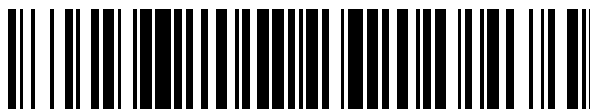


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 548 452**

51 Int. Cl.:

C07K 14/54 (2006.01)

C07K 16/24 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **22.04.2009** **E 09735498 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **29.07.2015** **EP 2294083**

54 Título: **Epítomos de IL-17A e IL-17F y sus anticuerpos específicos**

30 Prioridad:

23.04.2008 GB 0807413

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

16.10.2015

73 Titular/es:

UCB BIOPHARMA SPRL (100.0%)

Allée de la Recherche 60

1070 Brussels, BE

72 Inventor/es:

CESKA, THOMAS ALLEN;

HENRY, ALISTAIR JAMES y

SHI, JIJYE

74 Agente/Representante:

DE ELZABURU MÁRQUEZ, Alberto

ES 2 548 452 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Epítomos de IL-17A e IL-17F y sus anticuerpos específicos

La presente invención se refiere a epítomos neutralizantes de IL-17A e IL-17F y a anticuerpos que se unen a dichos epítomos. La presente invención también se refiere a los usos terapéuticos de las moléculas de anticuerpo y a los métodos para producirlas.

La interleucina 17 (IL-17), también conocida como CTLA-8 ó IL-17A, es una citocina pro-inflamatoria que estimula la secreción de un amplio rango de otras citocinas procedentes de diversas células no inmunes. La IL-17A es capaz de inducir la secreción de IL-6, IL-8, PGE2, MCP-1 y G-CSF por células adherentes como los fibroblastos, la queratinocitos, células epiteliales y endoteliales y también es capaz de inducir la expresión superficial de ICAM-1, la proliferación de células T y el crecimiento y la diferenciación de progenitores humanos de CD34+ en neutrófilos cuando se co-cultivan en presencia de fibroblastos irradiados (Fossiez et al., 1998, *Int. Rev. Immunol.* 16, 541-551). La IL-17A se produce predominantemente en células T activadas por memoria a través de la unión a un receptor superficial distribuido uniformemente (IL-17R) (Yao et al., 1997, *Cytokine*, 9, 794-800). También puede actuar a través de la unión a un complejo de IL-17RA y IL-17RC (Toy et al., 2006, *J. Immunol.* 177(11): 36-39). Las células productoras de IL-17 denominadas 'células TH17' han sido implicadas en la patogénesis de determinados cánceres (Weaver et al., 2006, *Immunity*, 24, 677-688; Langowski et al., 2006, 442, 461-465; Iwakura e Ishigame, 2006, *J. Clin. Invest.* 116, 5, 1218-1222).

Se han identificado una serie de homólogos de IL-17 que presentan papeles tanto similares como distintos en la regulación de respuestas inflamatorias. Para una revisión de las familias de citocina IL-17/receptor véase Dumont, 2003, *Expert Opin. Ther. Patents*, 13, 287-303. Uno de dichos homólogos es el IL-17F, también denominado IL-24 y ML-1, que es idéntico en aproximadamente un 55% a la IL-17A y se cree que comparten los mismos receptores que la IL-17A (Kolls y Linden 2004, *Immunity*, 21, 467-476; Hymowitz, et al., 2001, *EMBO J.* 20(19), 5332-5341; Kuestner et al., 2007, *Journal of Immunology*, 179, 5462-5473).

Tanto la IL-17A como la IL-17F pueden formar proteínas homodiméricas y heterodiméricas, todas las cuales pueden ser activadas por células T CD4+ humanas (Wright et al., 2007, *J Biol Chem.* 282 (18), 13447-13455).

La IL-17 puede contribuir a una serie de enfermedades mediadas por respuestas inmunes anormales, tal como la artritis reumatoide y la inflamación de las vías aéreas, así como el rechazo a trasplante de órganos y la inmunidad antitumoral. Los inhibidores de actividad de IL-17 son bien conocidos en la técnica, por ejemplo, una proteína de fusión de ratón de IL-17R:Fc humana, una IL-17R soluble de ratón y un anticuerpo monoclonal anti-IL-17, han sido usados para demostrar la función de la IL-17 en varios modelos de artritis reumatoide (Lubberts et al., *J. Immunol.* 2001, 167, 1004-1013; Chabaud et al., *Arthritis Res.* 2001, 3, 168-177). Adicionalmente, se han usado anticuerpos policlonales neutralizantes para reducir la formación de adhesión peritoneal (Chung et al., 2002, *J. Exp. Med.*, 195, 1471-1478). Anticuerpos de IL-17A anti-humanos derivados de rata se describieron en el documento WO04/106377. Un anticuerpo anti-IL-17A humanizado con una afinidad de aproximadamente 220 pM se describió en el documento WO2006/054059. Un anticuerpo monoclonal anti-IL-17A completamente humano con una afinidad de aproximadamente 188 pM se describió en el documento WO2006/013107.

La solicitud internacional de patente WO2008/001063 describe un anticuerpo anti-IL-17A neutralizante de alta afinidad, el CA048_497. Otros anticuerpos neutralizantes que se unen a IL-17A han sido descritos en WO2007/070750 y WO2007/149032.

Los anticuerpos que se unen a IL-17F y a heterodímeros IL-17A/IL-17F se describieron en el documento WO2006/088833. Los anticuerpos que se unen específicamente al heterodímero IL-17A/IL-17F se describieron en el documento WO2005/010044.

El antagonismo de IL-17F ha sido asociado a la protección frente al asma (Kawaguchi et al., 2006, *J. Allergy Clin. Immunol.* 117(4): 795-801) y también se cree que la IL-17F desempeña un papel en la patología de la artritis (Lubberts 2003, *Current Opinion in Investigational Drugs*, 4 (5), 572-577).

Por consiguiente, los antagonistas duales de IL-17A e IL-17F pueden ser más efectivos que un único antagonista para tratar enfermedades mediadas por IL-17. Los anticuerpos que se unen a IL-17A e IL-17F se describieron en el documento WO2007/106769. La solicitud internacional de patente WO2008047134 (fecha de presentación internacional, 18 de octubre de 2007) describe un anticuerpo de alta afinidad, el CA048_496 que se une a IL-17A, IL-17F y al heterodímero IL-17A/F humanos, cuya secuencia se proporciona en la presente memoria más adelante.

La presente invención proporciona nuevos epítomos neutralizantes en la IL-17A y la IL-17F, y anticuerpos que se unen a dichos epítomos, y/o interaccionan con ellos.

En una realización, la presente invención proporciona un epítopo neutralizante de la IL-17A que comprende o que consiste en uno o más de los residuos seleccionados del grupo que consiste en SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73, ASP84, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131 de la IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

En una realización, el epítipo neutralizante proporcionado por la presente invención no comprende uno o más de los residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en ASP80, GLY81 y ASN82 de la IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

5 La presente invención también proporciona un nuevo epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) que comprende o que consiste en los residuos: SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127, VAL128.

10 La presente invención también proporciona un nuevo epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) que comprende o consiste en los siguientes residuos: SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, CYS72, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, SER90, VAL91, PRO92, GLN94, THR119, CYS122, VAL125, THR126, PRO127, VAL128.

En una realización, el epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) comprende además o consiste además en uno o más, por ejemplo, tres o cuatro, de los siguientes residuos: GLN71, CYS72, ILE86, ASN89, SER90 y VAL128, por ejemplo, de una primera cadena en un dímero de IL17f.

15 En una realización, el epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) comprende además o consiste además en un único residuo: ARG47 por ejemplo de una segunda cadena en un dímero de IL17f.

En una realización, el epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) comprende además o consiste además en uno o más, por ejemplo, tres o cuatro, de los siguientes residuos: ARG37, SER39, SER41 y ARG47 por ejemplo a partir de una segunda cadena en un dímero de IL17f.

20 En una realización, el epítipo neutralizante de la IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) comprende además o consiste además en uno o más, por ejemplo, tres o cuatro de los siguientes residuos: ASN33, GLN36, ARG37, SER39, SER41, ARG42, ILE44 y ARG47 por ejemplo a partir de una segunda cadena en un dímero de IL17f.

En una realización, el epítipo neutralizante de la IL-17F comprende además uno o más de los siguientes residuos: ILE129, HIS130, H131, V132, Q133.

25 En una realización se proporciona uno o más epítopos neutralizantes de IL-17F humana (SEQ ID NO: 22) que comprenden o constan cada uno de forma independiente de los aminoácidos V33 a V38, ambos inclusive, y/o del V87 al Q94, ambos inclusive.

En una realización el epítipo se define como los residuos de aminoácido localizados a 4 Å, 3,5 Å ó 3,0 Å de una entidad de unión, tal como un anticuerpo o fragmento.

30 También se proporcionan fragmentos de epítipo de IL-17A que pueden usarse, si se requiere, como inmunógenos para obtener anticuerpos neutralizantes que se unen al epítipo neutralizante de la IL-17A. Por ejemplo, los fragmentos de epítipo que comprenden uno o más de los residuos de aminoácido de IL-17A proporcionados antes en la presente memoria, pueden usarse como inmunógeno.

35 También se proporcionan fragmentos de epítipo de IL-17F que pueden usarse, si se requiere, como inmunógenos para obtener anticuerpos neutralizantes que se unen al epítipo neutralizante de la IL-17F. Por ejemplo, los fragmentos de epítipo que comprenden uno o más de los residuos de aminoácido de IL-17F proporcionados antes en la presente memoria, pueden usarse como inmunógeno.

40 La presente invención también proporciona anticuerpos que se unen a un epítipo neutralizante proporcionado por la presente invención. Cabe destacar que un anticuerpo puede interactuar directamente, p.ej., mediante unión directa.

45 Los residuos de los dominios variables de un anticuerpo son numerados convenientemente según un sistema diseñado por Kabat et al. Este sistema se establece en Kabat et al., 1987, en "Sequences of Proteins of Immunological Interest", Departamento de Salud y Servicios Humanos de EE.UU., NIH, EE.UU. (a partir de ahora, "Kabat et al. (ver anterior)"). En la presente especificación se usa dicho sistema de numeración, a menos que se indique lo contrario.

50 Las designaciones de residuos de Kabat siempre corresponden directamente con la numeración lineal de los residuos de aminoácido. La secuencia de aminoácidos lineal en cuestión puede contener menos aminoácidos o aminoácidos adicionales respecto a la numeración Kabat estricta, que corresponden a un acortamiento, inserción en un componente estructural, tanto estructura básica como región determinante de la complementariedad (CDR), de la estructura de dominio variable básica. Para un anticuerpo dado se puede determinar la numeración Kabat de residuos correcta a través del alineamiento de residuos de homología en la secuencia del anticuerpo con una secuencia numerada Kabat "estándar".

Las CDRs del dominio variable de cadena pesada están localizadas en los residuos 31-35 (CDR-H1), los residuos 50-65 (CDR-H2) y los residuos 95-102 (CDR-H3) según el sistema de numeración Kabat. Sin embargo, según

Chothia (Chothia, C. y Lesk, A. M. J. Mol. Biol., 196, 901-917 (1987)), el lazo equivalente a CDR-H1 se extiende desde el residuo 26 al residuo 32. Por tanto, 'CDR-H1', tal como se usa en la presente memoria, comprende los residuos 26 a 35, descritos mediante una combinación del sistema de numeración Kabat y la definición de lazo topológica de Chothia.

- 5 Las CDRs del dominio de cadena ligera están localizadas en los residuos 24-34 (CDR-L1), los residuos 50-56 (CDR-L2) y los residuos 89-97 (CDR-L3) según el sistema de numeración Kabat.

En una realización preferida, los anticuerpos de la presente invención se unen específicamente a IL-17A e IL-17F. Unión específica significa que los anticuerpos tienen una mayor afinidad por los polipéptidos de IL-17A e IL-17F (incluyendo el heterodímero IL-17A e IL-17F) que por otros polipéptidos. Preferiblemente, los polipéptidos de IL-17A e IL-17F son humanos. En una realización, el anticuerpo también se une a IL-17A y/o IL-17F de mono cynomolgus.

- 10 Cuando un anticuerpo de la presente invención se une a IL-17A humana y a IL-17F humana, el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para la CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para la CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3.

Tal como se usa en la presente memoria, el término "anticuerpo neutralizante" describe un anticuerpo que es capaz de neutralizar la actividad de señalización biológica de IL-17A y/o IL-17F y/o el heterodímero IL-17A/F, por ejemplo a través del bloqueo de la unión de IL-17A y/o IL-17F a uno o más de sus receptores, y a través del bloqueo de la unión del heterodímero IL-17A/IL-17F a uno o más de sus receptores. Cabe destacar que el término "neutralizante" tal como se usa en la presente memoria se refiere a una reducción de la actividad de señalización biológica que puede ser parcial o completa. Adicionalmente, cabe destacar que el grado de neutralización de la actividad de IL-17A e IL-17F por un anticuerpo que se une tanto a IL-17A como a IL-17F puede ser el mismo o diferente. En una realización, el grado de neutralización de la actividad del heterodímero IL-17A/IL-17F puede ser igual o diferente del grado de neutralización de la actividad de IL-17A o IL-17F.

- 25 En una realización, la invención proporciona anticuerpos que se unen y/o interaccionan con un epítipo neutralizante de IL-17A proporcionado por la presente invención.

En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A humana que se une a un epítipo de IL-17A humana que comprende o consiste en uno o más de los residuos seleccionados del grupo que consiste en SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73, ASP84, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131 de la IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

- 30 En una realización, un anticuerpo de la presente invención no se une a uno o más, p.ej., dos o más, de los residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en ASP80, GLY81 y ASN82 de la IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

En una realización, un anticuerpo de la presente invención no se une a uno o más residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en ASP80, GLY81, ASN82 y VAL83 de IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

- 35 En una realización, un anticuerpo de la presente invención no se une a ninguno de los siguientes residuos de aminoácido, ASP80, GLY81 y ASN82 de la IL-17A humana (SEQ ID NO: 21).

En una realización, la invención proporciona anticuerpos que se unen y/o interaccionan con un epítipo neutralizante de IL-17F proporcionado por la presente invención.

- 40 Por consiguiente, en una realización la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17F humana que se une a un epítipo de IL-17F humana que comprende uno o más, p.ej., tres o más, p.ej., cinco o más, p.ej., diez o más, de los siguientes residuos: SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127, VAL128 de la SEQ ID NO: 22 (IL-17F).

- 45 En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17F humana que se une a un epítipo de IL-17F humana dentro de una o más de las siguientes regiones:

(i) 39-42 (SER39, MET40, SER41, ARG42)

(ii) 47 (ARG47)

(iii) 53 (ASN53)

- 50 (iv) 72-75 (CYS72, ARG73, ASN74, LEU75)

(v) 83-92 (LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, SER90, VAL91, PRO92)(vi) 94 (GLN94)

(vii) 119 (THR119)

(viii) 122 (CYS122)

(ix) 125-128 (VAL125, THR126, PRO127, VAL128).

En una realización, un anticuerpo de la presente invención se une a IL-17A humana y a IL-17F humana.

5 En una realización, un anticuerpo de la presente invención se une al heterodímero IL-17A/F humano.

En una realización, un anticuerpo de la presente invención se une a IL-17A humana y al heterodímero IL-17A/F humano. En una realización, un anticuerpo de la presente invención se une a IL-17F humana y al heterodímero IL-17A/F humano. En una realización preferida, un anticuerpo de la presente invención se une a IL17A humana, a IL-17F humana y al heterodímero IL-17A/F humano.

10 En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A humana y a IL-17F humana que se une a un epítipo de IL-17A humana que comprende ASN52 y ASP84 de la SEQ ID NO: 21 (IL-17A) y opcionalmente uno o más residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, HIS54, ARG72, HIS73, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131, donde el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para la CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para la CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3.

20 En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A y a IL-17F humanas que se une a un epítipo de IL-17F humano que comprende uno o más de los residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127 y VAL128 de IL-17F humana (SEQ ID NO: 22), donde el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para la CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para la CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3.

25 En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A humana y a IL-17F humana que se une a un epítipo de IL-17F humana dentro de una o más de las siguientes regiones:

(i) 39-42 (SER39, MET40, SER41, ARG42)

(ii) 47 (ARG47)

30 (iii) 53 (ASN53)

(iv) 72-75 (CYS72, ARG73, ASN74, LEU75)

(v) 83-92 (LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, SER90, VAL91, PRO92)

(vi) 94 (GLN94)

(vii) 119 (THR119)

35 (viii) 122 (CYS122)

(ix) 125-128 (VAL125, THR126, PRO127, VAL128).

40 donde el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3.

45 En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A e IL-17F humanas que se une a un epítipo de IL-17A humana que comprende uno o más de los aminoácidos seleccionados del grupo que consiste en SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73, ASP84, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131 de IL-17A humana (SEQ ID NO: 21) y que se une a un epítipo de IL-17F humana que comprende uno o más de los residuos de aminoácido seleccionados del grupo que consiste en SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127 y VAL128 de IL-17F humana (SEQ ID NO: 22), donde el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para la CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para la CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la

SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3.

En una realización, un anticuerpo de la presente invención que es capaz de unirse tanto a IL-17A como a IL-17F es capaz de neutralizar la actividad de ambas isoformas de IL-17. En particular, en una realización un anticuerpo de la presente invención es capaz de unirse específicamente tanto a IL-17A como a IL-17F, es decir, el anticuerpo no se une a otras isoformas de IL-17. Preferiblemente, un anticuerpo de la presente invención también se une al heterodímero IL-17A/IL-17F. Preferiblemente, un anticuerpo de la presente invención neutraliza la actividad tanto de IL-17A como de IL-17F. En una realización, un anticuerpo de la presente invención también neutraliza la actividad del heterodímero IL-17A/IL-17F. Los anticuerpos proporcionados por este aspecto de la presente invención tienen, por tanto, la propiedad favorable de que pueden inhibir la actividad biológica tanto de IL-17A como de IL-17F. Por consiguiente, la presente invención también proporciona el uso de dichos anticuerpos en el tratamiento y/o la profilaxis de una enfermedad mediada por IL-17A ó IL-17F, o por ambas, tal como una enfermedad autoinmune o inflamatoria o cáncer.

Los polipéptidos de IL-17A ó IL-17F, o una mezcla de los dos, o células que expresen uno o ambos polipéptidos, pueden usarse para producir anticuerpos que reconozcan específicamente uno o ambos polipéptidos. Los polipéptidos de IL-17 (IL-17A e IL-17F) pueden ser polipéptidos "maduros" o fragmentos o derivados biológicamente activos de los mismos, que preferiblemente incluyen el sitio de unión a receptor. Preferiblemente, los polipéptidos de IL-17 son los polipéptidos maduros proporcionados en las SEQ ID NO: 21 y 22 para IL-17A e IL-17F, respectivamente. Los polipéptidos de IL-17 pueden prepararse mediante procesos bien conocidos en la técnica a partir de células hospedantes modificadas genéticamente que comprenden sistemas de expresión, o pueden recuperarse de fuentes biológicas naturales. En la presente solicitud, el término "polipéptidos" incluye péptidos, polipéptidos y proteínas. Éstos se usan de manera indistinta a menos que se especifique lo contrario. El polipéptido de IL-17 en algunos casos puede formar parte de una proteína más grande, tal como una proteína de fusión, por ejemplo fusionado a una etiqueta de afinidad. Se pueden obtener anticuerpos generados contra estos polipéptidos, cuando sea necesaria la inmunización de un animal, mediante la administración de los polipéptidos a un animal, preferiblemente un animal no humano, usando protocolos rutinarios bien conocidos, véase por ejemplo "Handbook of Experimental Immunology", D. M. Weir (ed.), Vol. 4, Blackwell Scientific Publishers, Oxford, Inglaterra, 1986). Se pueden inmunizar muchos animales de sangre caliente, tal como conejos, ratones, ratas, ovejas, vacas o cerdos. Sin embargo, generalmente se prefieren los ratones, los conejos, los cerdos y las ratas.

Los anticuerpos para uso en la presente invención incluyen anticuerpos completos y fragmentos o derivados de los mismos funcionalmente activos, y pueden ser, aunque sin limitación, anticuerpos monoclonales, multivalentes, multiespecíficos, completamente humanos, humanizados o quiméricos, anticuerpos de dominio, p.ej., VH, VL, VHH, anticuerpos de cadena sencilla, fragmentos Fab, fragmentos Fab' y F(ab')₂ y fragmentos de unión a antígeno de cualquiera de los anteriores. Otros fragmentos de anticuerpo incluyen los descritos en las Solicitudes Internacionales de Patente WO2005003169, WO2005003170 y WO2005003171. Los fragmentos de anticuerpo y los métodos para producirlos son bien conocidos en la técnica, véase por ejemplo Verma et al., 1998, Journal of Immunological Methods, 216, 165-181; Adair y Lawson, 2005. Therapeutic antibodies. Drug Design Reviews - Online 2(3): 209-217.

Los anticuerpos para uso en la presente invención incluyen moléculas de inmunoglobulina y porciones inmunológicamente activas de moléculas de inmunoglobulina, es decir, moléculas que contienen un sitio de unión a antígeno que se une específicamente a un antígeno. Las moléculas de inmunoglobulina de la invención pueden ser de cualquier clase (p.ej., IgG, IgE, IgM, IgD e IgA) o subclase de molécula de inmunoglobulina. Los dominios de región constante de la molécula de anticuerpo de la presente invención, si los hay, pueden seleccionarse en relación a la función propuesta para la molécula de anticuerpo, y en particular las funciones efectoras que puedan requerirse. Por ejemplo, los dominios de región constante pueden ser dominios de IgA, IgD, IgE, IgG o IgM humanas. En particular, se pueden usar los dominios de región constante de IgG humana, especialmente los isotipos IgG1 e IgG3 cuando la molécula de anticuerpo se destina a usos terapéuticos y se requieren funciones efectoras. Alternativamente, se pueden usar los isotipos IgG2 e IgG4 cuando la molécula de anticuerpo se destine a propósitos terapéuticos y no se requieran funciones efectoras de anticuerpo, p.ej., simplemente para bloquear la actividad de IL-17. Cabe destacar que también se pueden usar variantes de secuencia de dichos dominios de región constante. Por ejemplo, se pueden usar moléculas de IgG4 en las que la serina de la posición 241 ha sido cambiada por prolina, tal como se describe en Angal et al., Molecular Immunology, 1993, 30 (1), 105-108. El dominio constante de IgG4 que comprende dicho cambio es particularmente preferido. Los especialistas en la técnica también comprenden que los anticuerpos pueden verse sometidos a una serie de modificaciones post-traduccionales. El tipo y el grado de dichas modificaciones a menudo dependen de la línea celular hospedante utilizada para expresar el anticuerpo, así como de las condiciones de cultivo. Dichas modificaciones pueden incluir variaciones en la glicosilación, la oxidación de metionina, la formación de dicetopiperacina, la isomerización de aspartato y la desamidación de asparagina. Una modificación frecuente es la pérdida de un residuo básico carboxi-terminal (tal como lisina o arginina) debido a la acción de carboxipeptidasas (tal como se describe en Harris, R.J. Journal of Chromatography 705: 129-134, 1995).

Los anticuerpos monoclonales pueden prepararse empleando cualquier método conocido en la técnica, tal como la técnica de hidridoma (Kohler & Milstein, 1975, Nature, 256: 495-497), la técnica de trioma, la técnica de hibridoma de

célula B humana (Kozbor et al., 1983, *Immunology Today*, 4: 72) y la técnica de hibridoma-EBV (Cole et al., *Monoclonal Antibodies and Cancer Therapy*, pág. 77-96, Alan R Liss, Inc., 1985).

Los anticuerpos para uso en la invención también pueden ser generados usando métodos de anticuerpo de linfocito sencillo mediante clonación y expresión de ADNcs de región variable de inmunoglobulina generados a partir de linfocitos sencillos seleccionados para la producción de anticuerpos específicos mediante, por ejemplo, los métodos descritos por Babcook, J. et al., 1996, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 93(15): 7843-78481; WO92/02551; WO2004/051268 y la Solicitud de Patente Internacional número WO2004/106377.

Los anticuerpos humanizados son moléculas de anticuerpo procedentes de especies no humanas que tienen una o más regiones determinantes de la complementariedad (CDRs) de especies no humanas y una región estructural de una molécula de inmunoglobulina humana (véase, p.ej. la Patente de EE.UU. nº 5.585.089; y la Solicitud de Patente Internacional WO91/09967).

Los anticuerpos quiméricos son aquellos anticuerpos codificados por genes de inmunoglobulina que han sido modificados genéticamente de tal modo que los genes de cadena ligera y pesada están compuestos por segmentos de genes de inmunoglobulina pertenecientes a diferentes especies. Estos anticuerpos quiméricos probablemente son menos antigénicos. Se pueden preparar anticuerpos bivalentes empleando métodos conocidos en la técnica (Milstein et al., 1983, *Nature* 305: 537-539; WO 93/08829, Trautnecker et al., 1991, *EMBO J.* 10: 3655-3659). Los anticuerpos multivalentes pueden comprender múltiples especificidades o pueden ser monoespecíficos (véase por ejemplo los documentos WO 92/22853 y WO05/113605).

Los anticuerpos para uso en la presente invención también pueden generarse mediante diversos métodos de presentación de fagos conocidos en la técnica y que incluyen los descritos por Brinkman et al. (en *J. Immunol. Methods*, 1995, 182: 41-50), Ames et al. (*J. Immunol. Methods*, 1995, 184: 177-186), Kettleborough et al. (*Eur. J. Immunol.* 1994, 24: 952-958), Persic et al. (*Gene*, 1997 187: 9-18), Burton et al. (*Advances in Immunology*, 1994, 57: 191-280) y las solicitudes internacionales de patente WO 90/02809; WO 91/10737; WO 92/01047; WO 92/18619; WO 93/11236; WO 95/15982; WO 95/20401; y las patentes de EE.UU. 5.698.426; 5.223.409; 5.403.484; 5.580.717; 5.427.908; 5.750.753; 5.821.047; 5.571.698; 5.427.908; 5.516.637; 5.780.225; 5.658.727; 5.733.743 y 5.969.108. También se pueden adaptar técnicas de producción de anticuerpos de cadena sencilla, como las descritas en la patente de EE.UU. nº 4.946.778 para producir anticuerpos de cadena sencilla que se unan a IL-17A e IL-17F. Asimismo, se pueden usar ratones transgénicos, u otros organismos transgénicos, que incluyen a otros mamíferos transgénicos, para expresar anticuerpos humanizados.

Los anticuerpos completamente humanos son aquellos anticuerpos en los que las regiones variables y las regiones constantes (si las hay) tanto de las cadenas pesadas como de las ligeras son todas de origen humano, o sustancialmente idénticas a secuencias de origen humano, no necesariamente del mismo anticuerpo. Los ejemplos de anticuerpos completamente humanos pueden incluir anticuerpos producidos por ejemplo a través de los métodos de presentación de fagos descritos antes, y anticuerpos producidos por ratones en los que los genes de región variable y constante de inmunoglobulina de ratón han sido reemplazados por sus contrapartidas humanas, p.ej., tal como se describe en términos generales en el documento EP0546073 B1, en las patentes de EE.UU. 5.545.806, 5.569.825, 5.625.126, 5.633.425, 5.661.016 y 5.770.429, y en los documentos EP 0438474 B1 y EP0463151 B1.

Se puede usar cualquier método conocido en la técnica para determinar los residuos ligados por un anticuerpo proporcionado por la presente invención, p.ej., intercambio hidrógeno-deuterio, mutagénesis sito-dirigida, espectrometría de masas, RMN y cristalografía de rayos X. Véanse, por ejemplo, los métodos descritos en la solicitud de patente internacional WO2007/149032.

La región específica o epítipo del polipéptido de IL-17A humana y/o la región específica o epítipo del polipéptido de IL-17F humana y/o la región específica o epítipo del heterodímero IL-17A/F humano puede identificarse mediante cualquier método de mapeo de epítopos conocido en la técnica en combinación con uno cualquiera de los anticuerpos proporcionados por la presente invención. Los ejemplos de dichos métodos incluyen péptidos de escrutinio de longitudes variables derivados de IL-17A e IL-17F para unirse al anticuerpo de la presente invención con el fragmento más pequeño que pueda unirse específicamente al anticuerpo que contiene la secuencia del epítipo reconocido por el anticuerpo. Los péptidos de IL-17 pueden producirse sintéticamente o mediante digestión proteolítica del polipéptido de IL-17 apropiado. Los péptidos que se unen al anticuerpo pueden identificarse, por ejemplo, mediante análisis de espectrometría de masas. En otro ejemplo, se puede usar espectroscopía de RMN, tal como se describe en los Ejemplos de la presente memoria, para identificar residuos que interaccionen con un anticuerpo de la presente invención.

