, 7978-7982.
- Brownlow, S., Cabral, J.H.M, Cooper, R., Flower, D.R., Yewdall, S.J., Polikarpov, I., North, A.C.T., Sawyer, L. (1997) Structure 5, 481-495 10
- Corry, D.B., and Kheradmand, F. (1999) Nature 402, B18-B23.
- De Genst, E., Silence, K., Decanniere, K., Conrath, K., Loris, R., Kinne, J., Muyldermans, S. and Wyns, L. (2006) Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 103, 4586-4591.
- Desplancq, D., King, D.J., Lawson, A.D.G., and Mountain, A. (1994) Protein Eng. 7, 1027-1033. 20
- Godovac-Zimmermann J. and Braunitzer G. (1987) Milchwissenschaft 42(5), 294-297.
- Hill, D.J., Hosking, C.S. and Heine, R.G. (1999) Ann. Med. 31, 272-281.
- Holliger, P., Prospero, T., and Winter, G. (1993) Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 90, 6444-6448.
- Hoogenboom, H.R., de Bruine, A.P., Hufton, S.E., Hoet, R.M., Arends, J.-W. and Roovers, R.C. (1998) Immunotechnology 4, 1-20. 30
- Host, A. and Halken, S. (1990) Allergy 45, 587-596.
- Kabat, E.A., Wu, T.T., Reid-Miller, M., Perry, H.M., and Gottesman, K.S. (1991) Sequences of Proteins of Immunological Interest, 4th Ed., U.S. Dept. of Health and Human Services, Bethesda, MD.
- McCafferty, J., Griffiths, A.D., Winter, G., and Chiswell, F.J. (1990) Nature 348, 552-554.
- Nevanen, T.K, Soderholm, L., Kukkonen, K., Suortti, T., Teerinen, T., Linder, M., Soderlund, H., Teeri, T.T. (2001) J. Chromatogr. A 925, 89-97. 40
- Rouvinen, J., Virtanen, T., Mantyjarvi, R. (2001) J. Chromatogr. B 756, 199-206.
- Saarinen, K.M., Juntunen-Backman, K., Jarvenpaa, A.L., Kuitunen, P., Lope, L., Renlund, M., Siivola, M. and Savilahti, E. (1999) J. Allergy Clin. Immunol. 104, 457-461.
- Saarinen, K.M. (2000) Risk factors and characteristics of cow's milk allergy. In Helsinki University, Helsinki, Finland. 50

Sampson, H.A. and Scanlon, S.M. (1989) J Pediatr 115, 23-7.

Sanger, F., Nicklen, S., and Coulson, A.R. (1977) Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 74, 5463-5467.

Savilahti, E. (1981) Allergy 36, 73-88.

Sawyer, L., Papiz, M.Z., North, A., Eliopoulos, E (1985) Biochemical Society Transactions 13(1), 265-6

10

Schrander, J.J., van den Bogart, J.P., Forget, P.P., Schrander-Stumpel, C.T., Ku ijten, R.H. and Kester, A.D. (1993) Eur. J. Pediatr. 152, 640-644.

Steinberger, P., Kraft, D., and Valenta, R. (1996) J. Biol. Chem. 271, 10967-10972.

Vaarala, O., Saukkonen, T., Savilahti, E., Klemola, T. and Akerblom, H.K. (1995) J. Allergy Clin. Immunol. 96, 917-23.

【図面の簡単な説明】

20

【0116】

【図1】図1は、完全なヒトIgEサブクラス抗体、Fab断片および一本鎖抗体（scFv）の概略図である。抗原結合部位は三角形で示す。

【図2】図2は、パニング法の概略図である。

【図3】図3は、scFvファージライブラリーの構築に使用したscFvファージディスプレイベクターの概略図である。

【図4】図4は、D1 IgE Fabの重鎖可変領域の推定されるアミノ酸配列およびヌクレオチド配列である。相補性決定領域（CDR）を下線で示した。番号付けはKabat（Kabat et al., 1991）に準ずる。

【図5】図5は、D1 IgE Fabの軽鎖可変領域の推定されるアミノ酸配列およびヌクレオチド配列である。CDRを下線で示した。番号付けはKabat（Kabat et al., 1991）に準ずる。

30

【図6】図6は、ヒトIgG1サブタイプに属するD1 IgE Fab断片の競合的ELISAで得られた曲線である。D1 IgE Fab断片の固定化ビオチン化β-ラクトグロブリンに対する結合は、可溶性未修飾β-ラクトグロブリンによって阻害された。