Las moléculas de anticuerpo neutralizante proporcionadas por la presente invención preferiblemente presentan una elevada afinidad de unión, preferiblemente nanomolar, incluso más preferiblemente picomolar. Cabe destacar que la afinidad de unión de un anticuerpo de acuerdo a la presente invención por IL-17A humana puede ser diferente de la afinidad de unión del mismo anticuerpo por IL-17F y/o el heterodímero IL-17A/F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17A que es superior a su afinidad por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17A que es al menos 10 veces más grande que su afinidad de unión por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención

tiene una afinidad por IL-17A que es al menos 50 veces más grande que su afinidad de unión por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17A que es al menos 100 veces más grande que su afinidad de unión por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17F que es superior a su afinidad por IL-17A. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17A que es igual a su afinidad por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad picomolar por IL-17A y una afinidad nanomolar por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad nanomolar por IL-17F y una afinidad picomolar por IL-17A. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad nanomolar tanto por IL-17A como por IL-17F. En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad picomolar tanto por IL-17A como por IL-17F.

Preferiblemente, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17A mejor que 10 nM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17A mejor que 500 pM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17A mejor que 100 pM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17A mejor que 20 pM.

Preferiblemente, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17F mejor que 10 nM. En una realización, el anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17F mejor que 2 nM. En una realización, el anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad por IL-17F mejor que 500 pM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17F mejor que 100 pM.

Preferiblemente, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por el heterodímero IL-17A/F mejor que 10 nM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por el heterodímero IL-17A/F mejor que 500 pM. En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por el heterodímero IL-17A/F mejor que 100 pM.

En una realización, la molécula de anticuerpo de la presente invención tiene una afinidad de unión por IL-17F de cynomolgus mejor que 2 nM.

Cabe destacar que la afinidad de anticuerpos proporcionados por la presente invención puede alterarse usando cualquier método adecuado conocido en la técnica. Por lo tanto, la presente invención también se refiere a variantes de las moléculas de anticuerpo de la presente invención, que presentan una afinidad mejorada por IL-17A y/o IL-17F. Dichas variantes se pueden obtener a través de una serie de protocolos de maduración de afinidad que incluyen la mutación de las CDRs (Yang et al., J. Mol. Biol., 254, 392-403, 1995), el barajado de cadenas (Marks et al., Bio/Technology, 10, 779-783, 1992), el uso de cepas mutadoras de *E. coli* (Low et al., J. Mol. Biol., 250, 359-368, 1996), el barajado de ADN (Patten et al., Curr. Opin. Biotechnol., 8, 724-733, 1997), la presentación de fagos (Thompson et al., J. Mol. Biol., 256, 77-88, 1996) y la PCR sexual (Cramer et al., Nature, 391, 288-291, 1998). Vaughan et al. (*ver anterior*) discuten estos métodos de maduración de afinidad.

En una realización, las moléculas de anticuerpo de la presente invención neutralizan la actividad de IL-17A e IL-17F, por ejemplo, en los ensayos *in vitro* descritos en los Ejemplos. En una realización, la presente invención proporciona un anticuerpo neutralizante que tiene especificidad por IL-17A e IL-17F humanas, que es capaz de inhibir la actividad de 0,8 nM de IL-17A humana en un 50% a una concentración inferior a 5 nM, y la actividad de 4,2 nM de IL-17F en un 50% a una concentración inferior a 12 nM, siendo medida dicha actividad inhibidora a través de la liberación de IL-6 inducida por IL-17A ó IL-17F en células Hela. En una realización, la concentración de anticuerpo que inhibe IL-17A en un 50% es inferior a 3 nM. En una realización, la concentración de anticuerpo que inhibe IL-17F en un 50% es inferior a 11 nM. En una realización, la IL-17A humana y la IL-17F humanas utilizadas en el ensayo son IL-17A e IL-17F humanas recombinantes. En una realización, el anticuerpo neutralizante es un anticuerpo humanizado o completamente humano.

Si se desea, un anticuerpo para uso en la presente invención puede conjugarse con una o más moléculas efectoras. Cabe destacar que la molécula efectora puede comprender una única molécula efectora o dos o más de dichas moléculas ligadas de tal modo que forman un único grupo funcional que puede unirse a los anticuerpos de la presente invención. Cuando se desea obtener un fragmento de anticuerpo ligado a una molécula efectora, éste se puede preparar mediante procedimientos químicos o de recombinación de ADN estándares de ADN en los que el fragmento de anticuerpo se liga directamente o a través de un agente de acoplamiento a la molécula efectora. Las técnicas para conjugar dichas moléculas efectoras a anticuerpo son bien conocidas en la técnica (véase, Hellstrom et al., Controlled Drug Delivery, 2ª Ed., Robinson et al., eds., 1987, pág. 623-53; Thorpe et al., 1982, Immunol. Rev., 62: 119-58 and Dubowchik et al., 1999, Pharmacology and Therapeutics, 83, 67-123). Los procedimientos químicos concretos incluyen, por ejemplo, los descritos en los documentos WO 93/06231, WO 92/22583, WO 89/00195, WO 89/01476 y WO03031581. Alternativamente, cuando la molécula efectora es una proteína o polipéptido, el enlace puede obtenerse usando procedimientos de ADN recombinante, por ejemplo tal como se describe en los documentos WO 86/01533 y EP0392745.

El término molécula efectora tal como se usa en la presente memoria incluye, por ejemplo, agentes antineoplásicos, fármacos, toxinas, proteínas biológicamente activas, por ejemplo enzimas, otros anticuerpos o fragmentos de anticuerpo, polímeros sintéticos o naturales, ácidos nucleicos y fragmentos de los mismos, p.ej., ADN, ARN y fragmentos de los mismos, radionúclidos, particularmente radioyoduro, radioisótopos, metales quelados, nanopartículas y grupos indicadores tales como compuestos fluorescentes o compuestos que pueden ser detectados mediante espectroscopía de RMN o ESR.

Los ejemplos de moléculas efectoras pueden incluir citotoxinas o agentes citotóxicos que incluyen cualquier agente que sea perjudicial para las células (p.ej., que las mate). Los ejemplos incluyen combrestatinas, dolastatinas, epotilonas, estaurosporina, maitansinoides, espongistatinas, rizoxina, halicondrinas, roridinas, hemiasterlinas, taxol, citocalasina B, gramicidina D, bromuro de etidio, emetina, mitomicina, etoposide, tenoposide, vincristina, vinblastina, colquicina, doxorubicina, daunorubicina, dihidroxi antracina diona, mitoxantrona, mitramicina, actinomicina D, 1-deshidrotestosterona, glucocorticoides, procaina, tetracaina, lidocaína, propranolol y puomicina, y análogos u homólogos de los mismos.

Las moléculas efectoras también incluyen, aunque sin limitación, antimetabolitos (p.ej., metotrexato, 6-mercaptopurina, 6-tioguanina, citarabina, 5-fluorouracil decarbacina), agentes alquilantes (p.ej., mecloretamina, tioepa clorambucilo, melfalán, carmustina (BSNU) u lomustina (CCNU), ciclotosfamida, busulfán, dibromomanitol, estreptozotocina, mitomicina C y cis-diclorodiamina platino (II) (DDP) cisplatino), antraciclinas (p.ej., daunorubicina (anteriormente daunomicina) y doxorubicina), antibióticos (p.ej., dactinomicina (anteriormente actinomicina), bleomicina, mitramicina, antramicina (AMC), caliqueamicinas o duocarmicinas), y agentes anti-mitóticos (p.ej., vincristina y vinblastina).

Otras moléculas efectoras pueden incluir radionucleidos quelados tales como ^{111}In y ^{90}Y , Lu^{177} , Bismuto ^{213} , Californio ^{252} , Iridio ^{192} y Wolframio ^{188} /Renio ^{188} , o fármacos tales como, aunque sin limitación, alquilfosfocolinas, inhibidores de topoisomerasa I, taxoides y suramina.

Otras moléculas efectoras incluyen proteínas, péptidos y enzimas. Las enzimas de interés incluyen, aunque sin limitación, enzimas proteolíticas, hidrolasas, liasas, isomerasas, transferasas. Las proteínas, polipéptidos y péptidos de interés incluyen, aunque sin limitación, inmunoglobulinas, toxinas tales como abrina, ricina A, exotoxina de pseudomonas, o toxina de la difteria, una proteína tal como la insulina, factor de necrosis tumoral, interferón α , interferón β , factor de crecimiento de nervio, factor de crecimiento derivado de plaqueta o activador de plasminógeno de tejido, un agente trombótico o un agente anti-trombótico, p.ej., angioestatina o endoestatina, o un modificador de la respuesta biológica tal como una linfoquina, interleucina 1 (IL-1), interleucina 2 (IL-2), interleucina 6 (IL-6), factor estimulante de colonia de macrófago granulocito (GM-CSF), factor estimulante de colonia de granulocito (G-CSF), factor de crecimiento de nervio (NGF) u otro factor de crecimiento e inmunoglobulinas.

Otras moléculas efectoras pueden incluir sustancias detectables útiles por ejemplo en diagnosis. Los ejemplos de sustancias detectables incluyen varias enzimas, grupos protésicos, materiales fluorescentes, materiales luminiscentes, materiales bioluminiscentes, núclidos radioactivos, metales emisores de positrones (para uso en tomografía de emisión de positrones), e iones metálicos paramagnéticos no radiactivos. Véase de forma general la Patente de EE.UU. n° 4.741.900 para iones metálicos que pueden conjugarse con anticuerpos para uso como elementos diagnósticos. Las enzimas adecuadas incluyen peroxidasa de rábano, fosfatasa alcalina, beta-galactosidasa o acetilcolinaesterasa; los grupos protésicos adecuados incluyen estreptavidina, avidina y biotina; los materiales fluorescentes adecuados incluyen umbeliferona, fluoresceína, isotiocianato de fluoresceína, rodamina, diclorotriazinilamina fluoresceína, cloruro de dansilo y ficococitritina; los materiales luminiscentes adecuados incluyen luminol; los materiales bioluminiscentes adecuados incluyen luciferasa, luciferina y acuorina; y los nucleidos radiactivos adecuados incluyen ^{125}I , ^{131}I , ^{111}In y ^{99}Tc .

En otro ejemplo, la molécula efectora puede aumentar la vida media del anticuerpo *in vivo*, y/o reducir la inmunogenicidad del anticuerpo y/o potenciar la administración de un anticuerpo a través de la barrera epitelial al sistema inmune. Los ejemplos de moléculas efectoras adecuadas de este tipo incluyen polímeros, albúmina, proteínas de unión a albúmina o compuestos de unión a albúmina tales como los descritos en el documento WO05/117984.

Cuando la molécula efectora es un polímero, en general, puede ser un polímero sintético o un polímero natural, por ejemplo un polímero de polialquileno, polialquilenilo o polioxialquileno de cadena lineal o ramificada sustituido opcionalmente, o un polisacárido ramificado o sin ramificar, p.ej., un homo- o hetero-polisacárido.

Los sustituyentes particulares que pueden estar presentes en los polímeros sintéticos mencionados antes incluyen uno o más grupos hidroxilo, metilo o metoxi.

Los ejemplos particulares de polímeros sintéticos incluyen poli(etilenglicol), poli(propilenglicol), poli(vinilalcohol) sustituidos opcionalmente, de cadena lineal o ramificada, o derivados de los mismos, especialmente poli(etilenglicol) sustituido opcionalmente, tal como metoxipoli (etilenglicol) o sus derivados.

Los polímeros naturales incluyen lactosa, amilosa, dextrano, glucógeno, o derivados de los mismos.

"Derivados" tal como se usa en la presente memoria pretende incluir derivados reactivos, por ejemplo grupos reactivos selectivos de tiol tales como maleimidas y similares. El grupo reactivo puede estar unido directamente o a través un segmento ligando al polímero. Cabe destacar que el residuo de dicho grupo en algunos casos formará parte del producto, como grupo de unión entre el fragmento de anticuerpo y el polímero.

5 El tamaño del polímero se puede variar según se desee, pero generalmente se encontrará en un rango de peso molecular medio de 500 Da a 50000 Da, preferiblemente entre 5000 y 40000 Da y más preferiblemente entre 20000 y 40000 Da. En particular, el tamaño del polímero se puede seleccionar en base al uso pretendido para el producto, por ejemplo, la capacidad para localizarse en determinados tejidos tales como tumores o extender la vida media en circulación (para una revisión, véase Chapman, 2002, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 54, 531-545). Por tanto, por
10 ejemplo, cuando el producto se destine a abandonar la circulación y penetrar en un tejido, por ejemplo para uso en el tratamiento de un tumor, puede ser ventajoso usar un polímero de bajo peso molecular, por ejemplo con un peso molecular en torno a 5000 Da. Para aplicaciones en las que el producto permanece en circulación, puede ser ventajoso usar un peso molecular de polímero mayor, por ejemplo que tenga un peso molecular en el rango de 20000 Da a 40000 Da.

15 Los polímeros particularmente preferidos incluyen un polímero de polialquileno, tal como un poli(etilenglicol) o, especialmente, un metoxipoli(etilenglicol) o un derivado del mismo, y especialmente con un peso molecular en el rango entre aproximadamente 15000 Da y aproximadamente 40000 Da.

En un ejemplo, los anticuerpos para uso en la presente invención están unidos a grupos funcionales de poli(etilenglicol) (PEG). En un ejemplo particular, el anticuerpo es un fragmento de anticuerpo y las moléculas de
20 PEG pueden estar unidas a través de cualquier cadena lateral de aminoácido disponible o grupo funcional de aminoácido terminal disponible localizado en el fragmento de anticuerpo, por ejemplo cualquier grupo libre de tipo amino, imino, tiol, hidroxilo o carboxilo. Dichos aminoácidos pueden existir de forma natural en el fragmento de anticuerpo o pueden diseñarse en el fragmento usando métodos de ADN recombinante (véase por ejemplo la patente de EE.UU. nº 5.219.996; la patente de EE.UU. nº 5.667.425; la solicitud internacional de patente
25 WO98/25971). En un ejemplo, la molécula de anticuerpo de la presente invención es un fragmento Fab modificado en el que la modificación es la adición al extremo C-terminal de su cadena pesada de uno o más aminoácidos para permitir la unión de una molécula efectora. Preferiblemente, los aminoácidos adicionales forman una región de bisagra modificada que contiene uno o más residuos de cisteína a los que se puede unir la molécula efectora. Se pueden usar múltiples sitios para unir dos o más moléculas de PEG.

30 Preferiblemente, las moléculas de PEG se unen covalentemente a través de un grupo tiol de al menos un residuo de cisteína localizado en el fragmento de anticuerpo. Cada molécula de polímero unida al fragmento de anticuerpo modificado puede estar ligada covalentemente al átomo de azufre de un residuo de cisteína localizado en el fragmento. El enlace covalente generalmente será un enlace de disulfuro o, en particular, un enlace azufre-carbono. Cuando se usa un grupo tiol como punto de unión se pueden usar moléculas efectoras activadas apropiadamente,
35 por ejemplo derivados selectivos para tiol tales como maleimidas y los derivados de cisteína. Se puede usar un polímero activado como material de partida en la preparación de fragmentos de anticuerpo modificados con polímero como los descritos anteriormente. El polímero activado puede ser cualquier polímero que contenga un grupo reactivo tiol tal como un éster o ácido α -halocarboxílico, p.ej. yodoacetamida, una imida, p.ej., maleimida, una vinil sulfona o un disulfuro. Dichos materiales de partida pueden obtenerse comercialmente (por ejemplo en Nektar, anteriormente
40 Shearwater Polymers Inc., Huntsville, AL, EE.UU.) o pueden prepararse a partir de materiales de partida disponibles comercialmente usando procedimientos químicos convencionales. Moléculas de PEG particulares incluyen 20K metoxi-PEG-amina (obtenible en Nektar, anteriormente Shearwater; Rapp Polymere; y SunBio) y M-PEG-SPA (obtenible en Nektar, anteriormente Shearwater).

En una realización, el anticuerpo es un fragmento Fab modificado que está PEGilado, es decir, que tiene un PEG
45 (poli(etilenglicol)) unido covalentemente, p.ej., según el método descrito en el documento EP 0948544 [véase también "Poly(ethyleneglycol) Chemistry, Biotechnical and Biomedical Applications", 1992, J. Milton Harris (ed), Plenum Press, Nueva York, "Poly(ethyleneglycol) Chemistry and Biological Applications", 1997, J. Milton Harris y S. Zalipsky (eds.), American Chemical Society, Washington DC y "Bioconjugation Protein Coupling Techniques for the Biomedical Sciences", 1998, M. Aslam y A. Dent, Grove Publishers, Nueva York; Chapman, A. 2002, *Advanced Drug
50 Delivery Reviews* 2002, 54: 531-545]. En un ejemplo, el PEG se une a una cisteína en la región de bisagra. En un ejemplo, un fragmento Fab modificado con PEG tiene un grupo maleimida unido covalentemente a un único grupo tiol en una región de bisagra modificada. Se puede unir covalentemente un residuo de lisina a un grupo maleimida, y cada uno de los grupos amina del residuo de lisina se puede unir a un polímero de metoxipoli(etilenglicol) que tenga un peso molecular de aproximadamente 20.000 Da. Por lo tanto, el peso molecular total del PEG unido al fragmento
55 de Fab puede ser aproximadamente de 40.000 Da.

En una realización, una molécula de anticuerpo neutralizante de la presente invención es un fragmento Fab modificado que tiene en el extremo C-terminal de su cadena pesada una región de bisagra modificada que contiene al menos un residuo de cisteína al cual se une la molécula efectora. Preferiblemente, la molécula efectora es PEG y se ha unido mediante métodos descritos en los documentos WO98/25971 y WO2004072116, en los que un grupo
60 lisil-maleimida se une a un residuo de cisteína del extremo C-terminal de la cadena pesada, y cada grupo amino del

residuo de lisilo tiene unido un residuo de metoxipoli(etilenglicol) con un peso molecular de aproximadamente 20.000 Da. El peso molecular total del PEG unido al anticuerpo, por tanto, es de aproximadamente 40.000 Da.

En otro ejemplo, las moléculas efectoras pueden unirse a fragmentos de anticuerpo usando los métodos descritos en las solicitudes internacionales de patente WO2005/003169, WO2005/003170 y WO2005/003171.

5 La presente invención también proporciona una secuencia de ADN aislada que codifica la(s) cadena(s) pesada y/o ligera de una molécula de anticuerpo de la presente invención. Preferiblemente, la secuencia de ADN codifica la cadena pesada o la cadena ligera de una molécula de anticuerpo de la presente invención. La secuencia de ADN de la presente invención puede comprender ADN sintético, por ejemplo producido mediante procesamiento químico, ADNc, ADN genómico o cualquier combinación de los mismos.

10 Las secuencias de ADN que codifican una molécula de anticuerpo de la presente invención pueden obtenerse mediante métodos bien conocidos por los especialistas en la técnica. Por ejemplo, las secuencias de ADN que codifican para una parte o para la totalidad de las cadenas pesada y ligera del anticuerpo pueden sintetizarse según se desee a partir de determinadas secuencias de ADN, o en base a las correspondientes secuencias de aminoácidos.

15 El ADN que codifica para secuencias estructurales aceptoras está ampliamente disponible para los especialistas en la técnica, y se puede sintetizar fácilmente en base a sus secuencias de aminoácidos conocidas.

Se pueden usar técnicas estándar de biología molecular para preparar secuencias de ADN que codifican para la molécula de anticuerpo de la presente invención. Las secuencias de ADN deseadas pueden sintetizarse completamente o parcialmente usando técnicas de síntesis de oligonucleótidos. Se pueden usar técnicas de mutagénesis sito-dirigida y de reacción en cadena de polimerasa (PCR), según sea apropiado.

20 La presente invención también se refiere a un vector de clonación o de expresión que comprende una o más secuencias de ADN de la presente invención. Por consiguiente, se proporciona un vector de clonación o de expresión que comprende una o más secuencias de ADN que codifican un anticuerpo de la presente invención. Preferiblemente, el vector de clonación o de expresión comprende dos secuencias de ADN, que codifican la cadena ligera y la cadena pesada de la molécula de anticuerpo de la presente invención, respectivamente.

25 Los métodos generales mediante los cuales se pueden construir los vectores, los métodos de transfección y los métodos de cultivo son bien conocidos por los especialistas en la técnica. A este respecto, se hace referencia a "Current Protocols in Molecular Biology", 1999, F. M. Ausubel (ed), Wiley Interscience, Nueva York y al "Maniatis Manual" producido por Cold Spring Harbor Publishing.

30 También se proporciona una célula hospedante que comprende uno o más vectores de clonación o expresión que comprenden una o más secuencias de ADN que codifican un anticuerpo de la presente invención. Se puede usar cualquier célula hospedante/sistema de vector adecuado para la expresión de las secuencias de ADN que codifican la molécula de anticuerpo de la presente invención. Se pueden usar sistemas bacterianos, por ejemplo *E. coli*, y otros sistemas microbianos, o también se pueden usar sistemas de expresión de células hospedantes eucarióticas, por ejemplo de mamífero. Las células hospedantes de mamífero adecuadas incluyen las células CHO, de mieloma o de hibridoma.

35 La presente invención también proporciona un proceso para la producción de una molécula de anticuerpo según la presente invención que comprende cultivar una célula hospedante que contenga un vector de la presente invención en las condiciones adecuadas que conduzcan a la expresión de proteína a partir de ADN que codifica la molécula de anticuerpo de la presente invención, y aislar la molécula de anticuerpo.

40 La molécula de anticuerpo puede comprender solo un polipéptido de cadena pesada o ligera, en cuyo caso solo es necesario usar una secuencia codificadora de polipéptido de cadena pesada o ligera para transfectar las células hospedantes. Para la producción de productos que comprenden tanto cadenas pesadas como ligeras, la línea celular puede ser transfectada con dos vectores, un primer vector que codifica un polipéptido de cadena ligera y un segundo vector que codifica un polipéptido de cadena pesada. Alternativamente, se puede usar un único vector, vector que incluye secuencias que codifican polipéptidos de cadena ligera y de cadena pesada.

45 Puesto que los anticuerpos de la presente invención son útiles en el tratamiento y/o la profilaxis de una afección patológica, la presente invención también proporciona una composición farmacéutica o diagnóstica que comprende una molécula de anticuerpo de la presente invención en combinación con uno o más excipientes, diluyentes o vehículos farmacéuticamente aceptables. Por consiguiente, se proporciona el uso de un anticuerpo según la presente invención para la fabricación de un medicamento. Habitualmente, la composición se suministrará como parte de una composición farmacéutica esterilizada que normalmente incluirá un vehículo farmacéuticamente aceptable. Una composición farmacéutica de la presente invención adicionalmente puede comprender un adyuvante farmacéuticamente aceptable.

La presente invención también proporciona un proceso para la preparación de una composición farmacéutica o diagnóstica que comprende añadir y mezclar la molécula de anticuerpo de la presente invención junto con uno o más excipientes, diluyentes o vehículos farmacéuticamente aceptables.

5 La molécula de anticuerpo puede ser el único ingrediente activo de la composición farmacéutica o diagnóstica o puede estar acompañada de otros ingredientes activos que incluyen otros ingredientes de anticuerpo, por ejemplo anticuerpos anti-TNF, anti-IL-1 β , anti-células T, anti-IFN γ o anti-LPS, o ingredientes que no sean anticuerpos tales como xantinas.

10 Las composiciones farmacéuticas preferiblemente comprenden una cantidad terapéuticamente efectiva del anticuerpo de la invención. La expresión "cantidad terapéuticamente efectiva" tal como se usa en la presente memoria se refiere a una cantidad de un agente terapéutico necesaria para tratar, aliviar o prevenir una enfermedad o afección diana, o para exhibir un efecto terapéutico o preventivo detectable. Para cualquier anticuerpo, la cantidad terapéuticamente efectiva puede estimarse inicialmente a través de ensayos de cultivo o en modelos de animales, habitualmente de roedores, conejos, perros, cerdos o primates. El modelo de animal también se puede usar para determinar el rango de concentraciones apropiado y la ruta de administración apropiada. A continuación dicha información puede usarse para determinar dosis y rutas que tengan éxito para administración en humanos.

15 La cantidad terapéuticamente precisa para un sujeto humano dependerá de la gravedad del estado de enfermedad, de la salud general del sujeto, de la edad, el peso y el género del sujeto, de la dieta, del tiempo y frecuencia de administración, de combinación(es) de fármacos, de sensibilidades a reacción y de la tolerancia/respuesta a la terapia. Dicha cantidad puede determinarse mediante experimentación rutinaria y se encuentra dentro del criterio del médico. De forma general, una cantidad terapéuticamente efectiva estará entre 0,01 mg/kg y 50 mg/kg, preferiblemente entre 0,1 mg/kg y 20 mg/kg. Las composiciones farmacéuticas pueden presentarse de forma conveniente en formas de dosis unitarias que contienen una cantidad predeterminada de un agente activo de la invención por dosis.

20 Las composiciones pueden administrarse individualmente a un paciente o pueden administrarse en combinación (p.ej., simultáneamente, secuencialmente o por separado) con otros agentes, fármacos u hormonas.

La dosis a la que se administra la molécula de anticuerpo de la presente invención depende de la naturaleza de la afección a tratar, del grado de inflamación presente y de si la molécula de anticuerpo está siendo usada profilácticamente o para tratar una afección existente.

30 La frecuencia de dosis dependerá de la vida media de la molécula de anticuerpo y de la duración de su efecto. Si la molécula de anticuerpo tiene una vida media corta (p.ej., de 2 a 10 horas) puede ser necesario suministrar una o más dosis al día. Alternativamente, si la molécula de anticuerpo tiene una vida media larga (p.ej., de 2 a 15 días) puede que solo sea necesario administrar una dosis una vez al día, una vez a la semana o incluso una vez cada 1 ó 2 meses.

35 El vehículo farmacéuticamente aceptable no debería inducir por sí mismo la producción de anticuerpo dañinos para el individuo que recibe la composición y no debería ser tóxico. Los vehículos adecuados pueden ser macromoléculas grandes, metabolizadas lentamente, tales como proteínas, polipéptidos, liposomas, polisacáridos, ácidos polilácticos, ácidos poliglicólicos, aminoácidos poliméricos, copolímeros de aminoácidos y partículas de virus inactivas.

40 Se pueden usar sales farmacéuticamente aceptables, por ejemplo sales de ácidos minerales, tales como hidrocloruros, hidrobromuros, fosfatos y sulfatos, o sales de ácidos orgánicos, tales como acetatos, propionatos, malonatos y benzoatos.

45 Los vehículos farmacéuticamente aceptables de composiciones terapéuticas pueden contener adicionalmente líquidos tales como agua, salino, glicerol y etanol. Adicionalmente, en dichas composiciones puede haber presentes sustancias auxiliares, tales como agentes humectantes o emulsionantes o sustancias tamponantes de pH. Dichos vehículos permiten que las composiciones farmacéuticas se formulen como comprimidos, píldoras, grageas, cápsulas, líquidos, geles, jarabes y suspensiones, para ingestión por parte del paciente.

50 Las formas preferidas para administración incluyen formas adecuadas para administración parenteral, p.ej., mediante inyección o infusión, por ejemplo mediante inyección de bolo o infusión continua. Cuando el producto es para inyección o infusión, puede adoptar la forma de una suspensión, una disolución o una emulsión en un vehículo oleaginoso o acuoso, y puede contener agentes de formulación, tales como agentes de suspensión, conservantes, estabilizantes y/o dispersantes. Alternativamente, la molécula de anticuerpo puede encontrarse en forma seca, para su reconstitución antes de ser usada con un líquido estéril apropiado.

Una vez formuladas, las composiciones de la invención pueden administrarse directamente al sujeto. Los sujetos a tratar pueden ser animales. Sin embargo, es preferible que las composiciones se adapten para la administración a sujetos humanos.

55 Las composiciones farmacéuticas de esta invención pueden administrarse a través de una serie de rutas que incluyen, aunque sin limitación, las rutas oral, intravenosa, intramuscular, intra-arterial, intramedular, intratecal,

intraventricular, transdérmica, transcutánea (por ejemplo, véase el documento WO 98/20734), subcutánea, intraperitoneal, intranasal, enteral, tópica, sublingual, intravaginal o rectal. También se pueden usar hipoesprays para administrar las composiciones farmacéuticas de la invención. Típicamente, las composiciones terapéuticas se pueden preparar como inyectables, como disoluciones líquidas o como suspensiones. También se pueden preparar formas sólidas adecuadas para disolución o suspensión en vehículos líquidos antes de la inyección.

La administración directa de las composiciones generalmente se realizará mediante inyección, subcutáneamente, intraperitonealmente, intravenosamente o intramuscularmente, o se administrará al espacio intersticial de un tejido. Las composiciones también se pueden administrar en una lesión. El tratamiento de dosis puede ser un calendario de dosis única o un calendario de dosis múltiples.

Cabe destacar que el ingrediente activo de la composición será una molécula de anticuerpo. Como tal, será susceptible de degradación en el tracto gastrointestinal. Por tanto, si la composición va a ser administrada a través de una ruta que use el tracto gastrointestinal, la composición necesitará contener agentes que protejan al anticuerpo frente a la degradación pero que liberen el anticuerpo una vez absorbido del tracto gastrointestinal.

Se puede encontrar una discusión exhaustiva de vehículos farmacéuticamente aceptables en Remington's Pharmaceutical Sciences (Mack Publishing Company, N.J. 1991).

También se contempla que el anticuerpo de la presente invención se administre mediante uso de terapia génica. A fin de llevar esto a cabo, se introducen secuencias de ADN que codifican las cadenas pesada y ligera de la molécula de anticuerpo bajo el control de componentes de ADN apropiados en un paciente de tal modo que las cadenas del anticuerpo se expresen a partir de las secuencias de ADN y se ensamblen *in situ*.

La presente invención también proporciona una molécula de anticuerpo para uso en el control de enfermedades inflamatorias. Preferiblemente, la molécula de anticuerpo puede usarse para reducir el proceso inflamatorio o para prevenir el proceso inflamatorio.

La presente invención también proporciona una molécula de anticuerpo de la presente invención para uso en el tratamiento o la profilaxis de un trastorno patológico que está mediado por IL-17A y/o IL-17F, o que está asociado a un aumento del nivel de IL-17A y/o IL-17F. Preferiblemente, la afección patológica se selecciona del grupo que consiste en infecciones (víricas, bacterianas, fúngicas y parasitarias), choques endotóxicos asociados a una infección, artritis, artritis reumatoide, asma, enfermedad inflamatoria pélvica, enfermedad de Alzheimer, enfermedad de Crohn, enfermedad inflamatoria del intestino, colitis ulcerativa, enfermedad de Peyronie, enfermedad celiaca, enfermedad de la vesícula biliar, enfermedad pilonidal, peritonitis, soriasis, vasculitis, adhesiones quirúrgicas, apoplejía, diabetes de tipo I, artritis de Lyme, meningoencefalitis, trastornos inflamatorios mediados inmunitariamente del sistema nervioso central y periférico, tal como la esclerosis múltiple y el síndrome de Guillain-Barré, otros trastornos autoinmunes, pancreatitis, trauma (cirugía), enfermedad injerto-versus-hospedante, rechazo de trasplante, cáncer (tanto tumores sólidos como melanomas, hepatoblastomas, sarcomas, carcinomas de célula escamosa, cánceres de células transicionales, cánceres de ovario y malignidades hematológicas, y en particular leucemia mielógena aguda, leucemia mielógena crónica, cáncer gástrico y cáncer de colon), enfermedad del corazón que incluye enfermedades isquémicas tales como el infarto de miocardio, así como la aterosclerosis, la coagulación intravascular, la resorción ósea, la osteoporosis, la periodontitis y la hipocloridia.

La presente invención también proporciona una molécula de anticuerpo según la presente invención para uso en el tratamiento o la profilaxis del dolor.

La presente invención proporciona además el uso de una molécula de anticuerpo según la presente invención en la fabricación de un medicamento para el tratamiento o la profilaxis de un trastorno patológico que está mediado por IL-17A y/o IL-17F o que está asociado a un aumento del nivel de IL-17A y/o IL-17F. Preferiblemente, el trastorno patológico es artritis reumatoide o esclerosis múltiple.

La presente invención proporciona además el uso de una molécula de anticuerpo según la presente invención en la fabricación de un medicamento para el tratamiento o la profilaxis del dolor.

Una molécula de anticuerpo de la presente invención se puede utilizar en cualquier terapia en la que se desee para reducir los efectos de la IL-17A y/o de la IL-17F en el cuerpo del humano o animal. La IL-17 A y/o la IL-17F pueden estar en circulación por el organismo o pueden estar presentes en un nivel indeseadamente elevado localizadas en un sitio particular del organismo, por ejemplo en una zona de inflamación.

Una molécula de anticuerpo según la presente invención se usa preferiblemente para el control de una enfermedad inflamatoria, una enfermedad autoinmune o cáncer.

La presente invención también proporciona un método para tratar sujetos humanos o animales que padecen, o que están en riesgo de padecer, un trastorno mediado por IL-17A y/o IL-17F, método que comprende la administración al sujeto de una cantidad efectiva de una molécula de anticuerpo de la presente invención.

También se puede usar una molécula de anticuerpo según la presente invención en diagnóstico, por ejemplo en la diagnóstico *in vivo*, y en la obtención de imágenes de estados de enfermedad que impliquen IL-17A y/o IL-17F.

La presente invención se describe adicionalmente simplemente a modo de ilustración a través de los siguientes ejemplos, que se refieren a las Figuras acompañantes, en las que:

5 Figura: 1

- a) Región V de cadena ligera del anticuerpo CA028_0496 (SEQ ID NO: 7)
- b) Región V de cadena pesada del anticuerpo CA028_0496 (SEQ ID NO: 9)
- c) CDRH1 (SEQ ID NO: 1), CDRH2 (SEQ ID NO: 2), CDRH3 (SEQ ID NO: 3), CDRL1 (SEQ ID NO: 4), CDRL2 (SEQ ID NO: 5), CDRL3 (SEQ ID NO: 6) del anticuerpo CA028_496.
- 10 d) Cadena ligera del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 11).
- e) Cadena pesada del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 15).
- f) ADN que codifica la cadena ligera del anticuerpo CA028_496 que incluye la secuencia señal (SEQ ID NO: 14).
- g) ADN que codifica la cadena pesada del anticuerpo CA028_496 que incluye la secuencia señal (SEQ ID NO: 18)
- h) IL-17A madura humana.

15 i) IL-17F madura humana.

Figura 2

a) Efecto del anticuerpo CA028_0496 (designado como Ab#496 en la leyenda) sobre la producción de IL-6 inducida por IL-17 humana a partir de células Hela.

20 b) Efecto del anticuerpo CA028_0496 (designado como Ab#496 en la leyenda) sobre la producción de IL-6 inducida por IL-17F humana a partir de células Hela.

Manipulaciones de ADN y métodos generales

Se usó la cepa de *E. coli* INVαF' (Invitrogen) para la transformación y el crecimiento de cultivo rutinario. Las enzimas de restricción y modificación de ADN fueron obtenidas en Roche Diagnostics Ltd. y en New England Biolabs. Las preparaciones de plásmidos se realizaron usando kits de purificación Maxi Plasmid (QIAGEN, n° de catálogo 12165).

25 Las reacciones de secuenciamiento de ADN se llevaron a cabo usando el kit de secuenciamiento ABI Prism Big Dye terminator (n° de catálogo 4304149) y se pasaron por un secuenciador automatizado ABI 3100 (Applied Biosystems). Los datos fueron analizados usando el programa AutoAssembler (Applied Biosystems). Los oligonucleótidos fueron obtenidos de Invitrogen. La concentración de IgG se determinó usando ELISA de ensamblaje de IgG.

Isoformas de IL-17

30 La IL-17A y la IL-17F recombinantes fueron adquiridas en R&D Systems.

El heterodímero IL-17A/F recombinante fue producido uniendo IL-17A e IL-17F usando un ligando GS. El heterodímero presentó la siguiente secuencia (SEQ ID NO: 19)

MGITIPRNP GCPNSEDKNFPRTVMVNLNIHNRNTNTNPKRSSDYNNRSTSPWNLHRNE
DPERYPSVIWEAKCRHLGCINADGNVDYHMSNVPIQQEILVLRREPPHCPNSFRLEKIL
VSVGCTCVTPIVHHVAGGGGSGGGGSGGGGSGGGGSRKIPKVGHTFFQKPESCPPVP
GGSMKLDIGIINENQRVMSRNIERSRSTSPWNYTWTWDPNRYPSEVVQAQCRNLGCIN
AQGKEDISMNSVPIQQETLVVRRKHQGC SVSFQLEKVLVTVGCTCVTPVIHHVQ

IL-17F recombinante de cynomolgus (SEQ ID NO: 20)

MRKIPKVGHTFFQKPESCPPVPEGSMKLDGTGIINENQRVMSRNIERSRSTSPWNYTWTWDPNR
YPSEVVQAQCKHLGCINAQGKEDISMNSVPIQQETLVVRRKHQGC SVSFQLEKVLVTVGCTCV
35 TPVIHHVQ

La secuencia de ADN que codifica el heterodímero IL-17A/F se sintetizó químicamente mediante Entelechon GmbH y se subclonó en pET43.1a en los sitios NdeI/XhoI.

La secuencia de ADN que codifica L-17F de *Cynomolgus* se amplificó mediante PCR usando cebadores que introdujeron sitios de restricción NdeI y XhoI. Los productos PCR fueron ligados en pCR4Blunt-TOPO y la secuencia se verificó antes de la digestión y la ligación en los sitios NdeI/XhoI.

Se usó ADN de pET43.1a que codifica isoformas de IL-17 para transfectar células BL21(DE3) y se cultivó clones seleccionados resistentes a carbenicilina a 37°C durante una noche en medio de cultivo 2TY que contenía un 2% de glucosa y 50 µg/mL de carbenicilina. A continuación los cultivos fueron diluidos y cultivados en el mismo medio hasta DO₆₀₀ de 0,5-0,7, inducidos con IPTG 1 mM y cultivados a 37°C durante otras 4-5 horas.

Las células fueron recolectadas mediante centrifugación y a partir de las células se prepararon cuerpos de inclusión. Los cuerpos de inclusión se solubilizaron en Tris-HCl 50 mM, hidrócloruro de guanidinio 5 M, NaCl 50 mM, EDTA 1 mM, glutatona reducida 2 mM, glutatona oxidada 0,2 mM, pH 8.5. La proteína de IL-17 se replegó mediante adición gota a gota de la proteína solubilizada al tampón anterior sin hidrócloruro de guanidinio, con agitación vigorosa. Se eligió el volumen final de tal modo que la concentración final de proteína no fuera superior a 0,1 mg/mL.

La disolución de proteína replegada se concentró si era necesario, antes del cambio de disolución tampón por MES 10 mM, pH 6. A continuación se aplicó la proteína a una columna de Sepharose SP HP equilibrada con MES 20 mM, pH 6. La proteína se eluyó con un gradiente lineal de NaCl 0-500 mM en MES pH 6 a lo largo de 10 volúmenes de columna. Para la IL-17F, el gradiente se extendió a NaCl 600 mM. A fin de purificar adicionalmente la IL-17, se reunió la fracción relevante procedente de la columna de Sepharose SP HP, se concentró y se diluyó con CAPSO 20 mM (pH 10) y se aplicó a una columna Mono Q equilibrada con CAPSO 20 mM. La proteína se eluyó con un gradiente lineal de NaCl 0-250 mM en CAPSO 20 mM a lo largo de 20 volúmenes de columna. Se agruparon las fracciones que contenían IL-17 y se neutralizaron usando MES 1 M pH 6.

Ejemplo 1: Producción de un anticuerpo neutralizante anti-IL-17

Se inmunizaron ratas Sprague Dawley hembras con IL-17 recombinante humana (adquirida en R & D systems). Las ratas recibieron cuatro inmunizaciones de 20 µg de IL-17 en 100 µL de adyuvante de Freund. El anticuerpo 225, que se une a IL-17 humana, fue aislado usando los métodos descritos en el documento WO04/051268. Los genes correspondientes al dominio variable de cadena pesada (VH) y al dominio variable de cadena ligera (VL) del anticuerpo 225 fueron aislados y secuenciados tras clonación vía PCR de transcripción inversa.

Se diseñó una serie de regiones VL y VH humanizadas usando estructurasceptoras de región V y variando el número de residuos donantes de las regiones estructurales. Se diseñaron ocho regiones VL ancladas (gL 1-8) y 9 regiones VH ancladas (gH 1-9) y se construyeron los genes mediante ensamblaje de oligonucleótidos y mutagénesis de PCR.

Las secuencias ancladas a la cadena ligera fueron subclonadas en el vector de expresión de cadena ligera humano pKH10.1, que contiene el ADN que codifica la región constante C-Kappa humana (alotipo Km3). Las secuencias ancladas a cadena pesada fueron subclonadas en el vector de expresión gamma-4 humano pVhg4P FL, que contiene el ADN que codifica la región constante gamma-4 humana que contiene la mutación estabilizadora de bisagra S241P (Angal *et al.*, ver antes). Los plásmidos fueron co-transfectados en células CHO y los anticuerpos producidos fueron sometidos a escrutinio en relación a su actividad en la unión a IL-17 y en ensayos de neutralización. Las transfecciones de células CHO se llevaron a cabo usando el procedimiento de Lipofectamine™ 2000 siguiendo las instrucciones del fabricante (Invitrogen, n° de catálogo 11668).

El injerto óptimo en base a la expresión, la afinidad y la potencia de neutralización (gL7gH9) fue seleccionado y designado como CA028_0496 (también denominado en la presente memoria 496). Las secuencias de la región V de dicho anticuerpo se muestran en la Figura 1 (a) y (b) y en las SEQ ID NO: 7 y 9 para la cadena ligera (gL7) y la cadena pesada (gH9) respectivamente.

La estructura aceptora de cadena pesada es la secuencia de línea germinal humana VH3 1-3 3-07 procediendo la estructura 4 de esta porción de la línea germinal JH4 de región JH humana. La estructura aceptora de cadena ligera es la secuencia de línea germinal humana VK1 2-1(1) L4, procediendo la estructura 4 de esta porción de la línea germinal JK1 de región JK humana.

Ejemplo 2: El anticuerpo CA028 0496 neutraliza la IL-17 y la IL-17F y el heterodímero IL-17A/F

Células Hela

Se evaluó la potencia del anticuerpo CA028_0496 frente a IL-17 recombinante humana y frente a IL-17F recombinante humana en células Hela y se comparó con el anticuerpo CDP435 (WO06/054059). Las células Hela fueron obtenidas en el banco de células de ATCC (ATCC CCL-2). Las células fueron cultivadas en medio Eagle modificado de Dulbecco (DMEM) suplementado con un 10% de suero de ternero fetal, penicilina, gentamicina y glutamina. Se llevaron a placa 1x10⁴ células en placas de cultivo de fondo plano de 96 pocillos. Las células fueron incubadas durante una noche y se lavaron una vez con tampón de ensayo. Tanto la IL-17A humana (25 ng mL⁻¹) como la IL-17F humana (125 ng mL⁻¹) fueron incubadas en presencia de una concentración fija de TNF-α humano, dicha mezcla fue preincubada con anticuerpo CA028_0496 o con anticuerpo CDP435. A continuación se

añadió la citoquina más el anticuerpo a las células Hela, que se incubaron durante una noche. La producción de IL-6 en el sobrenadante del cultivo celular fue proporcional a la cantidad de IL-17A/IL-17F añadida a las células. Los niveles de IL-6 humana se midieron mediante ELISA y se cuantificaron por comparación con concentraciones patrón conocidas de IL-6 humana.

- 5 Los datos (Figuras 2a y 2b) indican que CA028_0496 neutralizó de manera potente la IL-17A recombinante humana y también presentó algo de actividad frente a IL-17F humana. Los datos de estos experimentos indicaron que el anticuerpo CA028_0496 dio lugar a una IC_{50} de 43 ng/mL frente a IL-17 recombinante humana ($25 \text{ ng} \cdot \text{mL}^{-1}$) y de 1477 ng/mL frente a IL-17 F recombinante ($125 \text{ ng} \cdot \text{mL}^{-1}$). Por consiguiente, el anticuerpo CA028_0496 dio lugar a una IC_{50} de 0,29 M frente a IL-17 recombinante humana (0,78 nM) y de 10,18 nM frente a IL-17F recombinante humana (4,16 nM) en este ensayo (cálculo basado en IgG suponiendo un peso molecular de 145.000 como IgG4 promedio y suponiendo que la IL-17A y la IL-17F son dímeros).

Células de microglía humanas

- 15 Se llevaron a placa células de microglía humanas (TCS Cellworks) en una placa de 96 pocillos de fondo plano en una concentración de 5.000 células por pocillo en un volumen total de 100 μL y se dejaron durante 24 horas para que se unieran al plástico. En ese momento, se añadieron a los pocillos por triplicado valoraciones (5, 1, 0,2 y 0,04 $\mu\text{g/mL}$) de IL-17A recombinante humana, de IL-17F recombinante humana, de IL-17F recombinante de cynomolgus y de heterodímero IL-17A/F recombinante humano, en presencia y en ausencia de 10 ng/mL de TNF α recombinante humano. Los pocillos de control no contenían estimulación, contenían solo IL-17A (q00 ng/mL), contenían solo TNF α , y contenían IL-17A y TNF α juntos. Todas las citocinas se añadieron en un volumen total de 110 μL /pocillo, dando lugar a un volumen total de 210 μL . En los experimentos que implicaban anticuerpos, las células se llevaron a placa de forma similar. Transcurridas 24 horas, se añadieron los anticuerpos y las citocinas al mismo tiempo para generar las concentraciones finales fijadas en un volumen final de 200 μL .

- 20 Tras otras 24 horas adicionales de incubación a 37°C, los sobrenadantes fueron recolectados y congelados a -20°C hasta ser analizados. Para el análisis, los sobrenadantes fueron diluidos 1/10 y se midieron para determinar la IL-6 usando un kit MSD de IL-6 humana, siguiendo las instrucciones del fabricante.

Se observó que todas las isoformas de IL-17 evaluadas eran activas en el ensayo, particularmente en presencia de TNF α .

- 30 La potencia del anticuerpo CA028_0496 frente a IL-17A recombinante humana e IL-17F recombinante humana, IL-17F recombinante de cynomolgus y heterodímero de IL-17A/F recombinante humano, en células de microglía humanas, fue evaluada en presencia de TNF α y se comparó con un anticuerpo de control y un anticuerpo específico de IL-17A usando el método descrito anteriormente.

- 35 El anticuerpo de control no tuvo efecto sobre la actividad de ninguna de las citocinas evaluadas. El anticuerpo CA028_0496 presentó actividad de inhibición frente a las tres citocinas IL-17, IL-17F e IL-17A/F, incluyendo la IL-17F de cynomolgus, mientras que el anticuerpo específico de IL-17A solo presentó actividad de inhibición frente a IL-17A y el heterodímero IL-17A/F.

Ejemplo 3: Afinidad del anticuerpo CA028 0496 (regiones constantes de IgG4 humana) por IL-17A e IL-17F

Se llevaron a cabo análisis BIA (Análisis de Interacción Biomolecular) usando un Biacore 3000 (BiacoreAB).

- 40 Todos los experimentos se llevaron a cabo a 25°C. Se inmovilizó IgG anti-humana de cabra de fragmento Fc Affinipure, específico de fragmento Fc (Jackson ImmunoResearch) en un chip sensor CM5 empleando química de acoplamiento vía grupo amino hasta un nivel de captura de ≈ 6000 unidades de respuesta (RUs). Se usó tampón HBS-EP (HEPES 10 mM pH 7,4, NaCl 0,15 M, EDTA 3 mM, 0,005% de Surfactante P20, Biacore AB) como tampón de elución con un caudal de 10 $\mu\text{L}/\text{min}$. Se usó una inyección de 10 μL de anticuerpo CA028_0496 (1,81 mg/mL) para la captura por la IgG-Fc anti-humana inmovilizada. Las isoformas de IL-17A e IL-17 humanas fueron valoradas sobre el CA028_0496 capturado a diluciones dobles desde 50 nM hasta sub nM con un caudal de 30 $\mu\text{L}/\text{min}$. La superficie se regeneró mediante inyecciones de 30 μL de HCl 40 mM, seguidas de una inyección de 5 μL de NaOH 5 mM.

Las curvas de unión con sustracción del ruido de fondo fueron referenciadas doblemente y analizadas usando el software BIAevaluation (versión 3.2) siguiendo procedimientos estándar. Se determinaron los parámetros cinéticos a partir del algoritmo de ajuste.

- 50 El valor de afinidad determinado para el anticuerpo CA028_0496 en la unión a IL-17A fue de 16 pM, y de 1750 pM para la IL-17F. El anticuerpo CA028_0496 no se unió a las otras isoformas de la IL-17 (IL-17 B, C, D y E). El anticuerpo CA028_0496, por lo tanto, se une específicamente a IL-17A e IL-17F.

Ejemplo 4: Afinidad del anticuerpo CA028 0496 (regiones constantes de IgG1 de ratón) por IL-17A, IL-17F de cynomolgus y heterodímero IL-17A/F

Se llevaron a cabo análisis BIA (Análisis de Interacción Biomolecular) usando un Biacore 3000 (Biacore AB).

- 5 Todos los experimentos se llevaron a cabo a 25°C. Se inmovilizó IgG anti-ratón de cabra de fragmento F(ab')₂ Affinipure, específico de fragmento Fc (Jackson ImmunoResearch) en un chip sensor CM5 (Biacore AB) empleando química de acoplamiento vía grupo amino hasta un nivel de captura de ≈6000 unidades de respuesta (RUs). Se usó tampón HBS-EP (HEPES 10 mM pH 7,4, NaCl 0,15 M, EDTA 3 mM, 0,005% de Surfactante P20, Biacore AB) como tampón de elución con un caudal de 10 µL/min. Se usó una inyección de 10 µL de anticuerpo CA028_0496 a 4 ug/mL para la captura por la IgG-Fc anti-ratón inmovilizada. La IL-17A humana, la IL-17F de cynomolgus y el heterodímero A/F fueron valorados sobre el CA028_0496 capturado a diluciones dobles desde 25 nM hasta sub nM con un caudal de 30 µL/min. Se regeneró la superficie con un caudal de 10 µL/min mediante una inyección de 10 µL de HCl 40 mM, seguida de una inyección de 5 µL de NaOH 5 mM.

- 10 Las curvas de unión con sustracción del ruido de fondo doblemente referenciadas fueron analizadas usando el software BIAevaluation (versión 3.2) siguiendo procedimientos estándar. Se determinaron los parámetros cinéticos a partir del algoritmo de ajuste.

El anticuerpo CA028_0496 presentó una afinidad de 21 pM por IL-17A, de 116 pM por el heterodímero IL-17A/F y de 1030 pM por IL-17F de cynomolgus.

Ejemplo 5: Mapeado de epítomos mediante RMN de un fragmento Fab' que comprende las regiones variables del anticuerpo CA028 0496

- 20 El anticuerpo CA028_0496 fue producido como un fragmento Fab' que comprende 496 regiones variables y regiones constantes de IgG1 de ratón (SEQ ID NO: 23 y 24).

Secuencia de cadena pesada (SEQ ID NO: 23)

EVQLVESGGG	LVQPGGSLRL	SCAASGFTFS	DYNMAWVRQA	PGKGLEWVAT
ITYEGRNTYY	RDSVKGRFTI	SRDNAKNSLY	LQMNSLRAED	TAVYYCASPP
QYYEGSIYRL	WFAHWGQGT	VTVSSAKTTP	PSVYPLAPGS	AAQTNSMVT
GCLVKGYFPE	PVTVTWNSGS	LSSGVHTFPA	VLQSDLYTSL	SSVTVPSSW
PSETVTCNVA	HPASSTKVDK	KIVPRDCGCA	AAIQLTQSPS	SLSASVGDRV
TITCRADESV	TTLMHWYQK	PGKAPKLLIY	LVSNSRESGVP	SRFSGSGSGT
DFTLTISLQ	PEDFATYYCQ	QTWSDPWTFG	QGTKVEIKRT	DAAPTVSIFP
PSSEQLTSGG	ASVVCFLNMF	YPKDINVKWK	IDGSRQNGV	LNSWTDQDSK
DSTYSMSSTL	TLTKDEYERH	NSYTCEATHK	TSTSPIVKSF	NRNEC

Secuencia de cadena ligera (SEQ ID NO: 24)

- | | | | | |
|------------|------------|------------|------------|------------|
| AIQLTQSPSS | LSASVGDRVT | ITCRADESVT | TLMHWYQKPK | GKAPKLLIYL |
| VSNRESGVPS | RFSGSGSGTD | FTLTISLQ | EDFATYYCQ | TWSDPWTFGQ |
| GTKVEIK | | | | |

Expresión transitoria de CA028_00496.gi mFab' en un biorreactor de ondas de 10 L

- 30 Para la transfección de las células HEK 293 F en una bolsa de ondas de 10 L, se prepararon 10 L de medio NM6 doméstico y se suplementaron con Glutamax 2 mM (Invitrogen). Las células fueron contabilizadas y sembradas en la bolsa a una densidad celular final de 1x10⁶ células/mL. La mezcla de transfección se preparó en 700 mL de medio NM6. Para la preparación de la mezcla de transfección, se dividió el medio NM6 en dos mitades. A una mitad se le añadió 5 mg de ADN de plásmido de cadena pesada y 5 mg de ADN de plásmido de cadena ligera y se agitó suavemente. A la otra mitad se añadió 37 mL de una disolución de reserva de polietilenimina (PEI) lineal de 35 kD y se agitó suavemente. Después de eso, el medio NM6 que contenía el ADN fue transferido lentamente al medio NM6 que contenía el PEI. La mezcla se incubó a temperatura ambiente durante 20 minutos antes de añadirse a la suspensión celular en la bolsa de ondas. Las células transfectadas fueron cultivadas durante 14 días a 25 rpm, un ángulo de 7°, 37°C y 5% de CO₂. Se tomaron muestras de forma regular para determinar la densidad y la viabilidad celular. En el día 14 tras la transfección las células fueron recolectadas. La suspensión celular de 10 L fue transferida a botellas de centrifugación y se hicieron girar a 4.000 rpm durante 45 minutos. A continuación el sobrenadante se hizo pasar a través de un filtro Sartobran (0,45 µm a 0,2 µm) y finalmente a través de un filtro estéril Millipack Gold60 (0,22 µm). Entonces se purificó Fab' a partir del sobrenadante filtrado en condiciones estériles.

Purificación de mFab' de CA028_00496.gl

El mFab' de CA028_00496.gl expresado transitoriamente fue purificado a partir de células hospedantes de mamífero (HEK293F) como se indica a continuación. El medio acondicionado de célula hospedante de mamífero que contenía mFab' de CA028_00496.gl secretado se concentró en una relación 10:1 mediante ultrafiltración de flujo tangencial (TFF) usando una membrana de 10.000 MWCO. El sobrenadante concentrado se hizo pasar a través de una columna de Sepharose GammaBind Plus (medio suministrado por GE Healthcare) que había sido equilibrada con tampón de citrato/fosfato 75 mM, pH 6,0. Tras realizar la carga, la columna de Sepharose GammaBind Plus se lavó con tampón de citrato/fosfato 75 mM, pH 6,0, hasta que la absorbancia a 280 nm del flujo a su través retornó a línea base. A continuación el mFab' de CA028_00496.gl se eluyó de la columna mediante la adición a tampón de glicina-HCl 0,1 M, pH 2,7. Se monitorizó la absorbancia a 280 nm del eluato y se recogieron las fracciones que contenían proteína. Se llevó a cabo la carga del sobrenadante y la elución en columna en dos lotes, de tal modo que no se excediera la capacidad de la columna.

Se combinaron las fracciones que contenían la proteína y se cambiaron de tampón (por diafiltración) a tampón de fosfato sódico 0,1 M, pH 6,0, + EDTA 2 mM usando una celda agitada Amicon y membrana de 10.000 MWCO. El mFab' de CA028_00496.gl purificado por afinidad se concentró hasta 20 mg/mL antes de la reducción. Las cisteínas enlazadas por disulfuro de la región de bisagra fueron reducidas mediante incubación del Fab' con β -Mercaptoetilamina 5 mM a 37°C durante 30 minutos. La reducción se paró añadiendo N-etilmaleimida (NEM) 50 mM para taponar los grupos tiol reducidos. La reacción de tapado se incubó a +4°C durante una noche. El agente de tapado de exceso y las impurezas de alto peso molecular se retiraron mediante Filtración en Gel preparativa. El Fab' reducido y capado fue cargado en una columna Superdex 200 (GE Healthcare) y eluido en PBS, pH 7,4. Se monitorizó la absorbancia a 280 nm del eluato y se recogieron las fracciones que contenían proteína. Se analizaron las fracciones para determinar la pureza mediante SE-HPLC analítica usando una columna Zorbax GF250 (Agilent) con tampón de fosfato sódico 0,2 M, pH 7,0. Se combinaron las fracciones que contenían Fab' puro, se filtraron a través de filtros estériles de 0,22 μ m y se almacenaron a +4°C. La pureza final se analizó mediante SE-HPLC (como se ha indicado antes) y SDS-PAGE reductora y no reductora.

Preparación de hIL17A marcada con dN y dCN

La secuencia de ADN que codifica IL-17A se amplificó mediante PCR usando cebadores que introdujeron sitios de restricción NdeI y XhoI. Los productos PCR fueron ligados en pCR4Blunt-TOPO y la secuencia se verificó antes de la digestión y la ligación en los sitios NdeI/XhoI.

Se usó hIL17A-pET43.1a para transformar la cepa de *E. coli* BL21(DE3). Se inoculó 1 mL de LB con células transformadas. Las células se incubaron durante una noche a 37°C. Se usó un cultivo denso de una noche para inocular un 30% de medio Celltone marcado con dN a una dilución 1:40. Las células se incubaron durante una noche a 37°C. A continuación el cultivo denso de una noche se usó para inocular medio Celltone marcado al 30% con dN o dCN. El cultivo se incubó durante una noche a 37°C. Esta etapa se repitió a continuación con un 70% de medio y después finalmente con un 100% de medio. Se inoculó medio marcado al 100% con dN o dCN con cultivo denso de una noche y se cultivó hasta una DO de 0,8 a 595 nm. Se indujo el cultivo con una concentración final de IPTG 1 mM y se incubó durante 6 horas a 37°C. Las células se recogieron por centrifugación.