【図7】図7は、免疫沈降アッセイの結果である。D1 IgE Fabは牛乳の未修飾β-ラクトグロブリンに結合する。1 = 低分子量マーカー；2 ~ 5 = タンパク質L-ビーズに固定化したD1 IgE fabと、未処理牛乳サンプル、+95℃で15分間加熱した牛乳サンプル、+95℃で30分間加熱した牛乳サンプル、および+95℃で60分間加熱した牛乳サンプル；6 ~ 7 = 負の対照（即ち、空のタンパク質L-ビーズと、未処理牛乳サンプル、または+95℃で60分間加熱した牛乳サンプル）；8 = 0.5 μgの精製β-ラクトグロブリン（Sigma製）；9 = 0.5 μgの精製D1 IgE Fab。

40

【図8】図8は、競合的ELISAの結果である。ヒトIgG1サブタイプに属するD1 IgE Fab断片のβ-ラクトグロブリンに対する結合は、患者血清によって阻害される。

【図9】図9は、D1 IgE Fab-抗体のβ-ラクトグロブリンに対する結合を示す。（a）アレルゲン（灰色）と2つのIgE分子（軽鎖L、重鎖H）の結合の概略図である。

【図10】図10は、β-ラクトグロブリンエピトープの、1 ~ 6と番号を付した種々のセグメントを示す。

50

【図11】図11は、D1 IgE Fabのβ-ラクトグロブリンに対する結合を示す、D1/IgE-Fab断片表面の側面図である。

【図12】図12は、β-ラクトグロブリンエピトープの表面と共に、D1 IgE FabのCDRループおよびβ-ラクトグロブリンに接触するD1 IgE Fabの残基を示す。

【図13】図13は、D1 IgE Fabのβ-ラクトグロブリンに対する結合（左）、IgG Fab 2JELのリン酸輸送タンパク質に対するIgG抗体-抗原型結合（中央）およびBV16/Fabの花粉アレルゲンBet v 1に対するIgG-アレルゲン型結合（右）を示す。

【図14】図14は、種々のアレルゲンに由来する潜在的なIgEエピトープを示す。Eq u c 1、ウマ皮膚（Lascombe et al., 2000, J. Biol. Chem. 275(28):21572-21577）；Bos d 5、β-ラクトグロブリン；Bet v 1、シラカバ花粉（Spangfort et al., 2003, J. Immunol. 171(6):3084-3090）；Bos d 2、ウシフケ（Rautiainen et al., 1998, Biochem. Biophys. Res. Commun. 247:746-750）；Cyp c 1、コイパルプアルブミン（Swoboda et al., 2002, J. Immunol. 168(9):4576-4584）；およびHev b 6、ラテックス（W002094878を参照）。平面状（平坦状）表面は太い横線／縦線で表した。

【図15】図15は、競合的ELISAの結果である。D1 IgE Fab断片のBLGに対する結合は、短いペプチドであるKRVGにより阻害される。C t r 1およびc t r 2はバックグラウンドとなる対照であり、c t r 1は、D1 IgE Fabなしのインキュベーションで得られた結果であり、c t r 2は、BLGなしの結果である（実施例4を参照）。

【図16】図16は、D1/Fab抗体の表面およびアレルゲンBLGのリボンモデルを示す。この図においては、D1/Fabに含まれる、ヘベイン結合性IgE抗体（クローンIC2）と同一の残基を薄いグレーで示し、異なる残基を濃いグレーで示した。a）正面図とb）側面図は、構造的に非常に異なるアレルゲンに結合する2種のIgE抗体軽鎖間に大きな類似性が存在することを示している。

【図17】平坦状エピトープ、凸状エピトープおよび凹状エピトープに結合する抗体。1列目に、溶媒排除表面（プローブ直径：10 Å）を示した。プローブ球面が大きいいため、表面はより大規模の特徴を示している。表面はガウス曲率に基づいて色分けした。平坦状の領域は白で示した。抗体はリボンモデルで示した。2列目に類似構造を示したが、ここでは表面は、エピトープに対応する相互作用表面を表している。

【図18】5種の異なるアレルゲンの分子表面（プローブ直径：10 Å）を2つの方向から示した。表面は曲率に基づいて色分けし、平坦状領域は白で示した。IgE結合のための推定平坦状領域は左列の図に長方形で示した。側面図を右列に示し、左列と同じ領域の位置を線で示した。

【図19】rBLG-His6およびその変異体の精製。2回目のIMAC精製の後、タンパク質サンプルをクーマシー染色した15%SDS-PAGEゲル（β-メルカプトエタノール含有）で分析した。プールの画分を矢印で示した。

【図20】精製rBLG-His6およびその変異体をウエスタンブロッティングで分析し、続いてウサギ抗BLG抗体とヤギAFOS接合抗ウサギ抗体で検出した。3 μgのタンパク質をウェルにロードした。レーン1=L MW、レーン2=未修飾BLG（Sigma製）、レーン3=rBLG-His6、レーン4=rBLG-His6 T18Y、およびレーン5=rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y。

【図21】nBLG、rBLG-His6およびその変異体のCDスペクトルを示す。

【図22】D1 IgE Fabの種々のBLGに対する結合特性をELISAで分析した。ビオチン化したnBLG、rBLG-His6またはその変異体を、SA-マイクロタイターウェルに固定化した。結合したD1 IgE FabはAFOS接合ヤギ抗カッパ抗体で検出した。3重変異=rBLG-His6 T18Y/E45Y/L57Y変異体、Bsa=ウシ血清アルブミン、対照サンプルは、BLGを固定化した。D1 IgE Fabを使用しない時に、抗カッパーAFOS接合体によって得られるバックグラウンド値

10

20

30

40

50

である。

【図23】アレルギー性ドナーと非アレルギー性ドナーから得たIgE血清サンプルの、種々のBLGに対する結合特性をELISAで分析した。ビオチン化したnBLG、rBLG-His6またはその変異体を、SA-マイクロタイターウェルに固定化した。結合したIgEは、AFOS接合ヤギ抗ヒトIgEで検出した。

【図24】nBLG、rBLG-His6およびその変異体の、BIAcoreによる解析。種々のBLGに結合する69.6nMのD1 IgE Fab溶液の結合曲線である。nBLG、rBLG-His6およびその変異体に対するD1 IgE Fabの会合定数および解離定数を計算し、表11に示した。

【配列表フリーテキスト】

10

【0117】

配列番号5： 配列中の第5番アミノ酸Xは任意のアミノ酸であり、第8番アミノ酸Xはセリンまたはスレオニンである。

配列番号6： 配列中の第3番～第5番アミノ酸Xは任意のアミノ酸であり、第8番アミノ酸Xはセリンまたはスレオニンであり、第9番～第11番アミノ酸Xは任意のアミノ酸である。