Los cuerpos de inclusión se extrajeron (para 2 L de cultivo).

1) Resuspender partícula de células en 40 mL de Tampón A (KCl 100 mM, DTT 2 mM, PMSF 2 mM, Tris-HCl 10 mM, pH 8,5, 25% (p/v) de sacarosa)

2) Añadir 10 mL de Tampón B (Tris-HCl 300 mM, pH 8,5, EDTA 100 mM, 4 mg/mL de lisozima). Incubar en hielo durante 10-30 minutos con movimiento ocasional.

3) Añadir 50 mL de Tampón C (LiCl 1 M, EDTA 20 mM, 0,5% (v/v) de NP-40). Someter la muestra a ultasonidos para homogeneizar. Pasar la muestra a través de una Prensa Francesa a 20.000 psi (1360 bar). Volver a pasar la muestra a través de la Prensa Francesa. Girar la muestra a 10.000 rpm durante 10 minutos a 4°C.

4) Resuspender la partícula en 40 mL de Tampón D (Tris-HCl 10 mM, pH 8,5, EDTA 0,1 mM, LiCl 0,5 mM, 0,5% (v/v) de NP-40, DTT 1 mM, PMSF 1 mM). Someter a ultrasonidos y girar a 10.000 rpm durante 10 minutos a 4°C. Repetir la etapa.

5) Resuspender la partícula en 40 mL de Tampón E (Tris-HCl 10 mM, pH 8,5, EDTA 0,1 mM, 0,5% (v/v) de NP-40, DTT 1 mM, PMSF 1 mM). Someter a ultrasonidos y girar a 10.000 rpm durante 10 minutos a 4°C. Repetir la etapa.

Resolubilización de partícula

6) Preparar Guanidina HCl 6 M, Tris-HCl 50 mM, pH 8,5, NaCl 50 mM. Añadir a la partícula. Agitar la partícula hasta disolver completamente.

7) Filtrar la muestra a través de un filtro de jeringa de 0,2 μ m.

Replegamiento y diálisis

1) 2,5 mL de cuerpos de inclusión resolubilizados se diluyen en 50 mL de Guanidina-HCl 5 M, Tris 50 mM, pH 8,5, NaCl 50 mM, EDTA 1 mM, Glutathione reducida 2 mM, Glutathione oxidada 0,2 mM.

5 2) Añadir los cuerpos de inclusión diluidos gota a gota a 500 mL de Tris 50 mM, pH 8,5, NaCl 50 mM, EDTA 1 mM, Glutathione reducida 2 mM, Glutathione oxidada 0,2 mM.

3) Diálisis de proteína replegada frente a MES 20 mM, pH 6, durante una noche a 4°C.

Purificación de proteína marcada

1) Se carga el lisato dializado en una columna Mono SP HP (catión) equilibrada con MES 20 mM, pH 6.

2) Se eluye la proteína con un gradiente de NaCl al 50% a lo largo de 10 volúmenes de columna.

10 3) Se cambia el tampón de la proteína eluida a NaPi 20 mM, NaCl 100 mM, 0,02% de azida, pH 6, y se concentra y se ensaya para determinar la concentración.

Purificación de proteína no marcada

1) Se carga el lisato dializado en una columna Mono SP HP (catión) equilibrada con MES 20 mM, pH 6.

2) Se eluye la proteína con un gradiente de 50% de NaCl 1 M a lo largo de 10 volúmenes de columna.

15 3) Se concentra la proteína eluida y se cambia el tampón a CAPSO 20 mM, pH 10 y se carga en una columna MonoQ equilibrada con CAPSO 20 mM, pH 10.

4) Se eluye la proteína con un gradiente de 50% de NaCl 1 M a lo largo de 20 volúmenes de columna.

5) Se concentra la proteína eluida.

20 6) Se inyecta la proteína concentrada en una columna Superdex 75 16?60 para una etapa final de acabado. Se equilibra la columna con HEPES 20 mM, NaCl 50 mM, pH 7,4. Se recoge la proteína eluida y se concentra y evalúa para determinar la concentración.

Principio del ensayo de mapeado de epítopo por RMN

25 La tecnología de RMN permite la detección sensible de cambios en el entorno de especies paramagnéticas. En la práctica, esto significa que una proteína que ha sido marcada de forma uniforme con ^{15}N y ^2H puede mezclarse con una pareja de unión no marcada, y los aminoácidos de la proteína marcada que interaccionan con la pareja de unión no marcada pueden detectarse según varía su posición en un espectro de RMN. En este caso, la IL-17A humana fue marcada uniformemente y su espectro de RMN se registró en presencia y en ausencia del fragmento Fab' de un anticuerpo anti-IL-17A. La diferencia entre los dos espectros permite identificar los aminoácidos de la IL-17A que están implicados en la interacción con el anticuerpo.

30 Espectroscopía de RMN

35 Los experimentos de RMN se llevaron a cabo con muestras de 0,35 mL de las proteínas y complejos en un tampón de fosfato sódico 25 mM, cloruro sódico 100 mM y azida sódica al 0,01% (p/v) a pH 6 (95% de H_2O y 5% de D_2O). El complejo 1:2 (dímero:Fab) entre IL-17A marcada con $^{15}\text{N}/^2\text{H}$ y el fragmento Fab' no marcado del anticuerpo '496 se preparó para análisis de RMN mezclando cantidades equimolares (monómero:Fab) de las proteínas para alcanzar una concentración final de 0,25 mM. Los datos de RMN fueron adquiridos a 35°C para la IL-17A libre y para el complejo IL-17A:fragmento Fab' de '496 en un espectrómetro Bruker Avance de 800 MHz equipado con una sonda de triple resonancia ($^{15}\text{N}/^{13}\text{C}/^1\text{H}$). Se usaron espectros HNCACB, HN(CO)CACB y HNCO basados en TROSY (1-4) para realizar la asignación completa de resonancias de cadena principal específicas de secuencia (^{15}N , ^{13}C y ^1H) para IL-17A libre usando una muestra 0,8 mM marcada con $^{15}\text{N}/^{13}\text{C}$ de forma uniforme.

40 Los cambios de posición de las señales de cadena principal de IL-17A inducidos por la unión del fragmento Fab' de '496 fueron detectados usando un espectro TROSY 2D $^{15}\text{N}/^1\text{H}$ (5). Los parámetros de adquisición típicos de todos los experimentos de RMN se incluyen a continuación.

Parámetros básicos de los experimentos de RMN.

Experimento	Dimensión indirecta	Ancho de barrido [ppm]	Desfase de disolvente [ppm]	Tiempo de adquisición [ms]
TROSY-HNCACB & TROSY-HN(CO)CACB	¹⁵ N (F2)	32	118,0	19,3
	¹³ C (F1)	56	44,0	8,0
TROSY-HNCO	¹⁵ N (F2)	32	118,5	20,6
	¹³ C (F1)	11,5	175,5	24,8
2D ¹⁵N/¹H HSQC	¹⁵ N (F1)	34	118,0	80
2D ¹⁵N/¹H TROSY	¹⁵ N (F1)	34	117,5	50

La dimensión directa de ¹H (F3 ó F2) fue adquirida con ancho de barrido de 14 ppm y un tiempo de adquisición de 90 ó 60 ms.

- 5 Todos los espectros fueron procesados usando Topspin 2.1, usando predicción lineal para extender el tiempo de adquisición efectivo en la dimensión de ¹⁵N de los datos 3D hasta aproximadamente 30 ms. Se aplicó un aumento de resolución suave en todas las dimensiones usando una función de seno-cuadrado desplazado. El análisis de los espectros se llevó a cabo usando Sparky (7).

Análisis de datos de unión a Fab'

- 10 La aproximación de mínimo desplazamiento (Farmer, B. T. et al., (1996) Nat Struct Mol Biol 3(12), 995; Muskett, F. W. et al., (1998) J Biol Chem 273(34), 21736-21743) fue usada para determinar los cambios en las posiciones de las señales de RMN de la IL-17A resultantes de la unión de fragmento Fab' de '496 con la IL-17A humana. Inicialmente, se tomaron todos los picos del espectro HSQC 2D de ¹⁵N/¹H de IL-17A libre y TROSY 2D de ¹⁵N/¹H de IL-17A unida al fragmento Fab' de '496 en sus centros. Se corrigieron los valores de desplazamiento químico de ¹⁵N y ¹H de las resonancias de la cadena principal para tener en cuenta la diferencia en los espectros de TROSY 2D de ¹⁵N/¹H y de HSQC 2D de ¹⁵N/¹H del complejo y de la proteína libre (0,58 ppm para ¹⁵N y -0,06 ppm para ¹H). El cambio mínimo en la posición para los picos entre la IL-17A libre y la IL-17A ligada a Fab' se obtuvo usando Microsoft Excel para calcular la diferencia de desplazamiento químico combinado en ¹⁵N y ¹H para cada pico asignado del espectro HSQC de ¹⁵N/¹H de la proteína libre comparada con el espectro TROSY de ¹⁵N/¹H del complejo con Fab'. Las diferencias combinadas de desplazamiento química en el protón y el nitrógeno del grupo amida ($\Delta\delta$) se definieron según la siguiente ecuación (Ecuación 1), donde $\Delta\delta_{HN}$ y $\Delta\delta_N$ corresponden a las diferencias en los desplazamientos de ¹H y ¹⁵N entre pares de picos comparados y α_N es un factor de escalado de 0,2 requerido para contabilizar las diferencias en el rango de desplazamientos químicos de protón de amida, nitrógeno de amia y carbono. Para cada pico individual, el desplazamiento mínimo inducido por la unión de Fab' se consideró el valor de desplazamiento combinado ($\Delta\delta$) más bajo posible.

$$\Delta\delta = \sqrt{(\Delta\delta_{mH})^2 + (\Delta\delta_N \alpha_N)^2} \quad (\text{Ecuación 1})$$

- 30 Para identificar los sitios de unión a Fab' (epítomos) sobre la IL-17A, se usó un histograma de desplazamiento mínimo combinado frente a secuencia de proteína para revelar las regiones de la IL-17A que contiene señales significativamente perturbadas. Si la dimensión del cambio de desplazamiento químico combinado para aminoácidos individuales excedía un valor umbral, dichos residuos eran seleccionados para una evaluación posterior como posibles residuos de contacto en el sitio de unión a Fab'. Cabe destacar que estos posibles residuos de "contacto" pueden estar implicados en la unión mediante interacciones directas o indirectas (p.ej., alostéricas) con el Fab'. Los valores umbral se fijaron como + 1,5 x SD de todos los datos de desplazamiento mínimo, la media de desplazamiento mínimo +1 SD y la media de desplazamiento químico +2 SD. Las localizaciones de residuos de sitio de unión candidatos fueron examinadas finalmente en la estructura de alta resolución de la IL-17A y solo los residuos posicionados en la superficie de la proteína fueron considerados como disponibles para la unión a Fab'.

Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos > +1,5 x SD de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente >25%:

- 40 SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73, ASP84, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131.

Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos > la media + 1 SD de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente >25%:

SER41, TYR44, ASN45, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73 y ASP84.

Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos $>$ la media $+ 2$ SD de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente $>25\%$:

TYR44, ASN45, TRP51, ASN52 y ASP84.

5 La técnica de RMN descrita antes también fue usada para identificar los sitios de unión de Fab' (epítomos) sobre la IL-17F.

Los valores umbral se fijaron como el desplazamiento mínimo medio, el desplazamiento mínimo medio $+ 0,5$ SD y el desplazamiento mínimo medio $+1$ SD. Las localizaciones de residuos de sitio de unión candidatos fueron examinadas finalmente en la estructura de alta resolución de la IL-17F y solo los residuos posicionados en la superficie de la proteína fueron considerados como disponibles para la unión a Fab'.

10 Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos $>$ la media de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente $>20\%$:

GLN12, LYS13, SER24, ISO32, ASN33, GLU34, ASN35, GLN36, VAL38, SER46, ASN53, TYR54, GLN69, ISO78, ASP85, SER87, MET88, ASM89, GLN94, LYS103 y THR126.

15 Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos $>$ la media $+ 0,5$ SD de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente $>20\%$:

GLN12, SER24, ASN33, GLU34, GLN36, VAL38, ASN53, TYR54, ASP85, MET88, ASM89 y THR126.

Residuos seleccionados como posibles residuos de "contacto" en base a desplazamientos $>$ la media $+ 1$ SD de todos los datos de desplazamientos mínimos, accesibilidad de disolvente $>20\%$:

GLN12, SER24, ASN33, GLU34, ASP85 y MET88.

20 **Ejemplo 6: Modelización de la unión de anticuerpo 496 sobre la IL-17F**

El sitio de unión probable para el anticuerpo 496 sobre la IL-17F se determinó mediante modelización de homología y alojamiento.

25 Se usó MODELLER (Sali, A. & Blundell, T. L., (1993) J. Mol. Biol. 234(3), 779-815) para construir un modelo de homología del anticuerpo 496, usando la estructura de rayos X del anticuerpo CA048_497 (anticuerpo descrito en el documento WO2008/001063). La identidad de secuencia global entre los dos anticuerpos es del 82%. Con dicho nivel de similitud tan elevado, el proceso de modelización de la homología es bien entendido por cualquier especialista en la técnica.

30 El modelo de homología del anticuerpo 496 se acopló entonces a la estructura de rayos X del heterodímero IL-17A/F usando RosettaDock (Gray, J. J., et. al., (2003) J. Mol. Biol., 331(1), 281-299) con el objetivo de construir un modelo 3D del complejo. Se llevó a cabo un proceso de acoplamiento sin restricción global para generar 10.000 señuelos (es decir, potenciales soluciones de acoplamiento). Los 10 mejores señuelos, con las menores puntuaciones de energía, según el RosettaDock, fueron seleccionados para el estudio de perturbación para probar el entorno energético alrededor de cada solución de acoplamiento. Los estudios de perturbación fueron llevados a cabo de nuevo usando RosettaDock. Los señuelos que presentaron un entorno energético de tipo embudo fueron 35 promocionados como candidatos potenciales.

Los candidatos potenciales fueron sometidos entonces a escrutinio frente a la proximidad a los residuos ASP80, GLY81 y ASN82 de la subunidad de IL17A y a los residuos GLN81, GLY82 y LYS83 de la subunidad de IL17F. Se descartaron los candidatos que tenían el anticuerpo 496 localizado a menos de 4 angstroms de cualquiera de dichos residuos. Nótese que los residuos ASP80, GLY81 y ASN82 de la IL17A, que son estructuralmente equivalentes a los 40 residuos GLN81, GLY82 y LYS83 de la IL17F, no fueron identificados como posibles residuos de contacto a través de los datos de desplazamiento mínimo mostrados en el Ejemplo 5, pero fueron identificados como posibles residuos de contacto cuando se estudió la unión del anticuerpo CA048_497 y la IL-17A usando la misma técnica (datos no mostrados).

45 Los candidatos restantes fueron sometidos a continuación a escrutinio para determinar la proximidad a los residuos de IL17F ARG42, GLU45, SER46, ARG47, TRP52, ASN53, THR55, ARG73, ASN74, LEU75, ASP85 y SER87 ("Residuos Clave de IL17F-496"), que son estructuralmente equivalentes a los posibles residuos de contacto de IL17A especificados en el Ejemplo 5. Nótese que los residuos que son estructuralmente equivalentes a VAL128, HIS129 y VAL131 de la IL17A no están presentes en la estructura de rayos X de la IL-17F y por tanto son ignorados. El candidato con la menor suma de distancias entre "Residuos Clave de IL17F-496" y el anticuerpo 496 fue 50 seleccionado como solución final de acoplamiento.

Se llevaron a cabo protocolos de escrutinio de proximidad usando PyMol (DeLano, W.L. The PyMOL Molecular Graphics System (2002) en Internet, <http://www.pymol.org>). Según la solución final de acoplamiento, es de esperar que el anticuerpo 496 se una a IL-17F en uno o más de los siguientes residuos:

SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, CYS72, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, SER90, VAL91, PRO92, GLN94, THR119, CYS122, VAL125, THR126, PRO127, VAL128.

Es de esperar que el anticuerpo 496 se una en una o más de las siguientes regiones, que comprenden los residuos de aminoácido:

- 5 39-42 (SER39, MET40, SER41, ARG42)
47 (ARG47)
53 (ASN53)
72-75 (CYS72, ARG73, ASN74, LEU75)
83-92 (LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, SER90, VAL91, PRO92)
- 10 94 (GLN94)
119 (THR119)
122 (CYS122)
125-128 (VAL125, THR126, PRO127, VAL128).

- 15 Nótese que CYS72, SER90, THR119, CYS122 y VAL125 son menos de un 25% accesibles a disolvente, según la estructura de rayos X de la IL17F, y por tanto no pueden interactuar directamente con el anticuerpo 496. Sin embargo, es probable que dichos residuos apoyen a los residuos de su entorno que están realizando contactos directos con el anticuerpo 496.

Por lo tanto, es de esperar que el anticuerpo 496 se una a IL-17F en uno o más de los siguientes residuos:

- 20 SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127, VAL128.

Ejemplo 7:

La interacción entre 496 e IL-17F fue estudiada mediante cristalografía de rayos X.

Cristalización, Determinación de Estructura y Afino de la estructura cristalina de la IL17F humana acomplejada con Fab 496.

25 Cristalización

- El complejo IL17F humana/Fab 496 cristalizó en forma de pirámides a partir de gotas colgantes a través de la fase vapor a 18,5°C frente a un reservorio de 500 µL de disolución que contenía sulfato amónico 0,85 M, tartrato potásico sódico 0,2 M y tampón Tris 0,05 M, pH 6,9, durante 1-2 semanas en placas Hampton Research VDXm. Las gotas contenían 1 µL de proteína a 10 mg/mL en Hepes 20 mM, pH 7,4, NaCl 50 mM, 0,02% de azida, y 1 µL de disolución de reservorio. Los cristales pertenecen al grupo especial H32 con dimensiones de celda a=b=189,4; c=490,9, y tres moléculas del complejo IL17F/Fab 496 en la unidad asimétrica.
- 30

Toma de datos de difracción de rayos X

- Realizamos la toma de datos de difracción de rayos X a través de un único cristal de IL17F/Fab 496 suspendido en un lazo lito y congelado instantáneamente en nitrógeno líquido, tras pasar brevemente el cristal a través de una disolución crioprotectora que contenía sulfato amónico 1,3 M, tartrato potásico sódico 0,2 M y tampón Tris pH 6,9, y un 30% de glicerol. Los datos de difracción fueron adquiridos en un dispositivo de carga acoplada ADSC Quantum 4 en la estación I03 beamline en el sincrotrón Diamond, Didcot, Oxfordshire, R.U. La longitud de onda del haz monocromático de rayos X fue de 0,9796 Å. El espacio recíproco fue muestreado con un paso de oscilación de 1,0° alrededor del eje goniostático ϕ . Los datos fueron procesados con Mosflm (Leslie, AGW, Joint CCP4 + ESF-EAMCB Newsletter on Protein Crystallography, N° 26; CCP4, Collaborative Computational Project, Number 4. Acta Cryst. D50, 760-763 (1994)).
- 35
- 40

Determinación de Estructura

- La estructura cristalina del complejo IL17F humana/Fab 496 se determinó en dos etapas. En primer lugar se localizó la posición Fab con el programa de sustitución molecular Phaser (Read, RJ, Acta Cryst. D57, 1373-1382 (2001)), usando el Fab con el código PDB limpio de moléculas de agua. Las funciones de rotación transversal y traslación se llevaron a cabo con una resolución de 4,0 Å y con los parámetros por defecto. Se localizaron tres moléculas de Fab. Las búsquedas tras la traducción dieron lugar a una solución con un factor R elevado tras refinamiento de cuerpo rígido en CNX (Brunger, A. et al, Science, 235, 458-460 (1997)). Aunque la densidad electrónica para la IL17F fue visible en
- 45

- 5 mapas de densidad electrónica 2Fo-Fc, no se obtuvo una solución de sustitución molecular para la IL17F usando IL17f(PDB código 1JPY). En su lugar se usó la estructura de un dímero de IL17A para localizar dicha molécula. Se encontró una solución que correspondía con su localización a lo largo de un eje doble. Tras seleccionar una mitad del IL-17A, y sobreponer con la IL-17F, se creó un nuevo modelo de búsqueda que contenía un Fab y una mitad de un dímero de IL17F, con los residuos del extremo N eliminados que produjeron colisiones de simetría. Este modelo de búsqueda fue usado para definir la solución de sustitución molecular final para este medio-complejo.

Construcción y refinamiento de modelo

- 10 La estructura Fab 496/IL17F se construyó a partir de las operaciones de rotación y traslación observadas mediante sustitución molecular. Usando mapas de densidad electrónica 2Fo-Fc y Fo-Fc, se cambiaron los residuos del modelo Fab para reflejar la secuencia del Fab 496. Según estos mapas, uno puede establecer el modelo aproximado de Fab 496 alterando las conformaciones de cadena lateral, reemplazando los aminoácidos presentes en la estructura de modelo por las del Fab 496, así como añadiendo o eliminando residuos. Se realizaron ajustes en las orientaciones conformes de residuos para la IL17F. Usamos el programa de ordenador interactivo O (Jones, TA et al., Acta Cryst. A47, 110-119 (1991)) para llevar a cabo estas manipulaciones.
- 15 Este modelo aproximado fue sometido a rondas de maduración simulada, refinamiento posicional y de factor B usando CNX, seguido de una intervención manual. El refinamiento y la reconstrucción manual se monitorizó a través de la calidad de los mapas de densidad electrónica 2Fo-Fc y Fo-Fc, así como a través del valor de R y R-libre cristalográficos. La resolución usada a través del refinamiento aumentó gradualmente desde 4,0 Å a 3,2 Å según avanzaba el refinamiento, usando en todo el proceso una corrección en bruto de disolvente. El modelo del complejo
- 20 IL17F/Fab 496 abarca los residuos 15 a 133 de la IL17F (véase la SEQ ID NO: 22), los residuos 1 a 214 de la cadena ligera de Fab 496 (SEQ ID NO: 11) y los residuos 1 a 227 de la cadena pesada de Fab 496 (SEQ ID NO: 15). El factor-R del modelo es 0,243, y la R-libre es 0,288 para 56128 reflexiones. La desviación rms de geometría estándar (Engh, R. et al., Acta Cryst., A47, 392-400 (1991)) es de 0,009 Å para longitudes de enlace y de 1,48° para ángulos de enlace.

25 El epítipo

- La interacción entre 496 e IL-17F (que es un homodímero covalente) estudiada mediante cristalografía de rayos X fue de un complejo de fragmentos Fab de 496 incubados con IL-17F humana. La estructura revela los sitios de contacto principales entre Fab 496 e IL-17F, y se identificaron como agrupados principalmente en los lazos CDR del anticuerpo y a lo largo de parte de la longitud de la IL-17F, interaccionando con ambas cadenas de la IL-17F. Según
- 30 la numeración de secuencia mostrada en la SEQ ID NO: 22 para la proteína IL-17F madura, es decir, la proteína IL-17F a partir de la cual se ha escindido el péptido señal, los residuos que interaccionan con la mayor proximidad con la región CDR del Fab 496, en una proximidad 3,0 Å, son Gln71, Cys72, Ile86, Asn89, Ser90 y Val1128 en la primera cadena, y Arg47 en la segunda cadena. Los residuos principales de la IL-17F que están en contacto con el Fab 496 en una proximidad de 3,5 Å son Gln71, Cys72, Asn74, Leu75, Ile86, Asn89, Ser90, Pro92, Val1128, His131 y
- 35 Gln133, en la primera cadena, y Arg37, Ser39, Ser41 y Arg47 en la segunda cadena. Los residuos que están en contacto con Fab 496 en una proximidad de 4,0 Å son Gln71, Cys72, Arg73, Asn74, Leu75, Ile86, Ser87, Asn89, Ser90, Val191, Pro92, Val1128, His131 y Gln133 en la primera cadena, y Asn33, Gln36, Arg37, Ser39, Ser41, Arg42, Ile44 y Arg47 en la segunda cadena. Estos residuos definen el epítipo del anticuerpo 496.

Tabla 1. Coordenadas atómicas de la IL-17F en el complejo con Fab de 496

(H32; a=189,4; b=189,4; c=490,9; $\alpha, \beta=90^\circ$; $\gamma=120^\circ$)