配列番号8： β-ラクトグロブリンのアミノ酸配列

配列番号9： ウシ組み換えBLG

配列番号10： ウシ組み換えBLG変異体

配列番号11： ウシ組み換えBLG変異体

20

配列番号12： PCR増幅用プライマー

配列番号13： PCR増幅用プライマー

配列番号14： PCR増幅用プライマー

配列番号15： PCR増幅用プライマー

配列番号16： PCR増幅用プライマー

配列番号17： PCR増幅用プライマー

配列番号18： PCR増幅用プライマー

配列番号19： PCR増幅用プライマー

配列番号20： PCR増幅用プライマー

配列番号21： PCR増幅用プライマー

30

配列番号22： PCR増幅用プライマー

配列番号23： PCR増幅用プライマー

配列番号24： PCR増幅用プライマー

配列番号25： PCR増幅用プライマー

配列番号26： PCR増幅用プライマー

配列番号27： PCR増幅用プライマー

配列番号28： PCR増幅用プライマー

配列番号29： PCR増幅用プライマー

配列番号30： PCR増幅用プライマー

配列番号31： PCR増幅用プライマー

40

配列番号32： PCR増幅用プライマー

配列番号33： PCR増幅用プライマー

配列番号34： PCR増幅用プライマー

配列番号35： PCR増幅用プライマー

配列番号36： PCR増幅用プライマー

配列番号37： PCR増幅用プライマー

配列番号38： PCR増幅用プライマー

配列番号39： PCR増幅用プライマー

配列番号40： PCR増幅用プライマー

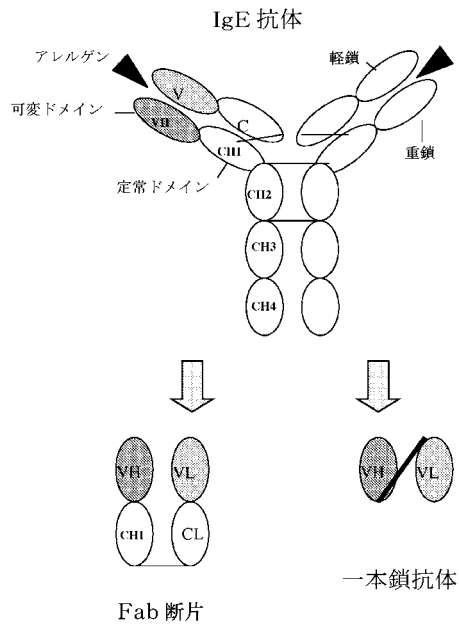
配列番号41： PCR増幅用プライマー

50

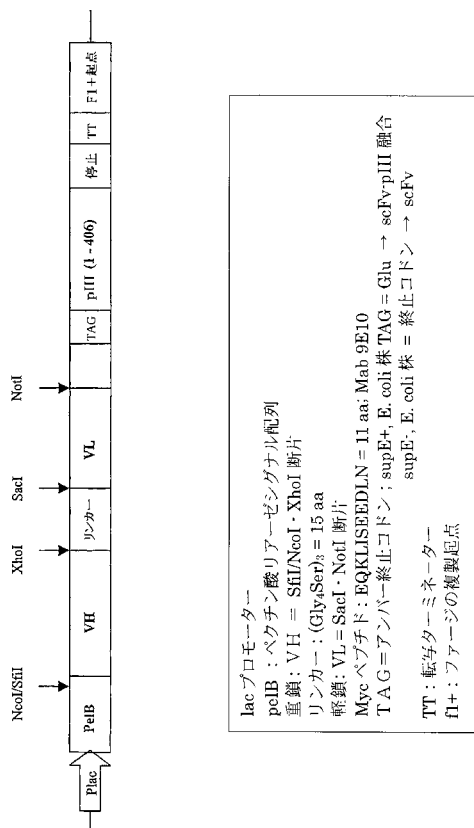
[illegible]

配列番号 92 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 93 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 94 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 95 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 96 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 97 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 98 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 99 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 100 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 101 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	10
配列番号 102 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 103 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 104 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 105 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 106 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 107 :	C D R - L 1 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 108 :	C D R - L 2 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 109 :	C D R - L 2 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 110 :	C D R - L 2 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 111 :	C D R - L 2 領域の保存性ペプチド配列	20
配列番号 112 :	C D R - L 2 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 113 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 114 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 115 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 116 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 117 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 118 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 119 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 120 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 121 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	30
配列番号 122 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 123 :	C D R - L 3 領域の保存性ペプチド配列	
配列番号 124 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 125 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 126 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 127 :	P C R 増幅用プライマー	
配列番号 128 :	P C R 増幅用プライマー	

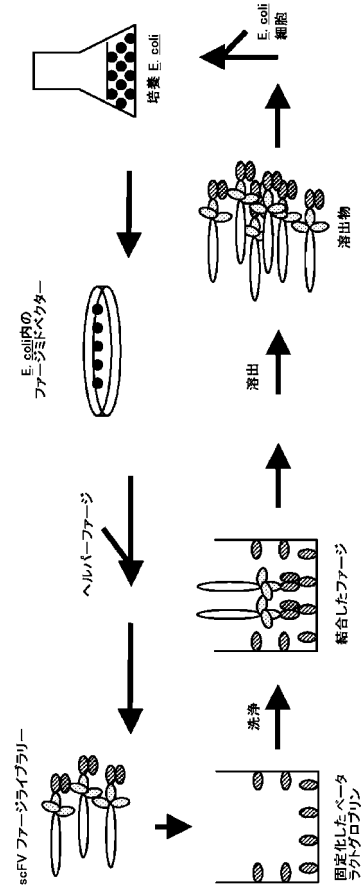
【図 1】



【図 3】



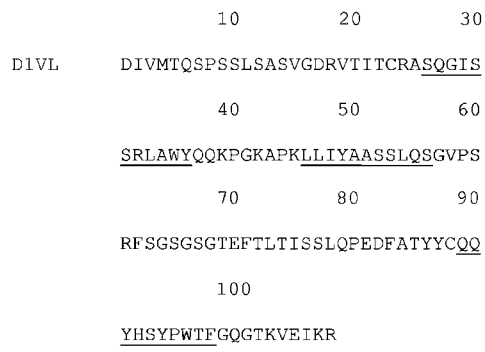
【図 2】



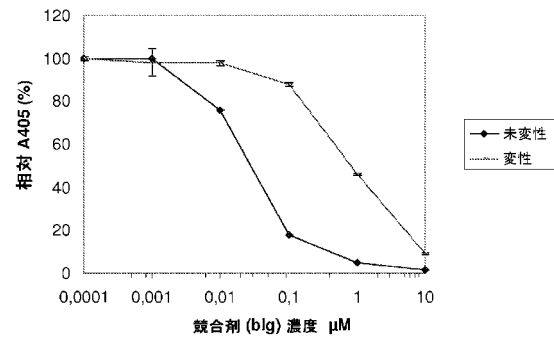
【図 4】

	10	20	30
D1VH	QVSLRESGGGLVQPGRSLRLSCTASGFTFR		
	40	50	60
	<u>HHGMTWVRQAPGKGLEWVASLSGSGTKTHE</u>		
	70	80	90
	<u>ADSVKGRFTISRDNSENNTLYLQMDNVRDED</u>		
	100	110	120
	TAIYYCAKAKRVGATGYFDLWGRGTLTVTSS		

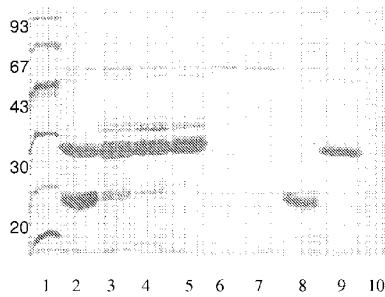
【図 5】



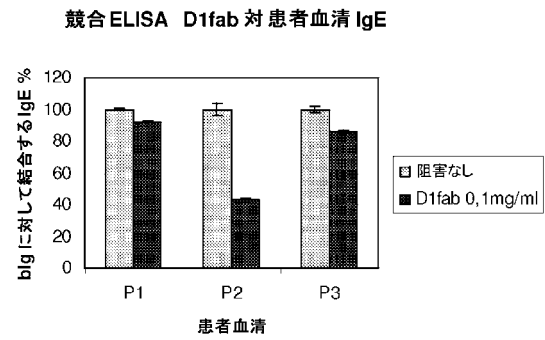
【図 6】



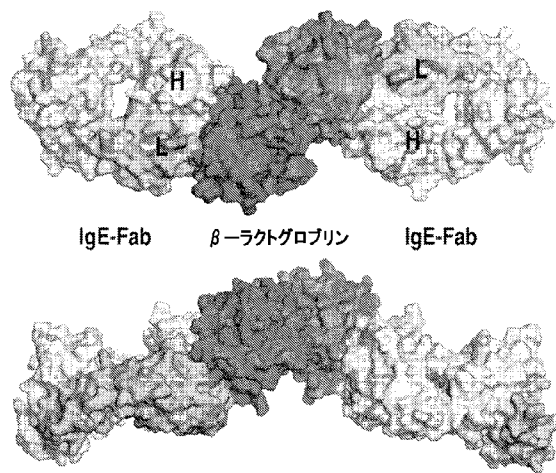
【図 7】



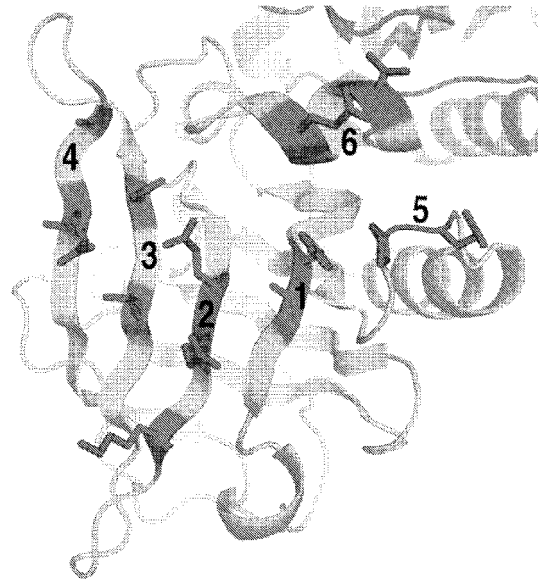
【図 8】



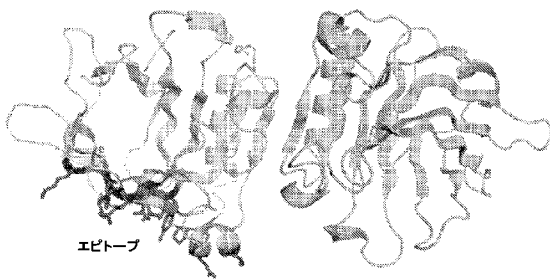
【図 9】



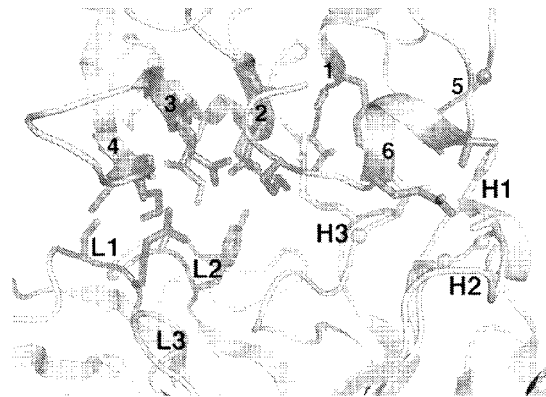
【図 10】



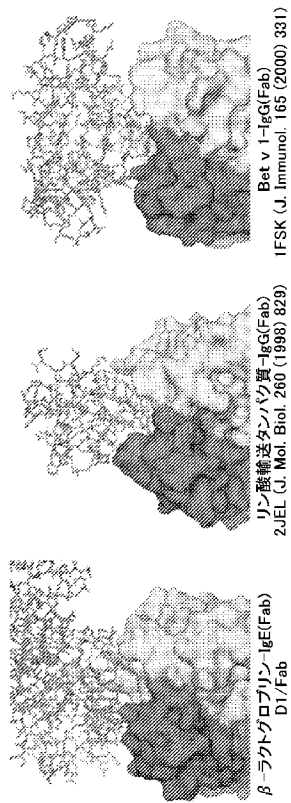
【図 11】



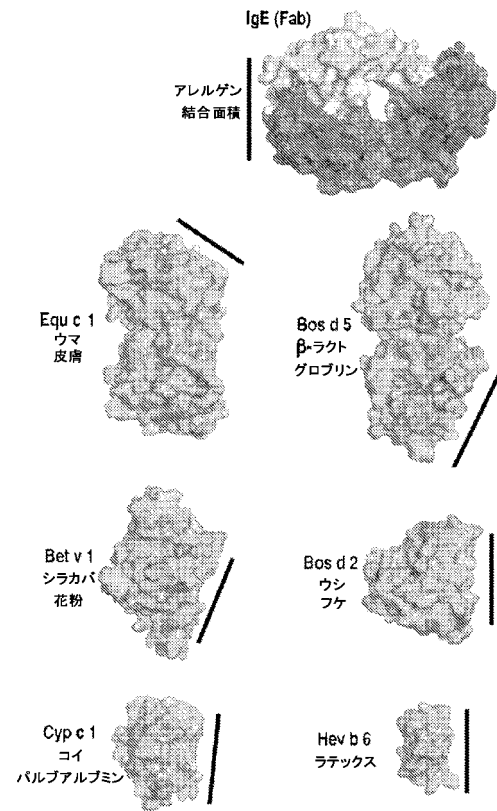
【図 12】



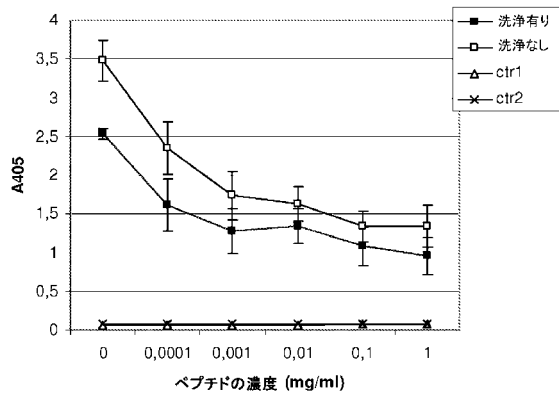
【図 13】



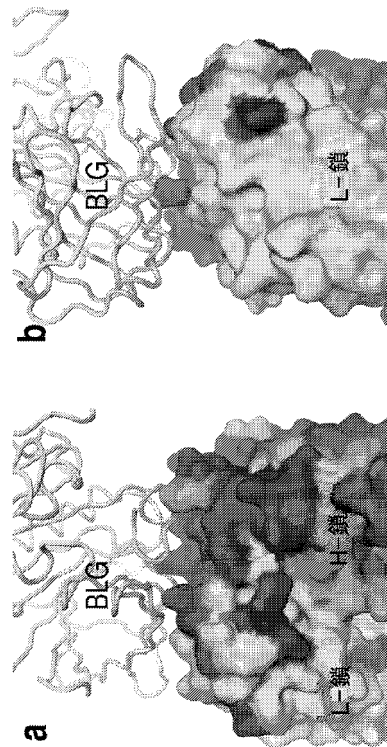
【図 14】



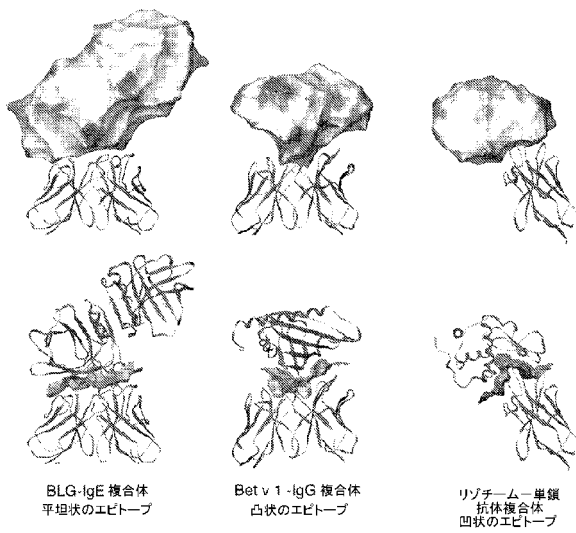
【図 15】



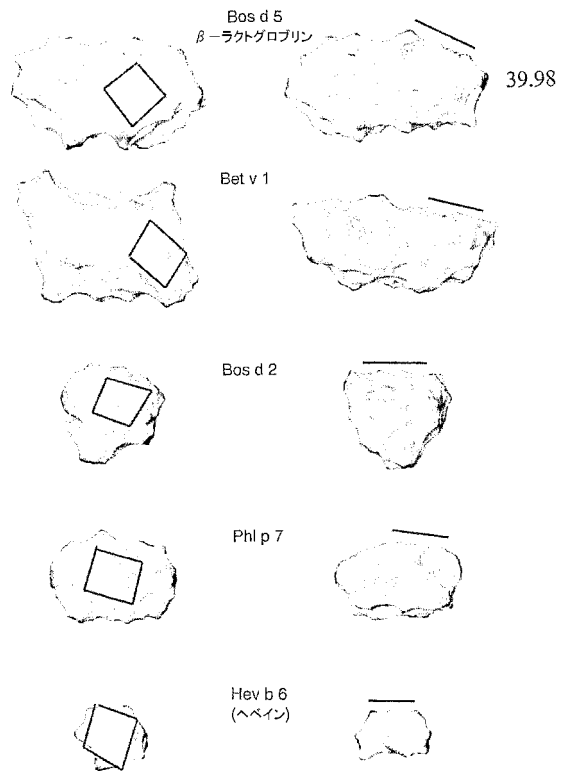