ATOM	1	CB	ALA	A	1	64.135	-69.931	-35.658	1.00101.85	MOL1	C
ATOM	2	C	ALA	A	1	63.428	-68.932	-37.846	1.00100.38	MOL1	C
ATOM	3	O	ALA	A	1	63.710	-68.947	-39.048	1.00103.91	MOL1	O
ATOM	4	N	ALA	A	1	64.812	-67.616	-36.255	1.00 97.55	MOL1	N
ATOM	5	CA	ALA	A	1	64.533	-68.979	-36.793	1.00100.78	MOL1	C
ATOM	6	N	ILE	A	2	62.175	-68.869	-37.394	1.00 93.65	MOL1	N
ATOM	7	CA	ILE	A	2	61.034	-68.831	-38.303	1.00 84.13	MOL1	C
ATOM	8	CB	ILE	A	2	59.767	-68.352	-37.603	1.00 84.62	MOL1	C
ATOM	9	CG2	ILE	A	2	58.563	-68.791	-38.396	1.00 85.22	MOL1	C
ATOM	10	CG1	ILE	A	2	59.667	-68.961	-36.210	1.00 89.64	MOL1	C
ATOM	11	CD1	ILE	A	2	59.427	-70.445	-36.220	1.00 98.49	MOL1	C
ATOM	12	C	ILE	A	2	61.326	-67.860	-39.422	1.00 77.53	MOL1	C
ATOM	13	O	ILE	A	2	61.538	-66.687	-39.176	1.00 75.73	MOL1	O
ATOM	14	N	GLN	A	3	61.335	-68.350	-40.650	1.00 76.57	MOL1	N
ATOM	15	CA	GLN	A	3	61.622	-67.506	-41.795	1.00 82.12	MOL1	C
ATOM	16	CB	GLN	A	3	62.718	-68.157	-42.649	1.00 92.76	MOL1	C
ATOM	17	CG	GLN	A	3	64.019	-68.483	-41.902	1.00101.08	MOL1	C
ATOM	18	CD	GLN	A	3	65.144	-67.494	-42.192	1.00106.71	MOL1	C
ATOM	19	OE1	GLN	A	3	65.504	-67.266	-43.353	1.00109.71	MOL1	O
ATOM	20	NE2	GLN	A	3	65.711	-66.911	-41.138	1.00104.54	MOL1	N
ATOM	21	C	GLN	A	3	60.369	-67.277	-42.642	1.00 81.94	MOL1	C
ATOM	22	O	GLN	A	3	59.813	-68.215	-43.222	1.00 85.46	MOL1	O
ATOM	23	N	LEU	A	4	59.929	-66.027	-42.718	1.00 77.54	MOL1	N
ATOM	24	CA	LEU	A	4	58.748	-65.707	-43.498	1.00 76.02	MOL1	C
ATOM	25	CB	LEU	A	4	57.995	-64.531	-42.867	1.00 77.03	MOL1	C
ATOM	26	CG	LEU	A	4	57.134	-64.833	-41.631	1.00 77.01	MOL1	C
ATOM	27	CD1	LEU	A	4	58.004	-65.184	-40.445	1.00 72.40	MOL1	C
ATOM	28	CD2	LEU	A	4	56.279	-63.620	-41.307	1.00 75.95	MOL1	C
ATOM	29	C	LEU	A	4	59.123	-65.402	-44.944	1.00 76.62	MOL1	C
ATOM	30	O	LEU	A	4	60.057	-64.649	-45.220	1.00 78.44	MOL1	O
ATOM	31	N	THR	A	5	58.379	-65.986	-45.872	1.00 76.08	MOL1	N
ATOM	32	CA	THR	A	5	58.668	-65.805	-47.281	1.00 77.89	MOL1	C
ATOM	33	CB	THR	A	5	59.111	-67.158	-47.884	1.00 86.00	MOL1	C
ATOM	34	OG1	THR	A	5	60.135	-67.731	-47.054	1.00 85.74	MOL1	O
ATOM	35	CG2	THR	A	5	59.642	-66.978	-49.307	1.00 86.71	MOL1	C
ATOM	36	C	THR	A	5	57.485	-65.246	-48.068	1.00 74.23	MOL1	C
ATOM	37	O	THR	A	5	56.634	-65.998	-48.559	1.00 76.11	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	38	N	GLN	A	6	57.434	-63.926	-48.191	1.00	67.23	MOL1	N
ATOM	39	CA	GLN	A	6	56.353	-63.292	-48.928	1.00	66.03	MOL1	C
ATOM	40	CB	GLN	A	6	56.383	-61.786	-48.732	1.00	60.93	MOL1	C
ATOM	41	CG	GLN	A	6	56.267	-61.364	-47.295	1.00	59.07	MOL1	C
ATOM	42	CD	GLN	A	6	55.893	-59.916	-47.174	1.00	60.94	MOL1	C
ATOM	43	OE1	GLN	A	6	55.813	-59.381	-46.076	1.00	66.71	MOL1	O
ATOM	44	NE2	GLN	A	6	55.651	-59.269	-48.309	1.00	54.84	MOL1	N
ATOM	45	C	GLN	A	6	56.500	-63.599	-50.398	1.00	67.13	MOL1	C
ATOM	46	O	GLN	A	6	57.566	-64.008	-50.840	1.00	69.36	MOL1	O
ATOM	47	N	SER	A	7	55.430	-63.396	-51.156	1.00	69.44	MOL1	N
ATOM	48	CA	SER	A	7	55.450	-63.654	-52.591	1.00	72.19	MOL1	C
ATOM	49	CB	SER	A	7	55.687	-65.142	-52.853	1.00	75.98	MOL1	C
ATOM	50	OG	SER	A	7	54.856	-65.954	-52.047	1.00	81.94	MOL1	O
ATOM	51	C	SER	A	7	54.147	-63.217	-53.228	1.00	72.06	MOL1	C
ATOM	52	O	SER	A	7	53.071	-63.493	-52.707	1.00	78.33	MOL1	O
ATOM	53	N	PRO	A	8	54.227	-62.516	-54.361	1.00	69.31	MOL1	N
ATOM	54	CD	PRO	A	8	53.099	-62.002	-55.147	1.00	73.31	MOL1	C
ATOM	55	CA	PRO	A	8	55.463	-62.155	-55.002	1.00	70.91	MOL1	C
ATOM	56	CB	PRO	A	8	55.025	-61.554	-56.323	1.00	72.80	MOL1	C
ATOM	57	CG	PRO	A	8	53.757	-60.910	-55.950	1.00	72.88	MOL1	C
ATOM	58	C	PRO	A	8	56.259	-61.164	-54.164	1.00	69.23	MOL1	C
ATOM	59	O	PRO	A	8	55.781	-60.717	-53.132	1.00	70.34	MOL1	O
ATOM	60	N	SER	A	9	57.467	-60.838	-54.601	1.00	69.17	MOL1	N
ATOM	61	CA	SER	A	9	58.273	-59.881	-53.879	1.00	66.93	MOL1	C
ATOM	62	CB	SER	A	9	59.749	-60.210	-54.018	1.00	73.37	MOL1	C
ATOM	63	OG	SER	A	9	60.038	-61.381	-53.269	1.00	83.72	MOL1	O
ATOM	64	C	SER	A	9	57.951	-58.524	-54.453	1.00	63.36	MOL1	C
ATOM	65	O	SER	A	9	58.048	-57.512	-53.777	1.00	67.00	MOL1	O
ATOM	66	N	SER	A	10	57.544	-58.512	-55.708	1.00	57.29	MOL1	N
ATOM	67	CA	SER	A	10	57.151	-57.276	-56.358	1.00	55.01	MOL1	C
ATOM	68	CB	SER	A	10	58.253	-56.771	-57.294	1.00	57.78	MOL1	C
ATOM	69	OG	SER	A	10	57.805	-55.674	-58.082	1.00	62.00	MOL1	O
ATOM	70	C	SER	A	10	55.911	-57.621	-57.159	1.00	55.31	MOL1	C
ATOM	71	O	SER	A	10	55.526	-58.787	-57.245	1.00	56.46	MOL1	O
ATOM	72	N	LEU	A	11	55.281	-56.613	-57.742	1.00	53.75	MOL1	N
ATOM	73	CA	LEU	A	11	54.098	-56.851	-58.548	1.00	50.55	MOL1	C
ATOM	74	CB	LEU	A	11	53.090	-57.669	-57.754	1.00	43.48	MOL1	C
ATOM	75	CG	LEU	A	11	51.993	-56.877	-57.070	1.00	44.84	MOL1	C
ATOM	76	CD1	LEU	A	11	50.917	-56.523	-58.096	1.00	49.00	MOL1	C
ATOM	77	CD2	LEU	A	11	51.412	-57.704	-55.952	1.00	42.51	MOL1	C
ATOM	78	C	LEU	A	11	53.478	-55.536	-59.002	1.00	50.49	MOL1	C
ATOM	79	O	LEU	A	11	53.350	-54.595	-58.225	1.00	44.62	MOL1	O
ATOM	80	N	SER	A	12	53.111	-55.471	-60.275	1.00	56.63	MOL1	N
ATOM	81	CA	SER	A	12	52.491	-54.273	-60.825	1.00	62.24	MOL1	C
ATOM	82	CB	SER	A	12	53.076	-53.922	-62.199	1.00	63.67	MOL1	C
ATOM	83	OG	SER	A	12	54.373	-53.355	-62.082	1.00	74.97	MOL1	O
ATOM	84	C	SER	A	12	51.001	-54.519	-60.960	1.00	62.36	MOL1	C
ATOM	85	O	SER	A	12	50.573	-55.593	-61.383	1.00	66.42	MOL1	O
ATOM	86	N	ALA	A	13	50.216	-53.517	-60.593	1.00	60.34	MOL1	N
ATOM	87	CA	ALA	A	13	48.768	-53.613	-60.654	1.00	56.37	MOL1	C
ATOM	88	CB	ALA	A	13	48.232	-54.119	-59.330	1.00	52.68	MOL1	C
ATOM	89	C	ALA	A	13	48.196	-52.241	-60.964	1.00	57.76	MOL1	C
ATOM	90	O	ALA	A	13	48.927	-51.236	-60.931	1.00	56.32	MOL1	O
ATOM	91	N	SER	A	14	46.895	-52.204	-61.263	1.00	56.07	MOL1	N
ATOM	92	CA	SER	A	14	46.202	-50.957	-61.594	1.00	58.55	MOL1	C
ATOM	93	CB	SER	A	14	45.601	-51.052	-62.987	1.00	58.96	MOL1	C
ATOM	94	OG	SER	A	14	46.285	-52.023	-63.759	1.00	71.46	MOL1	O
ATOM	95	C	SER	A	14	45.089	-50.686	-60.596	1.00	55.27	MOL1	C
ATOM	96	O	SER	A	14	44.547	-51.621	-60.008	1.00	53.63	MOL1	O
ATOM	97	N	VAL	A	15	44.748	-49.411	-60.407	1.00	52.20	MOL1	N
ATOM	98	CA	VAL	A	15	43.687	-49.047	-59.472	1.00	45.77	MOL1	C
ATOM	99	CB	VAL	A	15	43.201	-47.592	-59.665	1.00	37.82	MOL1	C
ATOM	100	CG1	VAL	A	15	42.027	-47.348	-58.802	1.00	32.20	MOL1	C
ATOM	101	CG2	VAL	A	15	44.273	-46.607	-59.305	1.00	34.78	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	102	C	VAL	A	15	42.489	-49.966	-59.685	1.00	48.79	MOL1	C
ATOM	103	O	VAL	A	15	42.048	-50.197	-60.819	1.00	49.28	MOL1	O
ATOM	104	N	GLY	A	16	41.973	-50.504	-58.592	1.00	45.79	MOL1	N
ATOM	105	CA	GLY	A	16	40.830	-51.373	-58.703	1.00	52.21	MOL1	C
ATOM	106	C	GLY	A	16	41.181	-52.836	-58.601	1.00	56.48	MOL1	C
ATOM	107	O	GLY	A	16	40.444	-53.606	-57.979	1.00	63.88	MOL1	O
ATOM	108	N	ASP	A	17	42.290	-53.233	-59.215	1.00	55.01	MOL1	N
ATOM	109	CA	ASP	A	17	42.716	-54.635	-59.164	1.00	58.91	MOL1	C
ATOM	110	CB	ASP	A	17	44.180	-54.760	-59.601	1.00	65.37	MOL1	C
ATOM	111	CG	ASP	A	17	44.367	-54.622	-61.100	1.00	70.44	MOL1	C
ATOM	112	OD1	ASP	A	17	45.147	-53.733	-61.531	1.00	59.18	MOL1	O
ATOM	113	OD2	ASP	A	17	43.742	-55.421	-61.836	1.00	74.78	MOL1	O
ATOM	114	C	ASP	A	17	42.575	-55.254	-57.761	1.00	54.18	MOL1	C
ATOM	115	O	ASP	A	17	42.559	-54.547	-56.761	1.00	55.66	MOL1	O
ATOM	116	N	ARG	A	18	42.462	-56.571	-57.693	1.00	48.09	MOL1	N
ATOM	117	CA	ARG	A	18	42.366	-57.231	-56.411	1.00	55.61	MOL1	C
ATOM	118	CB	ARG	A	18	41.284	-58.316	-56.404	1.00	69.85	MOL1	C
ATOM	119	CG	ARG	A	18	41.140	-59.019	-55.033	1.00	84.25	MOL1	C
ATOM	120	CD	ARG	A	18	40.007	-60.048	-54.994	1.00	96.26	MOL1	C
ATOM	121	NE	ARG	A	18	40.377	-61.322	-55.613	1.00	111.22	MOL1	N
ATOM	122	CZ	ARG	A	18	40.792	-62.397	-54.941	1.00	117.53	MOL1	C
ATOM	123	NH1	ARG	A	18	40.889	-62.360	-53.615	1.00	117.33	MOL1	N
ATOM	124	NH2	ARG	A	18	41.110	-63.514	-55.596	1.00	116.29	MOL1	N
ATOM	125	C	ARG	A	18	43.710	-57.871	-56.135	1.00	58.76	MOL1	C
ATOM	126	O	ARG	A	18	43.918	-59.053	-56.418	1.00	65.72	MOL1	O
ATOM	127	N	VAL	A	19	44.628	-57.086	-55.588	1.00	56.07	MOL1	N
ATOM	128	CA	VAL	A	19	45.966	-57.576	-55.268	1.00	53.63	MOL1	C
ATOM	129	CB	VAL	A	19	46.908	-56.394	-54.920	1.00	55.93	MOL1	C
ATOM	130	CG1	VAL	A	19	48.281	-56.927	-54.521	1.00	55.97	MOL1	C
ATOM	131	CG2	VAL	A	19	47.004	-55.420	-56.108	1.00	42.74	MOL1	C
ATOM	132	C	VAL	A	19	45.964	-58.593	-54.112	1.00	51.70	MOL1	C
ATOM	133	O	VAL	A	19	45.146	-58.511	-53.190	1.00	49.50	MOL1	O
ATOM	134	N	THR	A	20	46.885	-59.549	-54.172	1.00	49.46	MOL1	N
ATOM	135	CA	THR	A	20	46.983	-60.583	-53.149	1.00	54.36	MOL1	C
ATOM	136	CB	THR	A	20	46.232	-61.841	-53.579	1.00	58.85	MOL1	C
ATOM	137	OG1	THR	A	20	44.838	-61.542	-53.667	1.00	70.14	MOL1	O
ATOM	138	CG2	THR	A	20	46.450	-62.967	-52.576	1.00	59.96	MOL1	C
ATOM	139	C	THR	A	20	48.427	-60.973	-52.863	1.00	53.08	MOL1	C
ATOM	140	O	THR	A	20	49.137	-61.449	-53.736	1.00	55.72	MOL1	O
ATOM	141	N	ILE	A	21	48.849	-60.783	-51.626	1.00	49.50	MOL1	N
ATOM	142	CA	ILE	A	21	50.201	-61.088	-51.217	1.00	41.41	MOL1	C
ATOM	143	CB	ILE	A	21	50.802	-59.884	-50.503	1.00	38.15	MOL1	C
ATOM	144	CG2	ILE	A	21	52.083	-60.247	-49.827	1.00	34.27	MOL1	C
ATOM	145	CG1	ILE	A	21	51.001	-58.760	-51.510	1.00	38.51	MOL1	C
ATOM	146	CD1	ILE	A	21	51.246	-57.416	-50.864	1.00	49.11	MOL1	C
ATOM	147	C	ILE	A	21	50.140	-62.268	-50.285	1.00	44.55	MOL1	C
ATOM	148	O	ILE	A	21	49.183	-62.428	-49.550	1.00	52.97	MOL1	O
ATOM	149	N	THR	A	22	51.169	-63.095	-50.310	1.00	48.57	MOL1	N
ATOM	150	CA	THR	A	22	51.210	-64.278	-49.467	1.00	52.07	MOL1	C
ATOM	151	CB	THR	A	22	51.296	-65.552	-50.308	1.00	55.40	MOL1	C
ATOM	152	OG1	THR	A	22	50.290	-65.514	-51.325	1.00	62.21	MOL1	O
ATOM	153	CG2	THR	A	22	51.090	-66.788	-49.435	1.00	58.38	MOL1	C
ATOM	154	C	THR	A	22	52.435	-64.240	-48.597	1.00	51.61	MOL1	C
ATOM	155	O	THR	A	22	53.390	-63.554	-48.912	1.00	50.06	MOL1	O
ATOM	156	N	CYS	A	23	52.420	-65.001	-47.512	1.00	56.21	MOL1	N
ATOM	157	CA	CYS	A	23	53.560	-65.048	-46.609	1.00	62.68	MOL1	C
ATOM	158	C	CYS	A	23	53.660	-66.404	-45.926	1.00	68.74	MOL1	C
ATOM	159	O	CYS	A	23	53.256	-66.566	-44.778	1.00	68.17	MOL1	O
ATOM	160	CB	CYS	A	23	53.441	-63.935	-45.571	1.00	65.09	MOL1	C
ATOM	161	SG	CYS	A	23	54.612	-63.909	-44.165	1.00	70.81	MOL1	S
ATOM	162	N	ARG	A	24	54.201	-67.377	-46.652	1.00	77.18	MOL1	N
ATOM	163	CA	ARG	A	24	54.379	-68.736	-46.147	1.00	84.44	MOL1	C
ATOM	164	CB	ARG	A	24	54.742	-69.656	-47.332	1.00	95.87	MOL1	C
ATOM	165	CG	ARG	A	24	54.432	-71.160	-47.168	1.00	108.89	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	166	CD	ARG	A	24	55.506	-71.938	-46.383	1.00119.33	MOL1	C
ATOM	167	NE	ARG	A	24	55.120	-73.333	-46.140	1.00124.33	MOL1	N
ATOM	168	CZ	ARG	A	24	55.845	-74.215	-45.452	1.00127.65	MOL1	C
ATOM	169	NH1	ARG	A	24	57.012	-73.863	-44.927	1.00129.22	MOL1	N
ATOM	170	NH2	ARG	A	24	55.397	-75.454	-45.277	1.00127.95	MOL1	N
ATOM	171	C	ARG	A	24	55.511	-68.687	-45.111	1.00 84.04	MOL1	C
ATOM	172	O	ARG	A	24	56.466	-67.926	-45.271	1.00 84.20	MOL1	O
ATOM	173	N	ALA	A	25	55.416	-69.484	-44.051	1.00 83.87	MOL1	N
ATOM	174	CA	ALA	A	25	56.461	-69.462	-43.031	1.00 88.97	MOL1	C
ATOM	175	CB	ALA	A	25	55.987	-68.685	-41.807	1.00 83.58	MOL1	C
ATOM	176	C	ALA	A	25	57.012	-70.808	-42.583	1.00 93.69	MOL1	C
ATOM	177	O	ALA	A	25	56.280	-71.784	-42.408	1.00 93.21	MOL1	O
ATOM	178	N	ASP	A	26	58.327	-70.813	-42.395	1.00 98.19	MOL1	N
ATOM	179	CA	ASP	A	26	59.114	-71.947	-41.937	1.00101.85	MOL1	C
ATOM	180	CB	ASP	A	26	60.324	-71.372	-41.202	1.00110.27	MOL1	C
ATOM	181	CG	ASP	A	26	61.348	-72.408	-40.854	1.00121.51	MOL1	C
ATOM	182	OD1	ASP	A	26	62.404	-72.014	-40.315	1.00124.97	MOL1	O
ATOM	183	OD2	ASP	A	26	61.102	-73.607	-41.114	1.00133.17	MOL1	O
ATOM	184	C	ASP	A	26	58.330	-72.912	-41.031	1.00101.21	MOL1	C
ATOM	185	O	ASP	A	26	57.944	-74.006	-41.455	1.00100.34	MOL1	O
ATOM	186	N	GLU	A	27	58.111	-72.498	-39.786	1.00100.36	MOL1	N
ATOM	187	CA	GLU	A	27	57.378	-73.295	-38.808	1.00105.27	MOL1	C
ATOM	188	CB	GLU	A	27	58.046	-73.174	-37.434	1.00114.82	MOL1	C
ATOM	189	CG	GLU	A	27	59.493	-73.679	-37.373	1.00130.16	MOL1	C
ATOM	190	CD	GLU	A	27	59.608	-75.187	-37.133	1.00139.75	MOL1	C
ATOM	191	OE1	GLU	A	27	59.170	-75.660	-36.058	1.00142.50	MOL1	O
ATOM	192	OE2	GLU	A	27	60.144	-75.898	-38.017	1.00142.27	MOL1	O
ATOM	193	C	GLU	A	27	55.920	-72.825	-38.719	1.00103.78	MOL1	C
ATOM	194	O	GLU	A	27	55.398	-72.228	-39.663	1.00105.79	MOL1	O
ATOM	195	N	SER	A	28	55.270	-73.097	-37.587	1.00 98.98	MOL1	N
ATOM	196	CA	SER	A	28	53.876	-72.706	-37.377	1.00 93.29	MOL1	C
ATOM	197	CB	SER	A	28	53.077	-73.882	-36.796	1.00 94.85	MOL1	C
ATOM	198	OG	SER	A	28	51.722	-73.537	-36.538	1.00 86.40	MOL1	O
ATOM	199	C	SER	A	28	53.804	-71.523	-36.426	1.00 89.30	MOL1	C
ATOM	200	O	SER	A	28	54.496	-71.499	-35.418	1.00 88.29	MOL1	O
ATOM	201	N	VAL	A	29	52.960	-70.548	-36.742	1.00 85.47	MOL1	N
ATOM	202	CA	VAL	A	29	52.824	-69.375	-35.895	1.00 80.22	MOL1	C
ATOM	203	CB	VAL	A	29	53.247	-68.131	-36.651	1.00 79.07	MOL1	C
ATOM	204	CG1	VAL	A	29	54.746	-67.943	-36.514	1.00 74.72	MOL1	C
ATOM	205	CG2	VAL	A	29	52.870	-68.278	-38.111	1.00 74.69	MOL1	C
ATOM	206	C	VAL	A	29	51.433	-69.174	-35.317	1.00 79.76	MOL1	C
ATOM	207	O	VAL	A	29	51.265	-68.406	-34.377	1.00 81.49	MOL1	O
ATOM	208	N	THR	A	30	50.441	-69.854	-35.886	1.00 78.92	MOL1	N
ATOM	209	CA	THR	A	30	49.066	-69.788	-35.395	1.00 76.47	MOL1	C
ATOM	210	CB	THR	A	30	48.880	-70.697	-34.149	1.00 81.34	MOL1	C
ATOM	211	OG1	THR	A	30	49.772	-70.277	-33.101	1.00 70.40	MOL1	O
ATOM	212	CG2	THR	A	30	49.159	-72.154	-34.501	1.00 88.52	MOL1	C
ATOM	213	C	THR	A	30	48.560	-68.414	-34.995	1.00 72.85	MOL1	C
ATOM	214	O	THR	A	30	48.860	-67.931	-33.910	1.00 77.37	MOL1	O
ATOM	215	N	THR	A	31	47.780	-67.792	-35.859	1.00 65.58	MOL1	N
ATOM	216	CA	THR	A	31	47.204	-66.490	-35.554	1.00 65.07	MOL1	C
ATOM	217	CB	THR	A	31	46.132	-66.605	-34.447	1.00 62.31	MOL1	C
ATOM	218	OG1	THR	A	31	46.758	-66.543	-33.161	1.00 62.48	MOL1	O
ATOM	219	CG2	THR	A	31	45.375	-67.912	-34.576	1.00 59.69	MOL1	C
ATOM	220	C	THR	A	31	48.144	-65.340	-35.168	1.00 63.64	MOL1	C
ATOM	221	O	THR	A	31	47.730	-64.175	-35.226	1.00 69.01	MOL1	O
ATOM	222	N	LEU	A	32	49.386	-65.628	-34.773	1.00 53.42	MOL1	N
ATOM	223	CA	LEU	A	32	50.282	-64.535	-34.409	1.00 46.42	MOL1	C
ATOM	224	CB	LEU	A	32	51.263	-64.942	-33.314	1.00 39.87	MOL1	C
ATOM	225	CG	LEU	A	32	50.570	-65.258	-31.986	1.00 46.68	MOL1	C
ATOM	226	CD1	LEU	A	32	51.221	-64.518	-30.820	1.00 43.33	MOL1	C
ATOM	227	CD2	LEU	A	32	49.117	-64.863	-32.109	1.00 44.87	MOL1	C
ATOM	228	C	LEU	A	32	51.040	-63.975	-35.598	1.00 46.61	MOL1	C
ATOM	229	O	LEU	A	32	52.238	-63.738	-35.533	1.00 52.07	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	230	N	MET	A	33	50.322	-63.762	-36.690	1.00	43.06	MOL1	N
ATOM	231	CA	MET	A	33	50.889	-63.191	-37.889	1.00	41.75	MOL1	C
ATOM	232	CB	MET	A	33	50.483	-64.018	-39.096	1.00	41.68	MOL1	C
ATOM	233	CG	MET	A	33	51.029	-63.483	-40.389	1.00	51.79	MOL1	C
ATOM	234	SD	MET	A	33	52.828	-63.453	-40.386	1.00	67.13	MOL1	S
ATOM	235	CE	MET	A	33	53.193	-64.771	-41.526	1.00	56.01	MOL1	C
ATOM	236	C	MET	A	33	50.293	-61.789	-37.983	1.00	43.97	MOL1	C
ATOM	237	O	MET	A	33	49.131	-61.584	-37.651	1.00	45.70	MOL1	O
ATOM	238	N	HIS	A	34	51.082	-60.819	-38.426	1.00	43.67	MOL1	N
ATOM	239	CA	HIS	A	34	50.605	-59.449	-38.530	1.00	39.94	MOL1	C
ATOM	240	CB	HIS	A	34	51.145	-58.649	-37.367	1.00	35.91	MOL1	C
ATOM	241	CG	HIS	A	34	51.087	-59.377	-36.065	1.00	40.27	MOL1	C
ATOM	242	CD2	HIS	A	34	52.053	-59.680	-35.168	1.00	41.79	MOL1	C
ATOM	243	ND1	HIS	A	34	49.913	-59.870	-35.542	1.00	44.64	MOL1	N
ATOM	244	CE1	HIS	A	34	50.158	-60.439	-34.376	1.00	42.55	MOL1	C
ATOM	245	NE2	HIS	A	34	51.449	-60.337	-34.126	1.00	40.07	MOL1	N
ATOM	246	C	HIS	A	34	51.081	-58.825	-39.825	1.00	45.33	MOL1	C
ATOM	247	O	HIS	A	34	51.997	-59.330	-40.447	1.00	56.68	MOL1	O
ATOM	248	N	TRP	A	35	50.468	-57.728	-40.243	1.00	46.73	MOL1	N
ATOM	249	CA	TRP	A	35	50.897	-57.072	-41.468	1.00	41.10	MOL1	C
ATOM	250	CB	TRP	A	35	49.885	-57.289	-42.575	1.00	44.24	MOL1	C
ATOM	251	CG	TRP	A	35	49.856	-58.687	-43.087	1.00	47.88	MOL1	C
ATOM	252	CD2	TRP	A	35	50.552	-59.193	-44.232	1.00	49.52	MOL1	C
ATOM	253	CE2	TRP	A	35	50.216	-60.552	-44.354	1.00	49.33	MOL1	C
ATOM	254	CE3	TRP	A	35	51.430	-58.628	-45.162	1.00	49.53	MOL1	C
ATOM	255	CD1	TRP	A	35	49.156	-59.729	-42.574	1.00	44.24	MOL1	C
ATOM	256	NE1	TRP	A	35	49.360	-60.855	-43.329	1.00	47.22	MOL1	N
ATOM	257	CZ2	TRP	A	35	50.723	-61.358	-45.370	1.00	50.90	MOL1	C
ATOM	258	CZ3	TRP	A	35	51.935	-59.428	-46.168	1.00	52.17	MOL1	C
ATOM	259	CH2	TRP	A	35	51.580	-60.781	-46.265	1.00	52.09	MOL1	C
ATOM	260	C	TRP	A	35	51.106	-55.592	-41.280	1.00	39.10	MOL1	C
ATOM	261	O	TRP	A	35	50.346	-54.931	-40.592	1.00	44.85	MOL1	O
ATOM	262	N	TYR	A	36	52.154	-55.076	-41.896	1.00	37.01	MOL1	N
ATOM	263	CA	TYR	A	36	52.477	-53.659	-41.818	1.00	34.30	MOL1	C
ATOM	264	CB	TYR	A	36	53.802	-53.452	-41.096	1.00	26.67	MOL1	C
ATOM	265	CG	TYR	A	36	53.852	-53.935	-39.675	1.00	29.74	MOL1	C
ATOM	266	CD1	TYR	A	36	53.482	-53.108	-38.630	1.00	32.47	MOL1	C
ATOM	267	CE1	TYR	A	36	53.565	-53.530	-37.315	1.00	33.73	MOL1	C
ATOM	268	CD2	TYR	A	36	54.304	-55.210	-39.372	1.00	32.94	MOL1	C
ATOM	269	CE2	TYR	A	36	54.390	-55.651	-38.063	1.00	32.23	MOL1	C
ATOM	270	CZ	TYR	A	36	54.020	-54.805	-37.034	1.00	39.55	MOL1	C
ATOM	271	OH	TYR	A	36	54.109	-55.225	-35.718	1.00	39.71	MOL1	O
ATOM	272	C	TYR	A	36	52.635	-53.128	-43.234	1.00	34.60	MOL1	C
ATOM	273	O	TYR	A	36	52.911	-53.882	-44.161	1.00	39.81	MOL1	O
ATOM	274	N	GLN	A	37	52.464	-51.829	-43.409	1.00	31.56	MOL1	N
ATOM	275	CA	GLN	A	37	52.653	-51.253	-44.722	1.00	30.34	MOL1	C
ATOM	276	CB	GLN	A	37	51.352	-50.726	-45.293	1.00	23.81	MOL1	C
ATOM	277	CG	GLN	A	37	51.246	-49.247	-45.228	1.00	22.13	MOL1	C
ATOM	278	CD	GLN	A	37	50.323	-48.707	-46.279	1.00	32.73	MOL1	C
ATOM	279	OE1	GLN	A	37	49.891	-47.556	-46.199	1.00	46.81	MOL1	O
ATOM	280	NE2	GLN	A	37	50.016	-49.527	-47.287	1.00	24.92	MOL1	N
ATOM	281	C	GLN	A	37	53.647	-50.126	-44.581	1.00	34.22	MOL1	C
ATOM	282	O	GLN	A	37	53.724	-49.490	-43.538	1.00	41.80	MOL1	O
ATOM	283	N	GLN	A	38	54.440	-49.882	-45.611	1.00	36.15	MOL1	N
ATOM	284	CA	GLN	A	38	55.405	-48.801	-45.516	1.00	35.62	MOL1	C
ATOM	285	CB	GLN	A	38	56.743	-49.324	-45.023	1.00	32.87	MOL1	C
ATOM	286	CG	GLN	A	38	57.828	-48.289	-45.090	1.00	38.05	MOL1	C
ATOM	287	CD	GLN	A	38	59.145	-48.758	-44.498	1.00	42.59	MOL1	C
ATOM	288	OE1	GLN	A	38	59.598	-49.876	-44.760	1.00	42.39	MOL1	O
ATOM	289	NE2	GLN	A	38	59.779	-47.892	-43.708	1.00	36.19	MOL1	N
ATOM	290	C	GLN	A	38	55.588	-48.109	-46.839	1.00	36.42	MOL1	C
ATOM	291	O	GLN	A	38	55.911	-48.752	-47.830	1.00	39.70	MOL1	O
ATOM	292	N	LYS	A	39	55.353	-46.800	-46.857	1.00	37.89	MOL1	N
ATOM	293	CA	LYS	A	39	55.509	-46.014	-48.078	1.00	41.72	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	294	CB	LYS	A	39	54.682	-44.722	-48.051	1.00	37.51	MOL1	C
ATOM	295	CG	LYS	A	39	53.216	-44.884	-47.725	1.00	44.18	MOL1	C
ATOM	296	CD	LYS	A	39	52.470	-45.653	-48.785	1.00	42.55	MOL1	C
ATOM	297	CE	LYS	A	39	50.969	-45.457	-48.626	1.00	42.83	MOL1	C
ATOM	298	NZ	LYS	A	39	50.575	-44.017	-48.679	1.00	43.58	MOL1	N
ATOM	299	C	LYS	A	39	56.967	-45.625	-48.097	1.00	45.26	MOL1	C
ATOM	300	O	LYS	A	39	57.645	-45.729	-47.087	1.00	42.51	MOL1	O
ATOM	301	N	PRO	A	40	57.463	-45.152	-49.243	1.00	50.43	MOL1	N
ATOM	302	CD	PRO	A	40	56.783	-45.080	-50.543	1.00	57.17	MOL1	C
ATOM	303	CA	PRO	A	40	58.864	-44.749	-49.360	1.00	50.55	MOL1	C
ATOM	304	CB	PRO	A	40	59.011	-44.416	-50.834	1.00	50.04	MOL1	C
ATOM	305	CG	PRO	A	40	57.937	-45.247	-51.486	1.00	65.03	MOL1	C
ATOM	306	C	PRO	A	40	59.141	-43.535	-48.501	1.00	55.95	MOL1	C
ATOM	307	O	PRO	A	40	58.425	-42.534	-48.591	1.00	57.59	MOL1	O
ATOM	308	N	GLY	A	41	60.171	-43.627	-47.665	1.00	59.86	MOL1	N
ATOM	309	CA	GLY	A	41	60.536	-42.501	-46.823	1.00	63.21	MOL1	C
ATOM	310	C	GLY	A	41	59.937	-42.484	-45.434	1.00	67.58	MOL1	C
ATOM	311	O	GLY	A	41	60.609	-42.093	-44.479	1.00	70.86	MOL1	O
ATOM	312	N	LYS	A	42	58.678	-42.894	-45.308	1.00	66.25	MOL1	N
ATOM	313	CA	LYS	A	42	58.036	-42.913	-44.005	1.00	62.93	MOL1	C
ATOM	314	CB	LYS	A	42	56.532	-42.646	-44.175	1.00	74.75	MOL1	C
ATOM	315	CG	LYS	A	42	55.962	-41.619	-43.159	1.00	91.14	MOL1	C
ATOM	316	CD	LYS	A	42	55.795	-42.209	-41.726	1.00	87.95	MOL1	C
ATOM	317	CE	LYS	A	42	56.220	-41.239	-40.612	1.00	79.63	MOL1	C
ATOM	318	NZ	LYS	A	42	57.692	-41.271	-40.342	1.00	67.73	MOL1	N
ATOM	319	C	LYS	A	42	58.321	-44.251	-43.273	1.00	54.36	MOL1	C
ATOM	320	O	LYS	A	42	58.987	-45.129	-43.827	1.00	53.81	MOL1	O
ATOM	321	N	ALA	A	43	57.853	-44.398	-42.032	1.00	41.27	MOL1	N
ATOM	322	CA	ALA	A	43	58.090	-45.624	-41.269	1.00	37.44	MOL1	C
ATOM	323	CB	ALA	A	43	58.311	-45.298	-39.829	1.00	31.23	MOL1	C
ATOM	324	C	ALA	A	43	56.951	-46.613	-41.384	1.00	39.99	MOL1	C
ATOM	325	O	ALA	A	43	55.837	-46.236	-41.720	1.00	48.24	MOL1	O
ATOM	326	N	PRO	A	44	57.207	-47.892	-41.064	1.00	40.76	MOL1	N
ATOM	327	CD	PRO	A	44	58.327	-48.380	-40.244	1.00	43.70	MOL1	C
ATOM	328	CA	PRO	A	44	56.163	-48.916	-41.154	1.00	39.42	MOL1	C
ATOM	329	CB	PRO	A	44	56.766	-50.111	-40.410	1.00	41.43	MOL1	C
ATOM	330	CG	PRO	A	44	58.225	-49.868	-40.429	1.00	40.94	MOL1	C
ATOM	331	C	PRO	A	44	54.900	-48.418	-40.470	1.00	39.92	MOL1	C
ATOM	332	O	PRO	A	44	54.952	-47.488	-39.662	1.00	42.44	MOL1	O
ATOM	333	N	LYS	A	45	53.773	-49.041	-40.792	1.00	33.97	MOL1	N
ATOM	334	CA	LYS	A	45	52.500	-48.663	-40.211	1.00	29.31	MOL1	C
ATOM	335	CB	LYS	A	45	51.802	-47.628	-41.110	1.00	23.93	MOL1	C
ATOM	336	CG	LYS	A	45	50.614	-46.938	-40.477	1.00	49.73	MOL1	C
ATOM	337	CD	LYS	A	45	49.426	-47.914	-40.236	1.00	65.12	MOL1	C
ATOM	338	CE	LYS	A	45	48.637	-47.640	-38.911	1.00	69.62	MOL1	C
ATOM	339	NZ	LYS	A	45	49.396	-47.958	-37.634	1.00	66.75	MOL1	N
ATOM	340	C	LYS	A	45	51.706	-49.954	-40.101	1.00	25.70	MOL1	C
ATOM	341	O	LYS	A	45	51.601	-50.709	-41.051	1.00	28.05	MOL1	O
ATOM	342	N	LEU	A	46	51.168	-50.228	-38.925	1.00	27.60	MOL1	N
ATOM	343	CA	LEU	A	46	50.410	-51.452	-38.738	1.00	28.62	MOL1	C
ATOM	344	CB	LEU	A	46	50.121	-51.647	-37.252	1.00	22.22	MOL1	C
ATOM	345	CG	LEU	A	46	49.308	-52.852	-36.800	1.00	29.50	MOL1	C
ATOM	346	CD1	LEU	A	46	49.954	-54.157	-37.235	1.00	34.12	MOL1	C
ATOM	347	CD2	LEU	A	46	49.202	-52.805	-35.296	1.00	32.37	MOL1	C
ATOM	348	C	LEU	A	46	49.115	-51.466	-39.540	1.00	31.21	MOL1	C
ATOM	349	O	LEU	A	46	48.347	-50.516	-39.528	1.00	35.06	MOL1	O
ATOM	350	N	LEU	A	47	48.887	-52.555	-40.256	1.00	36.36	MOL1	N
ATOM	351	CA	LEU	A	47	47.682	-52.715	-41.051	1.00	34.09	MOL1	C
ATOM	352	CB	LEU	A	47	48.012	-53.198	-42.458	1.00	32.28	MOL1	C
ATOM	353	CG	LEU	A	47	48.244	-52.143	-43.523	1.00	40.18	MOL1	C
ATOM	354	CD1	LEU	A	47	48.267	-52.787	-44.907	1.00	38.84	MOL1	C
ATOM	355	CD2	LEU	A	47	47.122	-51.145	-43.444	1.00	45.92	MOL1	C
ATOM	356	C	LEU	A	47	46.761	-53.738	-40.416	1.00	36.98	MOL1	C
ATOM	357	O	LEU	A	47	45.592	-53.471	-40.193	1.00	40.47	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	358	N	ILE	A	48	47.305	-54.909	-40.112	1.00	35.94	MOL1	N
ATOM	359	CA	ILE	A	48	46.518	-55.986	-39.555	1.00	33.25	MOL1	C
ATOM	360	CB	ILE	A	48	46.192	-56.963	-40.656	1.00	27.62	MOL1	C
ATOM	361	CG2	ILE	A	48	45.776	-58.294	-40.078	1.00	23.32	MOL1	C
ATOM	362	CG1	ILE	A	48	45.137	-56.356	-41.560	1.00	26.25	MOL1	C
ATOM	363	CD1	ILE	A	48	44.894	-57.199	-42.775	1.00	34.54	MOL1	C
ATOM	364	C	ILE	A	48	47.219	-56.757	-38.457	1.00	37.92	MOL1	C
ATOM	365	O	ILE	A	48	48.370	-57.124	-38.614	1.00	40.68	MOL1	O
ATOM	366	N	TYR	A	49	46.530	-57.002	-37.347	1.00	41.14	MOL1	N
ATOM	367	CA	TYR	A	49	47.119	-57.786	-36.277	1.00	46.26	MOL1	C
ATOM	368	CB	TYR	A	49	47.159	-57.021	-34.949	1.00	55.74	MOL1	C
ATOM	369	CG	TYR	A	49	45.822	-56.547	-34.437	1.00	62.14	MOL1	C
ATOM	370	CD1	TYR	A	49	45.335	-55.306	-34.794	1.00	65.27	MOL1	C
ATOM	371	CE1	TYR	A	49	44.117	-54.869	-34.353	1.00	67.22	MOL1	C
ATOM	372	CD2	TYR	A	49	45.039	-57.345	-33.610	1.00	58.99	MOL1	C
ATOM	373	CE2	TYR	A	49	43.810	-56.909	-33.163	1.00	58.66	MOL1	C
ATOM	374	CZ	TYR	A	49	43.358	-55.668	-33.544	1.00	63.21	MOL1	C
ATOM	375	OH	TYR	A	49	42.132	-55.195	-33.147	1.00	72.90	MOL1	O
ATOM	376	C	TYR	A	49	46.337	-59.085	-36.104	1.00	46.52	MOL1	C
ATOM	377	O	TYR	A	49	45.223	-59.228	-36.629	1.00	42.71	MOL1	O
ATOM	378	N	LEU	A	50	46.944	-60.025	-35.381	1.00	41.10	MOL1	N
ATOM	379	CA	LEU	A	50	46.345	-61.315	-35.135	1.00	34.80	MOL1	C
ATOM	380	CB	LEU	A	50	45.363	-61.201	-33.984	1.00	32.33	MOL1	C
ATOM	381	CG	LEU	A	50	45.893	-61.742	-32.653	1.00	38.66	MOL1	C
ATOM	382	CD1	LEU	A	50	47.319	-62.185	-32.829	1.00	34.22	MOL1	C
ATOM	383	CD2	LEU	A	50	45.771	-60.698	-31.568	1.00	34.17	MOL1	C
ATOM	384	C	LEU	A	50	45.652	-61.867	-36.369	1.00	38.68	MOL1	C
ATOM	385	O	LEU	A	50	44.459	-62.128	-36.353	1.00	44.22	MOL1	O
ATOM	386	N	VAL	A	51	46.417	-62.011	-37.444	1.00	40.23	MOL1	N
ATOM	387	CA	VAL	A	51	45.957	-62.564	-38.721	1.00	42.34	MOL1	C
ATOM	388	CB	VAL	A	51	45.367	-63.974	-38.582	1.00	42.81	MOL1	C
ATOM	389	CG1	VAL	A	51	45.083	-64.543	-39.970	1.00	39.52	MOL1	C
ATOM	390	CG2	VAL	A	51	46.312	-64.860	-37.852	1.00	38.74	MOL1	C
ATOM	391	C	VAL	A	51	44.954	-61.831	-39.560	1.00	44.05	MOL1	C
ATOM	392	O	VAL	A	51	45.151	-61.673	-40.768	1.00	44.76	MOL1	O
ATOM	393	N	SER	A	52	43.856	-61.408	-38.957	1.00	48.06	MOL1	N
ATOM	394	CA	SER	A	52	42.859	-60.755	-39.775	1.00	51.23	MOL1	C
ATOM	395	CB	SER	A	52	41.856	-61.804	-40.216	1.00	46.93	MOL1	C
ATOM	396	OG	SER	A	52	41.328	-61.413	-41.467	1.00	62.81	MOL1	O
ATOM	397	C	SER	A	52	42.136	-59.531	-39.227	1.00	44.79	MOL1	C
ATOM	398	O	SER	A	52	41.180	-59.048	-39.821	1.00	40.87	MOL1	O
ATOM	399	N	ASN	A	53	42.617	-59.000	-38.122	1.00	42.43	MOL1	N
ATOM	400	CA	ASN	A	53	41.974	-57.853	-37.551	1.00	47.09	MOL1	C
ATOM	401	CB	ASN	A	53	41.955	-58.062	-36.051	1.00	55.32	MOL1	C
ATOM	402	CG	ASN	A	53	41.391	-59.423	-35.688	1.00	60.02	MOL1	C
ATOM	403	OD1	ASN	A	53	42.115	-60.319	-35.263	1.00	69.59	MOL1	O
ATOM	404	ND2	ASN	A	53	40.093	-59.591	-35.888	1.00	61.16	MOL1	N
ATOM	405	C	ASN	A	53	42.667	-56.560	-37.968	1.00	46.67	MOL1	C
ATOM	406	O	ASN	A	53	43.883	-56.463	-37.909	1.00	50.32	MOL1	O
ATOM	407	N	ARG	A	54	41.895	-55.572	-38.410	1.00	43.04	MOL1	N
ATOM	408	CA	ARG	A	54	42.470	-54.295	-38.838	1.00	46.76	MOL1	C
ATOM	409	CB	ARG	A	54	41.615	-53.661	-39.918	1.00	51.66	MOL1	C
ATOM	410	CG	ARG	A	54	41.349	-54.549	-41.074	1.00	59.02	MOL1	C
ATOM	411	CD	ARG	A	54	40.225	-53.990	-41.865	1.00	56.96	MOL1	C
ATOM	412	NE	ARG	A	54	39.479	-55.082	-42.452	1.00	72.58	MOL1	N
ATOM	413	CZ	ARG	A	54	38.278	-54.943	-42.988	1.00	83.40	MOL1	C
ATOM	414	NH1	ARG	A	54	37.702	-53.741	-42.998	1.00	86.60	MOL1	N
ATOM	415	NH2	ARG	A	54	37.663	-56.002	-43.508	1.00	87.76	MOL1	N
ATOM	416	C	ARG	A	54	42.621	-53.247	-37.746	1.00	48.10	MOL1	C
ATOM	417	O	ARG	A	54	41.834	-53.178	-36.809	1.00	51.95	MOL1	O
ATOM	418	N	GLU	A	55	43.633	-52.404	-37.885	1.00	52.04	MOL1	N
ATOM	419	CA	GLU	A	55	43.851	-51.339	-36.921	1.00	54.69	MOL1	C
ATOM	420	CB	GLU	A	55	45.169	-50.607	-37.187	1.00	59.74	MOL1	C
ATOM	421	CG	GLU	A	55	46.197	-50.722	-36.093	1.00	66.74	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	422	CD	GLU	A	55	45.609	-50.484	-34.726	1.00	71.76	MOL1	C
ATOM	423	OE1	GLU	A	55	46.368	-50.556	-33.736	1.00	77.92	MOL1	O
ATOM	424	OE2	GLU	A	55	44.387	-50.234	-34.637	1.00	76.06	MOL1	O
ATOM	425	C	GLU	A	55	42.716	-50.374	-37.153	1.00	58.65	MOL1	C
ATOM	426	O	GLU	A	55	42.017	-50.472	-38.166	1.00	60.22	MOL1	O
ATOM	427	N	SER	A	56	42.550	-49.432	-36.232	1.00	62.90	MOL1	N
ATOM	428	CA	SER	A	56	41.495	-48.434	-36.329	1.00	68.93	MOL1	C
ATOM	429	CB	SER	A	56	41.733	-47.342	-35.283	1.00	73.11	MOL1	C
ATOM	430	OG	SER	A	56	40.885	-46.224	-35.507	1.00	88.98	MOL1	O
ATOM	431	C	SER	A	56	41.368	-47.794	-37.720	1.00	69.73	MOL1	C
ATOM	432	O	SER	A	56	40.371	-48.000	-38.435	1.00	72.32	MOL1	O
ATOM	433	N	GLY	A	57	42.379	-47.027	-38.107	1.00	62.78	MOL1	N
ATOM	434	CA	GLY	A	57	42.325	-46.353	-39.390	1.00	62.16	MOL1	C
ATOM	435	C	GLY	A	57	42.241	-47.222	-40.631	1.00	60.06	MOL1	C
ATOM	436	O	GLY	A	57	41.522	-46.887	-41.576	1.00	62.24	MOL1	O
ATOM	437	N	VAL	A	58	42.971	-48.333	-40.640	1.00	54.16	MOL1	N
ATOM	438	CA	VAL	A	58	42.992	-49.222	-41.793	1.00	46.09	MOL1	C
ATOM	439	CB	VAL	A	58	43.492	-50.641	-41.428	1.00	42.17	MOL1	C
ATOM	440	CG1	VAL	A	58	43.441	-51.531	-42.658	1.00	44.61	MOL1	C
ATOM	441	CG2	VAL	A	58	44.914	-50.589	-40.919	1.00	33.38	MOL1	C
ATOM	442	C	VAL	A	58	41.639	-49.362	-42.478	1.00	47.33	MOL1	C
ATOM	443	O	VAL	A	58	40.646	-49.733	-41.851	1.00	50.17	MOL1	O
ATOM	444	N	PRO	A	59	41.598	-49.063	-43.784	1.00	43.39	MOL1	N
ATOM	445	CD	PRO	A	59	42.726	-48.444	-44.489	1.00	50.20	MOL1	C
ATOM	446	CA	PRO	A	59	40.450	-49.114	-44.672	1.00	43.89	MOL1	C
ATOM	447	CB	PRO	A	59	41.041	-48.754	-46.013	1.00	38.01	MOL1	C
ATOM	448	CG	PRO	A	59	42.029	-47.769	-45.649	1.00	47.10	MOL1	C
ATOM	449	C	PRO	A	59	39.774	-50.451	-44.722	1.00	48.92	MOL1	C
ATOM	450	O	PRO	A	59	40.312	-51.472	-44.331	1.00	50.56	MOL1	O
ATOM	451	N	SER	A	60	38.571	-50.408	-45.254	1.00	60.71	MOL1	N
ATOM	452	CA	SER	A	60	37.716	-51.560	-45.394	1.00	62.90	MOL1	C
ATOM	453	CB	SER	A	60	36.349	-51.056	-45.920	1.00	73.59	MOL1	C
ATOM	454	OG	SER	A	60	36.074	-49.695	-45.508	1.00	70.93	MOL1	O
ATOM	455	C	SER	A	60	38.332	-52.630	-46.325	1.00	59.30	MOL1	C
ATOM	456	O	SER	A	60	38.222	-53.827	-46.047	1.00	52.16	MOL1	O
ATOM	457	N	ARG	A	61	39.001	-52.194	-47.403	1.00	57.27	MOL1	N
ATOM	458	CA	ARG	A	61	39.595	-53.110	-48.401	1.00	50.63	MOL1	C
ATOM	459	CB	ARG	A	61	40.135	-52.329	-49.615	1.00	44.86	MOL1	C
ATOM	460	CG	ARG	A	61	40.850	-51.018	-49.297	1.00	48.98	MOL1	C
ATOM	461	CD	ARG	A	61	41.327	-50.284	-50.562	1.00	38.52	MOL1	C
ATOM	462	NE	ARG	A	61	42.113	-49.084	-50.256	1.00	36.18	MOL1	N
ATOM	463	CZ	ARG	A	61	41.633	-48.005	-49.641	1.00	45.79	MOL1	C
ATOM	464	NH1	ARG	A	61	40.364	-47.972	-49.265	1.00	59.68	MOL1	N
ATOM	465	NH2	ARG	A	61	42.410	-46.955	-49.396	1.00	43.46	MOL1	N
ATOM	466	C	ARG	A	61	40.653	-54.103	-47.951	1.00	48.11	MOL1	C
ATOM	467	O	ARG	A	61	40.679	-55.230	-48.426	1.00	49.00	MOL1	O
ATOM	468	N	PHE	A	62	41.524	-53.702	-47.040	1.00	51.14	MOL1	N
ATOM	469	CA	PHE	A	62	42.579	-54.595	-46.560	1.00	50.93	MOL1	C
ATOM	470	CB	PHE	A	62	43.596	-53.804	-45.744	1.00	51.89	MOL1	C
ATOM	471	CG	PHE	A	62	44.446	-52.895	-46.561	1.00	46.54	MOL1	C
ATOM	472	CD1	PHE	A	62	45.569	-53.374	-47.197	1.00	51.00	MOL1	C
ATOM	473	CD2	PHE	A	62	44.117	-51.571	-46.702	1.00	47.30	MOL1	C
ATOM	474	CE1	PHE	A	62	46.351	-52.549	-47.957	1.00	54.48	MOL1	C
ATOM	475	CE2	PHE	A	62	44.894	-50.738	-47.465	1.00	54.48	MOL1	C
ATOM	476	CZ	PHE	A	62	46.016	-51.228	-48.094	1.00	54.72	MOL1	C
ATOM	477	C	PHE	A	62	42.029	-55.724	-45.707	1.00	50.14	MOL1	C
ATOM	478	O	PHE	A	62	41.314	-55.478	-44.741	1.00	53.36	MOL1	O
ATOM	479	N	SER	A	63	42.382	-56.960	-46.047	1.00	50.94	MOL1	N
ATOM	480	CA	SER	A	63	41.903	-58.131	-45.299	1.00	54.44	MOL1	C
ATOM	481	CB	SER	A	63	40.640	-58.702	-45.963	1.00	55.07	MOL1	C
ATOM	482	OG	SER	A	63	40.676	-58.570	-47.379	1.00	55.10	MOL1	O
ATOM	483	C	SER	A	63	42.937	-59.249	-45.147	1.00	53.22	MOL1	C
ATOM	484	O	SER	A	63	43.529	-59.695	-46.119	1.00	48.30	MOL1	O
ATOM	485	N	GLY	A	64	43.146	-59.706	-43.920	1.00	57.34	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	486	CA	GLY	A	64	44.112	-60.766	-43.690	1.00	60.19	MOL1	C
ATOM	487	C	GLY	A	64	43.429	-62.111	-43.737	1.00	63.57	MOL1	C
ATOM	488	O	GLY	A	64	42.224	-62.166	-43.974	1.00	70.23	MOL1	O
ATOM	489	N	SER	A	65	44.179	-63.188	-43.515	1.00	64.27	MOL1	N
ATOM	490	CA	SER	A	65	43.611	-64.543	-43.539	1.00	65.17	MOL1	C
ATOM	491	CB	SER	A	65	42.818	-64.763	-44.816	1.00	58.41	MOL1	C
ATOM	492	OG	SER	A	65	43.689	-64.837	-45.915	1.00	51.64	MOL1	O
ATOM	493	C	SER	A	65	44.689	-65.612	-43.478	1.00	68.10	MOL1	C
ATOM	494	O	SER	A	65	45.642	-65.562	-44.247	1.00	73.66	MOL1	O
ATOM	495	N	GLY	A	66	44.542	-66.590	-42.592	1.00	66.93	MOL1	N
ATOM	496	CA	GLY	A	66	45.564	-67.610	-42.522	1.00	72.19	MOL1	C
ATOM	497	C	GLY	A	66	45.465	-68.652	-41.431	1.00	78.05	MOL1	C
ATOM	498	O	GLY	A	66	44.768	-68.487	-40.431	1.00	78.15	MOL1	O
ATOM	499	N	SER	A	67	46.204	-69.735	-41.641	1.00	84.82	MOL1	N
ATOM	500	CA	SER	A	67	46.245	-70.864	-40.726	1.00	92.63	MOL1	C
ATOM	501	CB	SER	A	67	46.594	-72.142	-41.522	1.00	98.58	MOL1	C
ATOM	502	OG	SER	A	67	46.395	-73.337	-40.771	1.00	104.28	MOL1	O
ATOM	503	C	SER	A	67	47.292	-70.612	-39.646	1.00	91.84	MOL1	C
ATOM	504	O	SER	A	67	47.033	-69.929	-38.649	1.00	88.73	MOL1	O
ATOM	505	N	GLY	A	68	48.475	-71.175	-39.868	1.00	91.75	MOL1	N
ATOM	506	CA	GLY	A	68	49.575	-71.034	-38.934	1.00	91.50	MOL1	C
ATOM	507	C	GLY	A	68	50.883	-71.335	-39.640	1.00	91.39	MOL1	C
ATOM	508	O	GLY	A	68	51.926	-71.482	-39.010	1.00	90.20	MOL1	O
ATOM	509	N	THR	A	69	50.815	-71.431	-40.964	1.00	92.60	MOL1	N
ATOM	510	CA	THR	A	69	51.985	-71.707	-41.796	1.00	93.85	MOL1	C
ATOM	511	CB	THR	A	69	52.082	-73.213	-42.153	1.00	98.87	MOL1	C
ATOM	512	OG1	THR	A	69	52.875	-73.372	-43.335	1.00	101.90	MOL1	O
ATOM	513	CG2	THR	A	69	50.694	-73.811	-42.391	1.00	103.36	MOL1	C
ATOM	514	C	THR	A	69	51.913	-70.893	-43.088	1.00	89.96	MOL1	C
ATOM	515	O	THR	A	69	52.928	-70.476	-43.642	1.00	86.26	MOL1	O
ATOM	516	N	ASP	A	70	50.695	-70.670	-43.558	1.00	87.82	MOL1	N
ATOM	517	CA	ASP	A	70	50.466	-69.906	-44.770	1.00	85.45	MOL1	C
ATOM	518	CB	ASP	A	70	49.881	-70.815	-45.848	1.00	95.94	MOL1	C
ATOM	519	CG	ASP	A	70	50.904	-71.768	-46.422	1.00	104.24	MOL1	C
ATOM	520	OD1	ASP	A	70	51.583	-71.378	-47.400	1.00	111.20	MOL1	O
ATOM	521	OD2	ASP	A	70	51.038	-72.896	-45.891	1.00	104.29	MOL1	O
ATOM	522	C	ASP	A	70	49.491	-68.786	-44.463	1.00	76.70	MOL1	C
ATOM	523	O	ASP	A	70	48.476	-69.002	-43.812	1.00	79.25	MOL1	O
ATOM	524	N	PHE	A	71	49.803	-67.591	-44.935	1.00	65.62	MOL1	N
ATOM	525	CA	PHE	A	71	48.947	-66.446	-44.712	1.00	57.28	MOL1	C
ATOM	526	CB	PHE	A	71	49.515	-65.591	-43.610	1.00	55.73	MOL1	C
ATOM	527	CG	PHE	A	71	49.677	-66.310	-42.327	1.00	57.16	MOL1	C
ATOM	528	CD1	PHE	A	71	48.666	-66.313	-41.394	1.00	61.41	MOL1	C
ATOM	529	CD2	PHE	A	71	50.851	-66.957	-42.034	1.00	56.82	MOL1	C
ATOM	530	CE1	PHE	A	71	48.833	-66.945	-40.190	1.00	62.74	MOL1	C
ATOM	531	CE2	PHE	A	71	51.019	-67.588	-40.833	1.00	57.76	MOL1	C
ATOM	532	CZ	PHE	A	71	50.013	-67.582	-39.910	1.00	60.40	MOL1	C
ATOM	533	C	PHE	A	71	48.861	-65.621	-45.969	1.00	53.97	MOL1	C
ATOM	534	O	PHE	A	71	49.711	-65.713	-46.843	1.00	54.59	MOL1	O
ATOM	535	N	THR	A	72	47.847	-64.785	-46.050	1.00	49.73	MOL1	N
ATOM	536	CA	THR	A	72	47.694	-63.975	-47.228	1.00	52.51	MOL1	C
ATOM	537	CB	THR	A	72	46.884	-64.747	-48.258	1.00	52.75	MOL1	C
ATOM	538	OG1	THR	A	72	45.947	-65.587	-47.577	1.00	64.27	MOL1	O
ATOM	539	CG2	THR	A	72	47.790	-65.642	-49.075	1.00	60.75	MOL1	C
ATOM	540	C	THR	A	72	47.040	-62.646	-46.923	1.00	52.73	MOL1	C
ATOM	541	O	THR	A	72	46.052	-62.582	-46.196	1.00	63.07	MOL1	O
ATOM	542	N	LEU	A	73	47.622	-61.575	-47.442	1.00	46.87	MOL1	N
ATOM	543	CA	LEU	A	73	47.058	-60.253	-47.244	1.00	45.65	MOL1	C
ATOM	544	CB	LEU	A	73	48.141	-59.220	-46.949	1.00	41.84	MOL1	C
ATOM	545	CG	LEU	A	73	47.623	-57.784	-47.007	1.00	36.88	MOL1	C
ATOM	546	CD1	LEU	A	73	46.384	-57.656	-46.159	1.00	41.11	MOL1	C
ATOM	547	CD2	LEU	A	73	48.678	-56.844	-46.521	1.00	31.94	MOL1	C
ATOM	548	C	LEU	A	73	46.404	-59.949	-48.564	1.00	45.20	MOL1	C
ATOM	549	O	LEU	A	73	46.907	-60.347	-49.598	1.00	47.90	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	550	N	THR	A	74	45.279	-59.255	-48.551	1.00	47.26	MOL1	N
ATOM	551	CA	THR	A	74	44.619	-58.979	-49.809	1.00	44.51	MOL1	C
ATOM	552	CB	THR	A	74	43.712	-60.167	-50.198	1.00	41.06	MOL1	C
ATOM	553	OG1	THR	A	74	42.684	-59.708	-51.073	1.00	47.07	MOL1	O
ATOM	554	CG2	THR	A	74	43.108	-60.828	-48.960	1.00	35.97	MOL1	C
ATOM	555	C	THR	A	74	43.844	-57.672	-49.871	1.00	43.60	MOL1	C
ATOM	556	O	THR	A	74	43.046	-57.345	-48.991	1.00	46.72	MOL1	O
ATOM	557	N	ILE	A	75	44.102	-56.927	-50.933	1.00	37.25	MOL1	N
ATOM	558	CA	ILE	A	75	43.465	-55.655	-51.145	1.00	43.51	MOL1	C
ATOM	559	CB	ILE	A	75	44.519	-54.661	-51.591	1.00	38.34	MOL1	C
ATOM	560	CG2	ILE	A	75	43.889	-53.329	-51.907	1.00	45.29	MOL1	C
ATOM	561	CG1	ILE	A	75	45.563	-54.528	-50.483	1.00	40.01	MOL1	C
ATOM	562	CD1	ILE	A	75	46.792	-53.717	-50.864	1.00	44.00	MOL1	C
ATOM	563	C	ILE	A	75	42.360	-55.826	-52.191	1.00	51.76	MOL1	C
ATOM	564	O	ILE	A	75	42.638	-55.972	-53.375	1.00	54.94	MOL1	O
ATOM	565	N	SER	A	76	41.107	-55.816	-51.734	1.00	56.54	MOL1	N
ATOM	566	CA	SER	A	76	39.951	-56.004	-52.605	1.00	57.64	MOL1	C
ATOM	567	CB	SER	A	76	38.660	-55.979	-51.789	1.00	66.08	MOL1	C
ATOM	568	OG	SER	A	76	38.509	-54.748	-51.105	1.00	79.00	MOL1	O
ATOM	569	C	SER	A	76	39.831	-55.022	-53.751	1.00	58.33	MOL1	C
ATOM	570	O	SER	A	76	39.343	-55.378	-54.819	1.00	65.75	MOL1	O
ATOM	571	N	SER	A	77	40.266	-53.787	-53.553	1.00	54.83	MOL1	N
ATOM	572	CA	SER	A	77	40.166	-52.825	-54.633	1.00	54.06	MOL1	C
ATOM	573	CB	SER	A	77	38.801	-52.148	-54.570	1.00	51.46	MOL1	C
ATOM	574	OG	SER	A	77	38.583	-51.319	-55.694	1.00	63.11	MOL1	O
ATOM	575	C	SER	A	77	41.293	-51.807	-54.534	1.00	54.48	MOL1	C
ATOM	576	O	SER	A	77	41.129	-50.745	-53.935	1.00	60.30	MOL1	O
ATOM	577	N	LEU	A	78	42.432	-52.131	-55.139	1.00	50.14	MOL1	N
ATOM	578	CA	LEU	A	78	43.598	-51.257	-55.081	1.00	51.12	MOL1	C
ATOM	579	CB	LEU	A	78	44.644	-51.685	-56.099	1.00	51.48	MOL1	C
ATOM	580	CG	LEU	A	78	46.065	-51.361	-55.647	1.00	45.21	MOL1	C
ATOM	581	CD1	LEU	A	78	46.215	-51.714	-54.187	1.00	49.93	MOL1	C
ATOM	582	CD2	LEU	A	78	47.057	-52.158	-56.471	1.00	53.87	MOL1	C
ATOM	583	C	LEU	A	78	43.266	-49.795	-55.273	1.00	50.05	MOL1	C
ATOM	584	O	LEU	A	78	42.458	-49.432	-56.113	1.00	52.69	MOL1	O
ATOM	585	N	GLN	A	79	43.913	-48.960	-54.478	1.00	51.14	MOL1	N
ATOM	586	CA	GLN	A	79	43.686	-47.533	-54.505	1.00	54.98	MOL1	C
ATOM	587	CB	GLN	A	79	43.013	-47.138	-53.195	1.00	59.11	MOL1	C
ATOM	588	CG	GLN	A	79	41.566	-47.551	-53.132	1.00	56.17	MOL1	C
ATOM	589	CD	GLN	A	79	40.705	-46.616	-53.944	1.00	65.00	MOL1	C
ATOM	590	OE1	GLN	A	79	40.548	-45.445	-53.584	1.00	69.29	MOL1	O
ATOM	591	NE2	GLN	A	79	40.154	-47.111	-55.052	1.00	60.06	MOL1	N
ATOM	592	C	GLN	A	79	44.998	-46.782	-54.696	1.00	55.91	MOL1	C
ATOM	593	O	GLN	A	79	46.067	-47.289	-54.369	1.00	59.17	MOL1	O
ATOM	594	N	PRO	A	80	44.932	-45.553	-55.216	1.00	54.38	MOL1	N
ATOM	595	CD	PRO	A	80	43.722	-44.744	-55.426	1.00	55.89	MOL1	C
ATOM	596	CA	PRO	A	80	46.132	-44.753	-55.445	1.00	56.22	MOL1	C
ATOM	597	CB	PRO	A	80	45.579	-43.344	-55.609	1.00	56.08	MOL1	C
ATOM	598	CG	PRO	A	80	44.255	-43.577	-56.221	1.00	57.32	MOL1	C
ATOM	599	C	PRO	A	80	47.115	-44.837	-54.295	1.00	59.55	MOL1	C
ATOM	600	O	PRO	A	80	48.287	-45.128	-54.486	1.00	63.58	MOL1	O
ATOM	601	N	GLU	A	81	46.625	-44.589	-53.090	1.00	64.22	MOL1	N
ATOM	602	CA	GLU	A	81	47.484	-44.599	-51.915	1.00	67.38	MOL1	C
ATOM	603	CB	GLU	A	81	46.868	-43.748	-50.790	1.00	75.36	MOL1	C
ATOM	604	CG	GLU	A	81	45.403	-44.042	-50.433	1.00	89.45	MOL1	C
ATOM	605	CD	GLU	A	81	44.411	-43.540	-51.485	1.00	99.68	MOL1	C
ATOM	606	OE1	GLU	A	81	44.598	-42.413	-51.993	1.00	107.02	MOL1	O
ATOM	607	OE2	GLU	A	81	43.434	-44.260	-51.793	1.00	103.73	MOL1	O
ATOM	608	C	GLU	A	81	47.838	-45.972	-51.373	1.00	63.47	MOL1	C
ATOM	609	O	GLU	A	81	48.442	-46.078	-50.310	1.00	66.19	MOL1	O
ATOM	610	N	ASP	A	82	47.478	-47.025	-52.093	1.00	55.40	MOL1	N
ATOM	611	CA	ASP	A	82	47.787	-48.360	-51.612	1.00	52.01	MOL1	C
ATOM	612	CB	ASP	A	82	46.642	-49.312	-51.938	1.00	56.83	MOL1	C
ATOM	613	CG	ASP	A	82	45.415	-49.054	-51.078	1.00	66.32	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	614	OD1	ASP	A	82	44.359	-49.654	-51.361	1.00	72.61	MOL1	O
ATOM	615	OD2	ASP	A	82	45.509	-48.256	-50.113	1.00	68.72	MOL1	O
ATOM	616	C	ASP	A	82	49.087	-48.858	-52.195	1.00	46.60	MOL1	C
ATOM	617	O	ASP	A	82	49.567	-49.941	-51.874	1.00	43.30	MOL1	O
ATOM	618	N	PHE	A	83	49.668	-48.033	-53.046	1.00	47.70	MOL1	N
ATOM	619	CA	PHE	A	83	50.921	-48.370	-53.679	1.00	44.13	MOL1	C
ATOM	620	CB	PHE	A	83	51.070	-47.521	-54.933	1.00	41.53	MOL1	C
ATOM	621	CG	PHE	A	83	50.119	-47.924	-56.015	1.00	42.12	MOL1	C
ATOM	622	CD1	PHE	A	83	49.467	-46.981	-56.783	1.00	45.02	MOL1	C
ATOM	623	CD2	PHE	A	83	49.866	-49.269	-56.249	1.00	39.47	MOL1	C
ATOM	624	CE1	PHE	A	83	48.577	-47.370	-57.768	1.00	42.50	MOL1	C
ATOM	625	CE2	PHE	A	83	48.990	-49.664	-57.221	1.00	38.30	MOL1	C
ATOM	626	CZ	PHE	A	83	48.341	-48.713	-57.985	1.00	45.95	MOL1	C
ATOM	627	C	PHE	A	83	52.052	-48.161	-52.697	1.00	43.58	MOL1	C
ATOM	628	O	PHE	A	83	52.493	-47.032	-52.449	1.00	45.73	MOL1	O
ATOM	629	N	ALA	A	84	52.493	-49.270	-52.120	1.00	37.49	MOL1	N
ATOM	630	CA	ALA	A	84	53.559	-49.243	-51.147	1.00	40.43	MOL1	C
ATOM	631	CB	ALA	A	84	53.029	-48.767	-49.818	1.00	43.56	MOL1	C
ATOM	632	C	ALA	A	84	54.132	-50.634	-51.006	1.00	42.01	MOL1	C
ATOM	633	O	ALA	A	84	53.845	-51.518	-51.804	1.00	41.77	MOL1	O
ATOM	634	N	THR	A	85	54.945	-50.826	-49.980	1.00	40.50	MOL1	N
ATOM	635	CA	THR	A	85	55.553	-52.116	-49.747	1.00	39.92	MOL1	C
ATOM	636	CB	THR	A	85	57.031	-51.947	-49.460	1.00	40.88	MOL1	C
ATOM	637	OG1	THR	A	85	57.604	-51.091	-50.459	1.00	42.78	MOL1	O
ATOM	638	CG2	THR	A	85	57.726	-53.299	-49.478	1.00	43.47	MOL1	C
ATOM	639	C	THR	A	85	54.861	-52.701	-48.542	1.00	37.47	MOL1	C
ATOM	640	O	THR	A	85	54.524	-51.956	-47.630	1.00	46.04	MOL1	O
ATOM	641	N	TYR	A	86	54.645	-54.015	-48.533	1.00	28.79	MOL1	N
ATOM	642	CA	TYR	A	86	53.965	-54.650	-47.410	1.00	31.98	MOL1	C
ATOM	643	CB	TYR	A	86	52.646	-55.275	-47.867	1.00	26.49	MOL1	C
ATOM	644	CG	TYR	A	86	51.683	-54.268	-48.411	1.00	31.80	MOL1	C
ATOM	645	CD1	TYR	A	86	51.686	-53.929	-49.751	1.00	35.58	MOL1	C
ATOM	646	CE1	TYR	A	86	50.866	-52.925	-50.235	1.00	41.53	MOL1	C
ATOM	647	CD2	TYR	A	86	50.826	-53.581	-47.563	1.00	39.59	MOL1	C
ATOM	648	CE2	TYR	A	86	50.004	-52.575	-48.034	1.00	44.60	MOL1	C
ATOM	649	CZ	TYR	A	86	50.028	-52.251	-49.369	1.00	44.00	MOL1	C
ATOM	650	OH	TYR	A	86	49.209	-51.253	-49.830	1.00	43.24	MOL1	O
ATOM	651	C	TYR	A	86	54.802	-55.709	-46.734	1.00	34.26	MOL1	C
ATOM	652	O	TYR	A	86	55.434	-56.512	-47.405	1.00	40.66	MOL1	O
ATOM	653	N	TYR	A	87	54.803	-55.717	-45.405	1.00	33.32	MOL1	N
ATOM	654	CA	TYR	A	87	55.568	-56.712	-44.658	1.00	38.87	MOL1	C
ATOM	655	CB	TYR	A	87	56.624	-56.051	-43.773	1.00	36.89	MOL1	C
ATOM	656	CG	TYR	A	87	57.685	-55.249	-44.478	1.00	42.15	MOL1	C
ATOM	657	CD1	TYR	A	87	58.720	-55.857	-45.146	1.00	40.66	MOL1	C
ATOM	658	CE1	TYR	A	87	59.692	-55.105	-45.755	1.00	45.97	MOL1	C
ATOM	659	CD2	TYR	A	87	57.656	-53.869	-44.443	1.00	50.79	MOL1	C
ATOM	660	CE2	TYR	A	87	58.614	-53.116	-45.043	1.00	44.67	MOL1	C
ATOM	661	CZ	TYR	A	87	59.626	-53.729	-45.698	1.00	47.60	MOL1	C
ATOM	662	OH	TYR	A	87	60.561	-52.943	-46.322	1.00	60.90	MOL1	O
ATOM	663	C	TYR	A	87	54.697	-57.563	-43.729	1.00	41.64	MOL1	C
ATOM	664	O	TYR	A	87	53.758	-57.056	-43.113	1.00	48.19	MOL1	O
ATOM	665	N	CYS	A	88	55.008	-58.852	-43.622	1.00	36.06	MOL1	N
ATOM	666	CA	CYS	A	88	54.294	-59.709	-42.699	1.00	35.87	MOL1	C
ATOM	667	C	CYS	A	88	55.242	-59.871	-41.530	1.00	35.09	MOL1	C
ATOM	668	O	CYS	A	88	56.423	-59.588	-41.652	1.00	35.96	MOL1	O