【図 16】



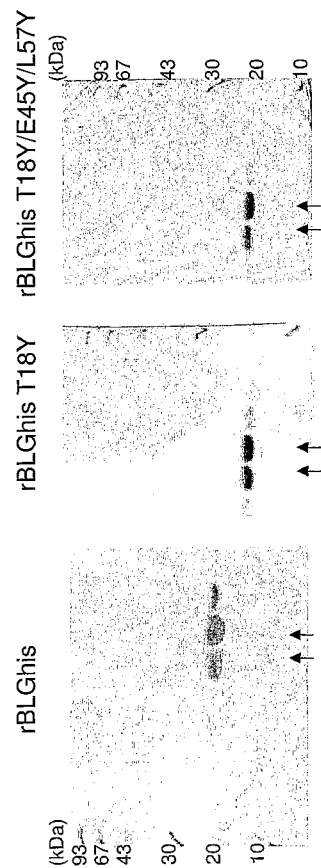
【図 17】



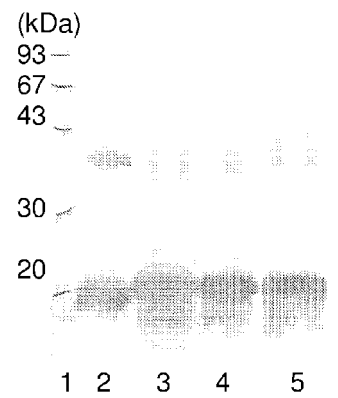
【図 18】



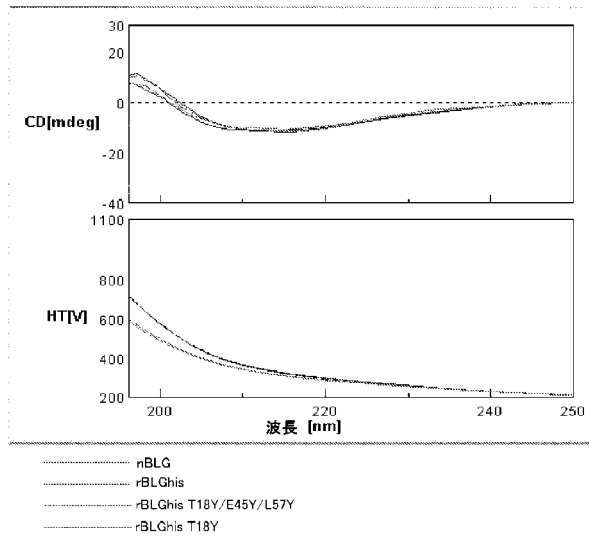
【図 19】



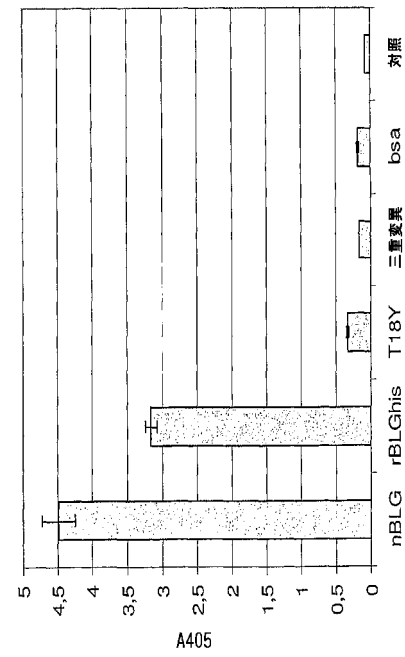
【図 20】



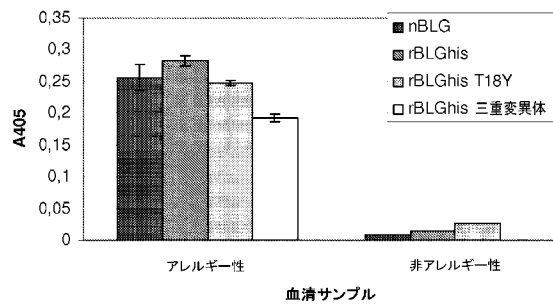
【図 2 1】



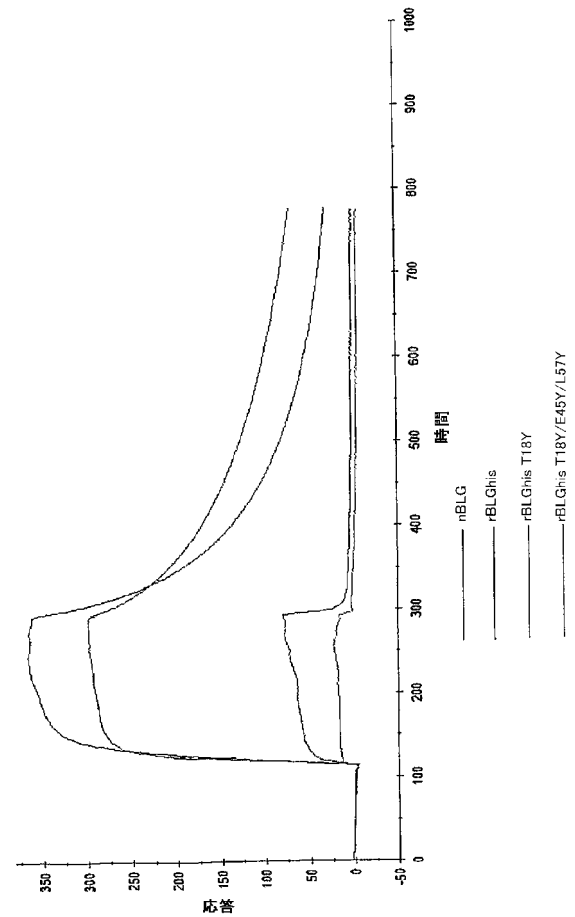
【図 2 2】



【図 2 3】



【図 2 4】



【配列表】

0005444001000001.app

フロントページの続き

- (51)Int.Cl. F I
G 0 1 N 33/50 (2006.01) G 0 1 N 33/50 Z
G 0 1 N 33/566 (2006.01) G 0 1 N 33/566
C 0 7 K 16/18 (2006.01) C 0 7 K 16/18
- (72)発明者 ニエミ, メルヤ