ATOM	669	CB	CYS	A	88	53.976	-61.072	-43.305	1.00	46.96	MOL1	C
ATOM	670	SG	CYS	A	88	55.305	-61.989	-44.165	1.00	71.08	MOL1	S
ATOM	671	N	GLN	A	89	54.737	-60.287	-40.382	1.00	34.49	MOL1	N
ATOM	672	CA	GLN	A	89	55.600	-60.461	-39.234	1.00	37.20	MOL1	C
ATOM	673	CB	GLN	A	89	55.804	-59.154	-38.489	1.00	33.50	MOL1	C
ATOM	674	CG	GLN	A	89	56.361	-59.397	-37.094	1.00	44.65	MOL1	C
ATOM	675	CD	GLN	A	89	56.013	-58.301	-36.118	1.00	49.46	MOL1	C
ATOM	676	OE1	GLN	A	89	54.910	-57.757	-36.166	1.00	50.94	MOL1	O
ATOM	677	NE2	GLN	A	89	56.941	-57.982	-35.208	1.00	46.81	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	678	C	GLN	A	89	54.978	-61.454	-38.291	1.00	44.45	MOL1	C
ATOM	679	O	GLN	A	89	53.758	-61.519	-38.172	1.00	51.12	MOL1	O
ATOM	680	N	GLN	A	90	55.820	-62.229	-37.619	1.00	47.34	MOL1	N
ATOM	681	CA	GLN	A	90	55.348	-63.226	-36.672	1.00	50.10	MOL1	C
ATOM	682	CB	GLN	A	90	55.862	-64.608	-37.060	1.00	55.58	MOL1	C
ATOM	683	CG	GLN	A	90	57.377	-64.774	-37.019	1.00	61.93	MOL1	C
ATOM	684	CD	GLN	A	90	57.891	-65.004	-35.615	1.00	71.03	MOL1	C
ATOM	685	OE1	GLN	A	90	57.237	-65.669	-34.812	1.00	74.70	MOL1	O
ATOM	686	NE2	GLN	A	90	59.075	-64.472	-35.313	1.00	76.62	MOL1	N
ATOM	687	C	GLN	A	90	55.868	-62.855	-35.309	1.00	51.67	MOL1	C
ATOM	688	O	GLN	A	90	56.885	-62.179	-35.202	1.00	58.41	MOL1	O
ATOM	689	N	THR	A	91	55.168	-63.280	-34.265	1.00	51.85	MOL1	N
ATOM	690	CA	THR	A	91	55.593	-62.987	-32.902	1.00	55.11	MOL1	C
ATOM	691	CB	THR	A	91	54.778	-61.855	-32.274	1.00	46.22	MOL1	C
ATOM	692	OG1	THR	A	91	53.388	-62.151	-32.401	1.00	48.12	MOL1	O
ATOM	693	CG2	THR	A	91	55.077	-60.541	-32.946	1.00	44.09	MOL1	C
ATOM	694	C	THR	A	91	55.435	-64.220	-32.027	1.00	64.53	MOL1	C
ATOM	695	O	THR	A	91	55.304	-64.120	-30.808	1.00	67.98	MOL1	O
ATOM	696	N	TRP	A	92	55.443	-65.385	-32.658	1.00	72.17	MOL1	N
ATOM	697	CA	TRP	A	92	55.323	-66.638	-31.937	1.00	79.07	MOL1	C
ATOM	698	CB	TRP	A	92	54.998	-67.758	-32.917	1.00	81.59	MOL1	C
ATOM	699	CG	TRP	A	92	54.701	-69.061	-32.275	1.00	86.75	MOL1	C
ATOM	700	CD2	TRP	A	92	54.106	-69.274	-30.990	1.00	92.89	MOL1	C
ATOM	701	CE2	TRP	A	92	53.909	-70.658	-30.850	1.00	94.73	MOL1	C
ATOM	702	CE3	TRP	A	92	53.716	-68.430	-29.947	1.00	101.96	MOL1	C
ATOM	703	CD1	TRP	A	92	54.845	-70.285	-32.836	1.00	88.08	MOL1	C
ATOM	704	NE1	TRP	A	92	54.372	-71.253	-31.992	1.00	93.41	MOL1	N
ATOM	705	CZ2	TRP	A	92	53.337	-71.222	-29.712	1.00	100.68	MOL1	C
ATOM	706	CZ3	TRP	A	92	53.149	-68.991	-28.813	1.00	106.61	MOL1	C
ATOM	707	CH2	TRP	A	92	52.964	-70.374	-28.707	1.00	104.86	MOL1	C
ATOM	708	C	TRP	A	92	56.654	-66.939	-31.253	1.00	83.90	MOL1	C
ATOM	709	O	TRP	A	92	56.732	-67.010	-30.026	1.00	83.82	MOL1	O
ATOM	710	N	SER	A	93	57.698	-67.114	-32.064	1.00	89.43	MOL1	N
ATOM	711	CA	SER	A	93	59.036	-67.419	-31.562	1.00	93.50	MOL1	C
ATOM	712	CB	SER	A	93	59.828	-68.239	-32.571	1.00	96.02	MOL1	C
ATOM	713	OG	SER	A	93	61.175	-68.365	-32.142	1.00	102.98	MOL1	O
ATOM	714	C	SER	A	93	59.807	-66.157	-31.260	1.00	95.51	MOL1	C
ATOM	715	O	SER	A	93	59.839	-65.233	-32.079	1.00	95.35	MOL1	O
ATOM	716	N	ASP	A	94	60.466	-66.151	-30.105	1.00	95.58	MOL1	N
ATOM	717	CA	ASP	A	94	61.212	-64.992	-29.632	1.00	98.53	MOL1	C
ATOM	718	CB	ASP	A	94	62.172	-65.393	-28.526	1.00	104.00	MOL1	C
ATOM	719	CG	ASP	A	94	62.238	-64.345	-27.434	1.00	112.24	MOL1	C
ATOM	720	OD1	ASP	A	94	62.584	-63.182	-27.751	1.00	109.59	MOL1	O
ATOM	721	OD2	ASP	A	94	61.928	-64.681	-26.266	1.00	118.48	MOL1	O
ATOM	722	C	ASP	A	94	61.936	-64.090	-30.638	1.00	97.05	MOL1	C
ATOM	723	O	ASP	A	94	61.807	-62.865	-30.565	1.00	104.64	MOL1	O
ATOM	724	N	PRO	A	95	62.742	-64.653	-31.552	1.00	87.92	MOL1	N
ATOM	725	CD	PRO	A	95	63.460	-65.934	-31.551	1.00	81.97	MOL1	C
ATOM	726	CA	PRO	A	95	63.374	-63.703	-32.477	1.00	79.51	MOL1	C
ATOM	727	CB	PRO	A	95	64.457	-64.533	-33.148	1.00	69.47	MOL1	C
ATOM	728	CG	PRO	A	95	64.798	-65.520	-32.099	1.00	80.78	MOL1	C
ATOM	729	C	PRO	A	95	62.309	-63.263	-33.474	1.00	77.32	MOL1	C
ATOM	730	O	PRO	A	95	62.249	-63.778	-34.587	1.00	82.32	MOL1	O
ATOM	731	N	TRP	A	96	61.450	-62.336	-33.066	1.00	69.04	MOL1	N
ATOM	732	CA	TRP	A	96	60.397	-61.862	-33.945	1.00	66.16	MOL1	C
ATOM	733	CB	TRP	A	96	59.733	-60.631	-33.331	1.00	66.86	MOL1	C
ATOM	734	CG	TRP	A	96	59.124	-60.900	-31.992	1.00	67.18	MOL1	C
ATOM	735	CD2	TRP	A	96	58.857	-59.945	-30.961	1.00	67.83	MOL1	C
ATOM	736	CE2	TRP	A	96	58.234	-60.633	-29.902	1.00	67.54	MOL1	C
ATOM	737	CE3	TRP	A	96	59.081	-58.576	-30.830	1.00	70.92	MOL1	C
ATOM	738	CD1	TRP	A	96	58.666	-62.095	-31.530	1.00	71.15	MOL1	C
ATOM	739	NE1	TRP	A	96	58.129	-61.947	-30.271	1.00	69.68	MOL1	N
ATOM	740	CZ2	TRP	A	96	57.835	-60.000	-28.736	1.00	68.19	MOL1	C
ATOM	741	CZ3	TRP	A	96	58.682	-57.948	-29.665	1.00	73.55	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	742	CH2	TRP	A	96	58.067	-58.659	-28.636	1.00	70.77	MOL1	C
ATOM	743	C	TRP	A	96	60.997	-61.542	-35.317	1.00	64.17	MOL1	C
ATOM	744	O	TRP	A	96	61.995	-60.836	-35.418	1.00	64.70	MOL1	O
ATOM	745	N	THR	A	97	60.387	-62.058	-36.374	1.00	59.27	MOL1	N
ATOM	746	CA	THR	A	97	60.917	-61.846	-37.711	1.00	60.60	MOL1	C
ATOM	747	CB	THR	A	97	61.405	-63.167	-38.259	1.00	60.68	MOL1	C
ATOM	748	OG1	THR	A	97	60.391	-64.161	-38.061	1.00	58.89	MOL1	O
ATOM	749	CG2	THR	A	97	62.645	-63.598	-37.526	1.00	61.36	MOL1	C
ATOM	750	C	THR	A	97	59.937	-61.239	-38.705	1.00	61.06	MOL1	C
ATOM	751	O	THR	A	97	58.726	-61.358	-38.544	1.00	69.11	MOL1	O
ATOM	752	N	PHE	A	98	60.463	-60.590	-39.739	1.00	54.88	MOL1	N
ATOM	753	CA	PHE	A	98	59.615	-59.974	-40.756	1.00	50.50	MOL1	C
ATOM	754	CB	PHE	A	98	59.934	-58.484	-40.917	1.00	50.06	MOL1	C
ATOM	755	CG	PHE	A	98	59.553	-57.644	-39.743	1.00	51.18	MOL1	C
ATOM	756	CD1	PHE	A	98	60.091	-57.882	-38.493	1.00	57.23	MOL1	C
ATOM	757	CD2	PHE	A	98	58.649	-56.618	-39.883	1.00	56.31	MOL1	C
ATOM	758	CE1	PHE	A	98	59.728	-57.108	-37.396	1.00	51.93	MOL1	C
ATOM	759	CE2	PHE	A	98	58.284	-55.845	-38.791	1.00	58.59	MOL1	C
ATOM	760	CZ	PHE	A	98	58.827	-56.096	-37.549	1.00	52.32	MOL1	C
ATOM	761	C	PHE	A	98	59.793	-60.648	-42.107	1.00	48.51	MOL1	C
ATOM	762	O	PHE	A	98	60.632	-61.517	-42.279	1.00	52.64	MOL1	O
ATOM	763	N	GLY	A	99	58.986	-60.236	-43.067	1.00	49.51	MOL1	N
ATOM	764	CA	GLY	A	99	59.086	-60.799	-44.390	1.00	46.65	MOL1	C
ATOM	765	C	GLY	A	99	60.040	-59.922	-45.160	1.00	49.43	MOL1	C
ATOM	766	O	GLY	A	99	60.488	-58.888	-44.663	1.00	48.03	MOL1	O
ATOM	767	N	GLN	A	100	60.366	-60.340	-46.371	1.00	50.20	MOL1	N
ATOM	768	CA	GLN	A	100	61.262	-59.578	-47.211	1.00	49.98	MOL1	C
ATOM	769	CB	GLN	A	100	61.723	-60.441	-48.363	1.00	57.87	MOL1	C
ATOM	770	CG	GLN	A	100	60.998	-61.778	-48.411	1.00	68.47	MOL1	C
ATOM	771	CD	GLN	A	100	59.849	-61.780	-49.397	1.00	70.21	MOL1	C
ATOM	772	OE1	GLN	A	100	59.070	-62.737	-49.461	1.00	66.70	MOL1	O
ATOM	773	NE2	GLN	A	100	59.745	-60.709	-50.183	1.00	65.68	MOL1	N
ATOM	774	C	GLN	A	100	60.534	-58.357	-47.723	1.00	49.56	MOL1	C
ATOM	775	O	GLN	A	100	61.161	-57.399	-48.161	1.00	54.53	MOL1	O
ATOM	776	N	GLY	A	101	59.207	-58.396	-47.657	1.00	47.46	MOL1	N
ATOM	777	CA	GLY	A	101	58.400	-57.277	-48.110	1.00	50.03	MOL1	C
ATOM	778	C	GLY	A	101	58.022	-57.342	-49.576	1.00	50.81	MOL1	C
ATOM	779	O	GLY	A	101	58.829	-57.745	-50.410	1.00	56.79	MOL1	O
ATOM	780	N	THR	A	102	56.796	-56.932	-49.890	1.00	47.60	MOL1	N
ATOM	781	CA	THR	A	102	56.305	-56.952	-51.258	1.00	40.57	MOL1	C
ATOM	782	CB	THR	A	102	55.035	-57.737	-51.366	1.00	37.32	MOL1	C
ATOM	783	OG1	THR	A	102	55.265	-59.080	-50.931	1.00	38.63	MOL1	O
ATOM	784	CG2	THR	A	102	54.548	-57.713	-52.789	1.00	37.75	MOL1	C
ATOM	785	C	THR	A	102	55.991	-55.557	-51.714	1.00	41.46	MOL1	C
ATOM	786	O	THR	A	102	55.229	-54.862	-51.068	1.00	45.54	MOL1	O
ATOM	787	N	LYS	A	103	56.569	-55.138	-52.827	1.00	45.04	MOL1	N
ATOM	788	CA	LYS	A	103	56.305	-53.795	-53.304	1.00	48.50	MOL1	C
ATOM	789	CB	LYS	A	103	57.573	-53.127	-53.850	1.00	49.21	MOL1	C
ATOM	790	CG	LYS	A	103	57.312	-51.723	-54.383	1.00	57.11	MOL1	C
ATOM	791	CD	LYS	A	103	58.550	-51.076	-54.977	1.00	63.39	MOL1	C
ATOM	792	CE	LYS	A	103	59.560	-50.704	-53.914	1.00	69.51	MOL1	C
ATOM	793	NZ	LYS	A	103	60.818	-50.204	-54.539	1.00	78.00	MOL1	N
ATOM	794	C	LYS	A	103	55.256	-53.843	-54.383	1.00	49.26	MOL1	C
ATOM	795	O	LYS	A	103	55.372	-54.598	-55.346	1.00	52.49	MOL1	O
ATOM	796	N	VAL	A	104	54.219	-53.038	-54.205	1.00	49.35	MOL1	N
ATOM	797	CA	VAL	A	104	53.135	-52.957	-55.168	1.00	42.36	MOL1	C
ATOM	798	CB	VAL	A	104	51.783	-52.894	-54.469	1.00	33.97	MOL1	C
ATOM	799	CG1	VAL	A	104	50.715	-52.688	-55.481	1.00	32.23	MOL1	C
ATOM	800	CG2	VAL	A	104	51.540	-54.173	-53.674	1.00	28.43	MOL1	C
ATOM	801	C	VAL	A	104	53.344	-51.676	-55.942	1.00	46.45	MOL1	C
ATOM	802	O	VAL	A	104	53.462	-50.605	-55.346	1.00	46.72	MOL1	O
ATOM	803	N	GLU	A	105	53.411	-51.789	-57.264	1.00	51.41	MOL1	N
ATOM	804	CA	GLU	A	105	53.619	-50.629	-58.122	1.00	54.71	MOL1	C
ATOM	805	CB	GLU	A	105	54.998	-50.708	-58.783	1.00	63.51	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	806	CG	GLU	A	105	56.174	-50.756	-57.799	1.00	67.96	MOL1	C
ATOM	807	CD	GLU	A	105	57.456	-51.309	-58.432	1.00	71.89	MOL1	C
ATOM	808	OE1	GLU	A	105	57.469	-52.519	-58.801	1.00	56.58	MOL1	O
ATOM	809	OE2	GLU	A	105	58.438	-50.525	-58.554	1.00	68.64	MOL1	O
ATOM	810	C	GLU	A	105	52.521	-50.551	-59.176	1.00	52.25	MOL1	C
ATOM	811	O	GLU	A	105	51.925	-51.557	-59.542	1.00	53.45	MOL1	O
ATOM	812	N	ILE	A	106	52.263	-49.353	-59.672	1.00	50.55	MOL1	N
ATOM	813	CA	ILE	A	106	51.212	-49.166	-60.646	1.00	52.76	MOL1	C
ATOM	814	CB	ILE	A	106	50.803	-47.677	-60.680	1.00	62.26	MOL1	C
ATOM	815	CG2	ILE	A	106	52.016	-46.794	-60.970	1.00	61.54	MOL1	C
ATOM	816	CG1	ILE	A	106	49.673	-47.476	-61.688	1.00	73.48	MOL1	C
ATOM	817	CD1	ILE	A	106	48.388	-48.201	-61.320	1.00	75.44	MOL1	C
ATOM	818	C	ILE	A	106	51.565	-49.670	-62.040	1.00	49.48	MOL1	C
ATOM	819	O	ILE	A	106	52.576	-49.281	-62.616	1.00	52.58	MOL1	O
ATOM	820	N	LYS	A	107	50.726	-50.550	-62.578	1.00	46.45	MOL1	N
ATOM	821	CA	LYS	A	107	50.959	-51.104	-63.909	1.00	43.56	MOL1	C
ATOM	822	CB	LYS	A	107	50.135	-52.362	-64.130	1.00	41.97	MOL1	C
ATOM	823	CG	LYS	A	107	50.252	-52.892	-65.538	1.00	53.11	MOL1	C
ATOM	824	CD	LYS	A	107	49.597	-54.256	-65.679	1.00	69.11	MOL1	C
ATOM	825	CE	LYS	A	107	50.142	-55.255	-64.660	1.00	75.38	MOL1	C
ATOM	826	NZ	LYS	A	107	49.707	-56.653	-64.962	1.00	80.88	MOL1	N
ATOM	827	C	LYS	A	107	50.609	-50.118	-64.987	1.00	36.97	MOL1	C
ATOM	828	O	LYS	A	107	49.699	-49.327	-64.819	1.00	41.99	MOL1	O
ATOM	829	N	ARG	A	108	51.347	-50.141	-66.087	1.00	38.31	MOL1	N
ATOM	830	CA	ARG	A	108	51.041	-49.252	-67.199	1.00	44.40	MOL1	C
ATOM	831	CB	ARG	A	108	51.575	-47.840	-66.976	1.00	30.99	MOL1	C
ATOM	832	CG	ARG	A	108	53.067	-47.713	-66.891	1.00	31.05	MOL1	C
ATOM	833	CD	ARG	A	108	53.482	-46.405	-67.515	1.00	18.10	MOL1	C
ATOM	834	NE	ARG	A	108	53.424	-46.544	-68.961	1.00	27.26	MOL1	N
ATOM	835	CZ	ARG	A	108	53.711	-45.570	-69.812	1.00	31.83	MOL1	C
ATOM	836	NH1	ARG	A	108	54.068	-44.380	-69.355	1.00	32.06	MOL1	N
ATOM	837	NH2	ARG	A	108	53.665	-45.790	-71.118	1.00	32.92	MOL1	N
ATOM	838	C	ARG	A	108	51.502	-49.757	-68.555	1.00	50.59	MOL1	C
ATOM	839	O	ARG	A	108	52.133	-50.811	-68.685	1.00	60.53	MOL1	O
ATOM	840	N	THR	A	109	51.156	-48.993	-69.573	1.00	49.21	MOL1	N
ATOM	841	CA	THR	A	109	51.473	-49.344	-70.926	1.00	43.13	MOL1	C
ATOM	842	CB	THR	A	109	50.745	-48.341	-71.814	1.00	34.44	MOL1	C
ATOM	843	OG1	THR	A	109	50.114	-49.046	-72.886	1.00	53.46	MOL1	O
ATOM	844	CG2	THR	A	109	51.671	-47.272	-72.315	1.00	20.82	MOL1	C
ATOM	845	C	THR	A	109	52.993	-49.363	-71.101	1.00	45.40	MOL1	C
ATOM	846	O	THR	A	109	53.678	-48.470	-70.610	1.00	40.62	MOL1	O
ATOM	847	N	ASP	A	110	53.519	-50.406	-71.754	1.00	45.48	MOL1	N
ATOM	848	CA	ASP	A	110	54.965	-50.524	-71.980	1.00	42.11	MOL1	C
ATOM	849	CB	ASP	A	110	55.299	-51.763	-72.815	1.00	44.93	MOL1	C
ATOM	850	CG	ASP	A	110	55.170	-53.058	-72.035	1.00	55.76	MOL1	C
ATOM	851	OD1	ASP	A	110	54.900	-53.007	-70.809	1.00	53.90	MOL1	O
ATOM	852	OD2	ASP	A	110	55.347	-54.132	-72.663	1.00	53.88	MOL1	O
ATOM	853	C	ASP	A	110	55.505	-49.309	-72.719	1.00	37.40	MOL1	C
ATOM	854	O	ASP	A	110	54.789	-48.670	-73.481	1.00	35.95	MOL1	O
ATOM	855	N	ALA	A	111	56.776	-48.999	-72.501	1.00	35.91	MOL1	N
ATOM	856	CA	ALA	A	111	57.409	-47.863	-73.156	1.00	37.29	MOL1	C
ATOM	857	CB	ALA	A	111	57.185	-46.626	-72.359	1.00	27.90	MOL1	C
ATOM	858	C	ALA	A	111	58.897	-48.102	-73.294	1.00	43.95	MOL1	C
ATOM	859	O	ALA	A	111	59.549	-48.477	-72.325	1.00	46.55	MOL1	O
ATOM	860	N	ALA	A	112	59.434	-47.872	-74.491	1.00	45.93	MOL1	N
ATOM	861	CA	ALA	A	112	60.852	-48.060	-74.740	1.00	41.01	MOL1	C
ATOM	862	CB	ALA	A	112	61.090	-48.142	-76.198	1.00	50.24	MOL1	C
ATOM	863	C	ALA	A	112	61.679	-46.925	-74.141	1.00	42.59	MOL1	C
ATOM	864	O	ALA	A	112	61.250	-45.769	-74.093	1.00	39.12	MOL1	O
ATOM	865	N	PRO	A	113	62.887	-47.252	-73.665	1.00	42.21	MOL1	N
ATOM	866	CD	PRO	A	113	63.460	-48.608	-73.564	1.00	42.32	MOL1	C
ATOM	867	CA	PRO	A	113	63.777	-46.270	-73.061	1.00	37.05	MOL1	C
ATOM	868	CB	PRO	A	113	64.776	-47.138	-72.321	1.00	35.40	MOL1	C
ATOM	869	CG	PRO	A	113	64.892	-48.324	-73.215	1.00	34.46	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	870	C	PRO	A	113	64.416	-45.373	-74.089	1.00	41.43	MOL1	C
ATOM	871	O	PRO	A	113	64.492	-45.715	-75.271	1.00	43.93	MOL1	O
ATOM	872	N	THR	A	114	64.857	-44.211	-73.623	1.00	43.96	MOL1	N
ATOM	873	CA	THR	A	114	65.505	-43.217	-74.465	1.00	45.40	MOL1	C
ATOM	874	CB	THR	A	114	64.862	-41.858	-74.262	1.00	42.40	MOL1	C
ATOM	875	OG1	THR	A	114	63.582	-42.033	-73.645	1.00	50.43	MOL1	O
ATOM	876	CG2	THR	A	114	64.661	-41.177	-75.580	1.00	47.99	MOL1	C
ATOM	877	C	THR	A	114	66.933	-43.146	-73.980	1.00	45.69	MOL1	C
ATOM	878	O	THR	A	114	67.202	-42.525	-72.955	1.00	44.29	MOL1	O
ATOM	879	N	VAL	A	115	67.844	-43.772	-74.721	1.00	49.35	MOL1	N
ATOM	880	CA	VAL	A	115	69.248	-43.815	-74.327	1.00	50.65	MOL1	C
ATOM	881	CB	VAL	A	115	69.926	-45.069	-74.873	1.00	51.06	MOL1	C
ATOM	882	CG1	VAL	A	115	71.027	-45.497	-73.935	1.00	52.20	MOL1	C
ATOM	883	CG2	VAL	A	115	68.902	-46.183	-75.043	1.00	54.78	MOL1	C
ATOM	884	C	VAL	A	115	70.077	-42.608	-74.734	1.00	49.08	MOL1	C
ATOM	885	O	VAL	A	115	69.758	-41.904	-75.690	1.00	49.93	MOL1	O
ATOM	886	N	SER	A	116	71.154	-42.390	-73.992	1.00	48.80	MOL1	N
ATOM	887	CA	SER	A	116	72.047	-41.262	-74.216	1.00	49.64	MOL1	C
ATOM	888	CB	SER	A	116	71.497	-40.025	-73.494	1.00	52.26	MOL1	C
ATOM	889	OG	SER	A	116	70.077	-39.999	-73.500	1.00	44.31	MOL1	O
ATOM	890	C	SER	A	116	73.411	-41.610	-73.629	1.00	45.36	MOL1	C
ATOM	891	O	SER	A	116	73.510	-41.992	-72.468	1.00	42.62	MOL1	O
ATOM	892	N	ILE	A	117	74.467	-41.471	-74.413	1.00	43.99	MOL1	N
ATOM	893	CA	ILE	A	117	75.783	-41.802	-73.897	1.00	42.40	MOL1	C
ATOM	894	CB	ILE	A	117	76.410	-42.915	-74.736	1.00	34.43	MOL1	C
ATOM	895	CG2	ILE	A	117	76.462	-42.512	-76.169	1.00	27.33	MOL1	C
ATOM	896	CG1	ILE	A	117	77.796	-43.242	-74.217	1.00	37.61	MOL1	C
ATOM	897	CD1	ILE	A	117	78.356	-44.492	-74.811	1.00	37.38	MOL1	C
ATOM	898	C	ILE	A	117	76.676	-40.568	-73.854	1.00	44.59	MOL1	C
ATOM	899	O	ILE	A	117	76.660	-39.752	-74.765	1.00	46.70	MOL1	O
ATOM	900	N	PHE	A	118	77.448	-40.434	-72.783	1.00	45.25	MOL1	N
ATOM	901	CA	PHE	A	118	78.300	-39.276	-72.607	1.00	45.88	MOL1	C
ATOM	902	CB	PHE	A	118	77.759	-38.445	-71.452	1.00	48.35	MOL1	C
ATOM	903	CG	PHE	A	118	76.312	-38.114	-71.585	1.00	56.32	MOL1	C
ATOM	904	CD1	PHE	A	118	75.353	-39.105	-71.499	1.00	69.53	MOL1	C
ATOM	905	CD2	PHE	A	118	75.906	-36.830	-71.862	1.00	59.44	MOL1	C
ATOM	906	CE1	PHE	A	118	74.010	-38.823	-71.695	1.00	69.87	MOL1	C
ATOM	907	CE2	PHE	A	118	74.572	-36.541	-72.060	1.00	64.76	MOL1	C
ATOM	908	CZ	PHE	A	118	73.622	-37.541	-71.978	1.00	68.81	MOL1	C
ATOM	909	C	PHE	A	118	79.769	-39.596	-72.366	1.00	50.89	MOL1	C
ATOM	910	O	PHE	A	118	80.110	-40.393	-71.497	1.00	54.65	MOL1	O
ATOM	911	N	PRO	A	119	80.661	-38.962	-73.142	1.00	50.77	MOL1	N
ATOM	912	CD	PRO	A	119	80.315	-38.188	-74.337	1.00	52.45	MOL1	C
ATOM	913	CA	PRO	A	119	82.109	-39.134	-73.064	1.00	46.97	MOL1	C
ATOM	914	CB	PRO	A	119	82.614	-38.430	-74.310	1.00	47.01	MOL1	C
ATOM	915	CG	PRO	A	119	81.470	-38.517	-75.244	1.00	50.48	MOL1	C
ATOM	916	C	PRO	A	119	82.594	-38.465	-71.825	1.00	44.14	MOL1	C
ATOM	917	O	PRO	A	119	81.990	-37.524	-71.360	1.00	45.15	MOL1	O
ATOM	918	N	PRO	A	120	83.711	-38.935	-71.286	1.00	46.37	MOL1	N
ATOM	919	CD	PRO	A	120	84.547	-39.979	-71.887	1.00	35.74	MOL1	C
ATOM	920	CA	PRO	A	120	84.328	-38.406	-70.070	1.00	53.78	MOL1	C
ATOM	921	CB	PRO	A	120	85.638	-39.177	-70.002	1.00	43.37	MOL1	C
ATOM	922	CG	PRO	A	120	85.313	-40.442	-70.707	1.00	39.57	MOL1	C
ATOM	923	C	PRO	A	120	84.537	-36.883	-70.112	1.00	60.86	MOL1	C
ATOM	924	O	PRO	A	120	85.027	-36.331	-71.094	1.00	62.52	MOL1	O
ATOM	925	N	SER	A	121	84.160	-36.202	-69.041	1.00	64.67	MOL1	N
ATOM	926	CA	SER	A	121	84.322	-34.765	-69.001	1.00	66.66	MOL1	C
ATOM	927	CB	SER	A	121	83.800	-34.230	-67.683	1.00	70.09	MOL1	C
ATOM	928	OG	SER	A	121	84.417	-34.910	-66.611	1.00	64.61	MOL1	O
ATOM	929	C	SER	A	121	85.793	-34.443	-69.125	1.00	71.01	MOL1	C
ATOM	930	O	SER	A	121	86.617	-35.034	-68.435	1.00	71.34	MOL1	O
ATOM	931	N	SER	A	122	86.130	-33.507	-70.005	1.00	76.31	MOL1	N
ATOM	932	CA	SER	A	122	87.529	-33.127	-70.176	1.00	76.37	MOL1	C
ATOM	933	CB	SER	A	122	87.671	-31.970	-71.165	1.00	72.40	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	934	OG	SER A 122	86.954	-30.833	-70.723	1.00	76.66	MOL1 O
ATOM	935	C	SER A 122	88.069	-32.723	-68.814	1.00	77.11	MOL1 C
ATOM	936	O	SER A 122	89.214	-33.012	-68.484	1.00	77.76	MOL1 O
ATOM	937	N	GLU A 123	87.234	-32.063	-68.019	1.00	78.60	MOL1 N
ATOM	938	CA	GLU A 123	87.647	-31.656	-66.684	1.00	81.77	MOL1 C
ATOM	939	CB	GLU A 123	86.547	-30.857	-65.968	1.00	83.15	MOL1 C
ATOM	940	CG	GLU A 123	85.145	-31.113	-66.475	1.00	90.86	MOL1 C
ATOM	941	CD	GLU A 123	84.764	-30.199	-67.631	1.00	96.41	MOL1 C
ATOM	942	OE1	GLU A 123	84.556	-28.990	-67.387	1.00	101.06	MOL1 O
ATOM	943	OE2	GLU A 123	84.676	-30.682	-68.782	1.00	99.78	MOL1 O
ATOM	944	C	GLU A 123	87.992	-32.890	-65.867	1.00	80.69	MOL1 C
ATOM	945	O	GLU A 123	88.842	-32.835	-64.982	1.00	83.59	MOL1 O
ATOM	946	N	GLN A 124	87.337	-34.005	-66.171	1.00	79.38	MOL1 N
ATOM	947	CA	GLN A 124	87.586	-35.251	-65.456	1.00	78.06	MOL1 C
ATOM	948	CB	GLN A 124	86.502	-36.281	-65.751	1.00	73.86	MOL1 C
ATOM	949	CG	GLN A 124	86.739	-37.620	-65.071	1.00	59.63	MOL1 C
ATOM	950	CD	GLN A 124	85.575	-38.587	-65.238	1.00	54.29	MOL1 C
ATOM	951	OE1	GLN A 124	85.458	-39.551	-64.480	1.00	45.01	MOL1 O
ATOM	952	NE2	GLN A 124	84.713	-38.338	-66.232	1.00	42.63	MOL1 N
ATOM	953	C	GLN A 124	88.904	-35.853	-65.857	1.00	79.64	MOL1 C
ATOM	954	O	GLN A 124	89.715	-36.222	-65.010	1.00	81.32	MOL1 O
ATOM	955	N	LEU A 125	89.105	-35.971	-67.162	1.00	81.92	MOL1 N
ATOM	956	CA	LEU A 125	90.333	-36.553	-67.675	1.00	84.75	MOL1 C
ATOM	957	CB	LEU A 125	90.366	-36.466	-69.199	1.00	77.26	MOL1 C
ATOM	958	CG	LEU A 125	89.469	-37.507	-69.872	1.00	69.34	MOL1 C
ATOM	959	CD1	LEU A 125	89.519	-37.371	-71.373	1.00	68.70	MOL1 C
ATOM	960	CD2	LEU A 125	89.937	-38.881	-69.476	1.00	67.26	MOL1 C
ATOM	961	C	LEU A 125	91.567	-35.908	-67.059	1.00	89.76	MOL1 C
ATOM	962	O	LEU A 125	92.572	-36.579	-66.826	1.00	91.29	MOL1 O
ATOM	963	N	THR A 126	91.486	-34.614	-66.775	1.00	92.21	MOL1 N
ATOM	964	CA	THR A 126	92.597	-33.914	-66.158	1.00	92.08	MOL1 C
ATOM	965	CB	THR A 126	92.426	-32.407	-66.302	1.00	90.10	MOL1 C
ATOM	966	OG1	THR A 126	92.220	-32.088	-67.685	1.00	89.96	MOL1 O
ATOM	967	CG2	THR A 126	93.660	-31.685	-65.795	1.00	91.12	MOL1 C
ATOM	968	C	THR A 126	92.631	-34.286	-64.679	1.00	94.73	MOL1 C
ATOM	969	O	THR A 126	92.619	-33.422	-63.806	1.00	99.63	MOL1 O
ATOM	970	N	SER A 127	92.656	-35.589	-64.414	1.00	95.33	MOL1 N
ATOM	971	CA	SER A 127	92.688	-36.125	-63.057	1.00	96.51	MOL1 C
ATOM	972	CB	SER A 127	91.344	-35.912	-62.351	1.00	94.61	MOL1 C
ATOM	973	OG	SER A 127	91.190	-34.577	-61.908	1.00	95.83	MOL1 O
ATOM	974	C	SER A 127	92.992	-37.617	-63.098	1.00	97.65	MOL1 C
ATOM	975	O	SER A 127	92.757	-38.336	-62.125	1.00	97.78	MOL1 O
ATOM	976	N	GLY A 128	93.497	-38.080	-64.237	1.00	97.27	MOL1 N
ATOM	977	CA	GLY A 128	93.838	-39.485	-64.383	1.00	97.12	MOL1 C
ATOM	978	C	GLY A 128	92.659	-40.439	-64.311	1.00	94.12	MOL1 C
ATOM	979	O	GLY A 128	92.819	-41.646	-64.059	1.00	93.78	MOL1 O
ATOM	980	N	GLY A 129	91.468	-39.902	-64.533	1.00	87.00	MOL1 N
ATOM	981	CA	GLY A 129	90.285	-40.734	-64.495	1.00	78.41	MOL1 C
ATOM	982	C	GLY A 129	89.327	-40.361	-65.599	1.00	69.02	MOL1 C
ATOM	983	O	GLY A 129	89.384	-39.249	-66.119	1.00	70.34	MOL1 O
ATOM	984	N	ALA A 130	88.448	-41.293	-65.954	1.00	60.37	MOL1 N
ATOM	985	CA	ALA A 130	87.456	-41.070	-66.999	1.00	52.28	MOL1 C
ATOM	986	CB	ALA A 130	88.084	-41.260	-68.331	1.00	46.85	MOL1 C
ATOM	987	C	ALA A 130	86.258	-42.007	-66.853	1.00	48.05	MOL1 C
ATOM	988	O	ALA A 130	86.424	-43.213	-66.694	1.00	41.74	MOL1 O
ATOM	989	N	SER A 131	85.055	-41.441	-66.925	1.00	43.74	MOL1 N
ATOM	990	CA	SER A 131	83.834	-42.207	-66.780	1.00	40.24	MOL1 C
ATOM	991	CB	SER A 131	83.094	-41.778	-65.526	1.00	31.45	MOL1 C
ATOM	992	OG	SER A 131	83.790	-42.166	-64.358	1.00	41.51	MOL1 O
ATOM	993	C	SER A 131	82.922	-41.984	-67.950	1.00	43.06	MOL1 C
ATOM	994	O	SER A 131	82.745	-40.851	-68.375	1.00	52.63	MOL1 O
ATOM	995	N	VAL A 132	82.336	-43.063	-68.465	1.00	41.32	MOL1 N
ATOM	996	CA	VAL A 132	81.400	-42.971	-69.573	1.00	37.90	MOL1 C
ATOM	997	CB	VAL A 132	81.650	-44.038	-70.600	1.00	38.60	MOL1 C