 フィンランド国、エフアイー 8 0 1 3 0 ヨエンスー、レイニッキティエ 4 イー 3 2
- (72)発明者 ロウヴィネン, ユハ
 フィンランド国、エフアイー 8 0 1 4 0 ヨエンスー、カイスラランナンティエ 1 3
- (72)発明者 ラウッカネン, マルヤーレーナ
 フィンランド国、エフアイー 0 2 2 1 0 エスポー、エッリプシクヤ 3 デー 2 6
- (72)発明者 タッキネン, クリスティーナ
 フィンランド国、エフアイー 0 2 2 0 0 エスポー、ハルティランティエ 1 2 アス 1
- (72)発明者 ソデルlund, ハンス
 フィンランド国、エフアイー 0 2 9 4 0 エスポー、サロンキティエ 1 9
- (72)発明者 マキネン-キルユネン, ソイリ
 フィンランド国、エフアイー 0 0 7 1 0 ヘルシンキ、グラニーツティティエ 7 アス 2 8
- (72)発明者 ハーハテラ, タリ
 フィンランド国、エフアイー 0 0 2 0 0 ヘルシンキ、パヤラハデンティエ 1 0 ビーデー 3 4

審査官 清水 晋治

- (56)参考文献 Journal of immunology. 2003, Vol.171, No.6, p.3084-3090
 The Journal of biological chemistry. 1994, Vol.269, No.15, p.11102-11107
 European journal of immunology. 2002, Vol.32, No.1, p.270-280
 Journal of immunology. 2006, Vol.176, No.8, p.4852-4860
 The Journal of biological chemistry. 1999, Vol.274, No.4, p.2337-2343
 The Journal of biological chemistry. 2000, Vol.275, No.28, p.21572-21577
 Journal of immunological methods. 2002, Vol.266, No.1-2, p.67-78
 Structure. 2007 Nov, Vol.15, No.11, p.1413-1421

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
 C 1 2 N 1 5 / 0 0 - 1 5 / 9 0
 C 0 7 K 1 4 / 0 0 - 1 9 / 0 0
 PubMed
 UniProt/GeneSeq
 GenBank/EMBL/DDBJ/GeneSeq