ES 2 548 452 T3

ATOM	998	CG1	VAL	A	132	80.690	-43.865	-71.747	1.00	40.62	MOL1	C
ATOM	999	CG2	VAL	A	132	83.072	-43.969	-71.077	1.00	42.83	MOL1	C
ATOM	1000	C	VAL	A	132	80.015	-43.197	-69.012	1.00	35.03	MOL1	C
ATOM	1001	O	VAL	A	132	79.745	-44.242	-68.467	1.00	33.79	MOL1	O
ATOM	1002	N	VAL	A	133	79.140	-42.210	-69.143	1.00	40.22	MOL1	N
ATOM	1003	CA	VAL	A	133	77.797	-42.328	-68.610	1.00	39.25	MOL1	C
ATOM	1004	CB	VAL	A	133	77.416	-41.107	-67.774	1.00	31.40	MOL1	C
ATOM	1005	CG1	VAL	A	133	76.000	-41.233	-67.297	1.00	26.08	MOL1	C
ATOM	1006	CG2	VAL	A	133	78.331	-41.007	-66.577	1.00	35.57	MOL1	C
ATOM	1007	C	VAL	A	133	76.753	-42.526	-69.676	1.00	41.09	MOL1	C
ATOM	1008	O	VAL	A	133	76.788	-41.902	-70.722	1.00	40.39	MOL1	O
ATOM	1009	N	CYS	A	134	75.817	-43.417	-69.386	1.00	45.80	MOL1	N
ATOM	1010	CA	CYS	A	134	74.738	-43.733	-70.295	1.00	43.25	MOL1	C
ATOM	1011	C	CYS	A	134	73.434	-43.691	-69.513	1.00	44.02	MOL1	C
ATOM	1012	O	CYS	A	134	73.291	-44.369	-68.500	1.00	46.19	MOL1	O
ATOM	1013	CB	CYS	A	134	74.958	-45.124	-70.877	1.00	46.44	MOL1	C
ATOM	1014	SG	CYS	A	134	73.902	-45.560	-72.287	1.00	48.44	MOL1	S
ATOM	1015	N	PHE	A	135	72.498	-42.868	-69.979	1.00	43.05	MOL1	N
ATOM	1016	CA	PHE	A	135	71.191	-42.718	-69.349	1.00	35.78	MOL1	C
ATOM	1017	CB	PHE	A	135	70.779	-41.247	-69.295	1.00	23.02	MOL1	C
ATOM	1018	CG	PHE	A	135	71.596	-40.410	-68.344	1.00	28.31	MOL1	C
ATOM	1019	CD1	PHE	A	135	72.291	-39.297	-68.797	1.00	23.76	MOL1	C
ATOM	1020	CD2	PHE	A	135	71.654	-40.718	-66.987	1.00	30.91	MOL1	C
ATOM	1021	CE1	PHE	A	135	73.026	-38.503	-67.912	1.00	23.81	MOL1	C
ATOM	1022	CE2	PHE	A	135	72.390	-39.927	-66.095	1.00	22.88	MOL1	C
ATOM	1023	CZ	PHE	A	135	73.073	-38.822	-66.560	1.00	23.34	MOL1	C
ATOM	1024	C	PHE	A	135	70.140	-43.456	-70.146	1.00	37.06	MOL1	C
ATOM	1025	O	PHE	A	135	70.066	-43.308	-71.360	1.00	37.16	MOL1	O
ATOM	1026	N	LEU	A	136	69.336	-44.260	-69.462	1.00	39.36	MOL1	N
ATOM	1027	CA	LEU	A	136	68.239	-44.977	-70.100	1.00	42.77	MOL1	C
ATOM	1028	CB	LEU	A	136	68.362	-46.463	-69.849	1.00	43.75	MOL1	C
ATOM	1029	CG	LEU	A	136	69.589	-47.133	-70.444	1.00	45.83	MOL1	C
ATOM	1030	CD1	LEU	A	136	70.846	-46.535	-69.873	1.00	41.28	MOL1	C
ATOM	1031	CD2	LEU	A	136	69.511	-48.610	-70.142	1.00	45.54	MOL1	C
ATOM	1032	C	LEU	A	136	67.016	-44.426	-69.377	1.00	47.65	MOL1	C
ATOM	1033	O	LEU	A	136	66.652	-44.907	-68.307	1.00	52.16	MOL1	O
ATOM	1034	N	ASN	A	137	66.387	-43.410	-69.962	1.00	49.66	MOL1	N
ATOM	1035	CA	ASN	A	137	65.253	-42.744	-69.335	1.00	46.07	MOL1	C
ATOM	1036	CB	ASN	A	137	65.383	-41.248	-69.493	1.00	45.12	MOL1	C
ATOM	1037	CG	ASN	A	137	66.595	-40.712	-68.824	1.00	51.28	MOL1	C
ATOM	1038	OD1	ASN	A	137	66.810	-40.958	-67.644	1.00	50.62	MOL1	O
ATOM	1039	ND2	ASN	A	137	67.406	-39.961	-69.568	1.00	59.22	MOL1	N
ATOM	1040	C	ASN	A	137	63.858	-43.092	-69.770	1.00	48.96	MOL1	C
ATOM	1041	O	ASN	A	137	63.613	-43.436	-70.922	1.00	55.68	MOL1	O
ATOM	1042	N	ASN	A	138	62.949	-42.948	-68.811	1.00	49.39	MOL1	N
ATOM	1043	CA	ASN	A	138	61.517	-43.167	-68.967	1.00	45.92	MOL1	C
ATOM	1044	CB	ASN	A	138	60.885	-41.929	-69.616	1.00	50.81	MOL1	C
ATOM	1045	CG	ASN	A	138	61.317	-40.624	-68.940	1.00	59.24	MOL1	C
ATOM	1046	OD1	ASN	A	138	61.087	-40.422	-67.743	1.00	58.73	MOL1	O
ATOM	1047	ND2	ASN	A	138	61.952	-39.735	-69.711	1.00	65.58	MOL1	N
ATOM	1048	C	ASN	A	138	61.101	-44.406	-69.721	1.00	38.79	MOL1	C
ATOM	1049	O	ASN	A	138	60.709	-44.329	-70.884	1.00	47.05	MOL1	O
ATOM	1050	N	PHE	A	139	61.163	-45.550	-69.064	1.00	29.02	MOL1	N
ATOM	1051	CA	PHE	A	139	60.772	-46.773	-69.735	1.00	37.47	MOL1	C
ATOM	1052	CB	PHE	A	139	62.024	-47.555	-70.150	1.00	33.86	MOL1	C
ATOM	1053	CG	PHE	A	139	62.954	-47.876	-69.017	1.00	37.51	MOL1	C
ATOM	1054	CD1	PHE	A	139	62.819	-49.061	-68.301	1.00	32.17	MOL1	C
ATOM	1055	CD2	PHE	A	139	63.973	-46.996	-68.668	1.00	37.88	MOL1	C
ATOM	1056	CE1	PHE	A	139	63.678	-49.355	-67.267	1.00	32.92	MOL1	C
ATOM	1057	CE2	PHE	A	139	64.843	-47.288	-67.628	1.00	31.70	MOL1	C
ATOM	1058	CZ	PHE	A	139	64.693	-48.465	-66.932	1.00	35.11	MOL1	C
ATOM	1059	C	PHE	A	139	59.847	-47.623	-68.879	1.00	40.23	MOL1	C
ATOM	1060	O	PHE	A	139	59.618	-47.316	-67.713	1.00	45.12	MOL1	O
ATOM	1061	N	TYR	A	140	59.296	-48.680	-69.466	1.00	39.12	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	1062	CA	TYR	A	140	58.406	-49.571	-68.740	1.00	34.87	MOL1	C
ATOM	1063	CB	TYR	A	140	57.048	-48.911	-68.582	1.00	32.07	MOL1	C
ATOM	1064	CG	TYR	A	140	56.178	-49.612	-67.580	1.00	32.18	MOL1	C
ATOM	1065	CD1	TYR	A	140	56.275	-49.319	-66.238	1.00	29.24	MOL1	C
ATOM	1066	CE1	TYR	A	140	55.558	-50.017	-65.312	1.00	32.32	MOL1	C
ATOM	1067	CD2	TYR	A	140	55.326	-50.623	-67.964	1.00	28.25	MOL1	C
ATOM	1068	CE2	TYR	A	140	54.609	-51.325	-67.037	1.00	26.33	MOL1	C
ATOM	1069	CZ	TYR	A	140	54.732	-51.022	-65.719	1.00	25.07	MOL1	C
ATOM	1070	OH	TYR	A	140	54.060	-51.756	-64.783	1.00	36.48	MOL1	O
ATOM	1071	C	TYR	A	140	58.248	-50.879	-69.507	1.00	34.41	MOL1	C
ATOM	1072	O	TYR	A	140	58.082	-50.874	-70.722	1.00	42.98	MOL1	O
ATOM	1073	N	PRO	A	141	58.279	-52.017	-68.814	1.00	29.07	MOL1	N
ATOM	1074	CD	PRO	A	141	57.905	-53.293	-69.443	1.00	29.25	MOL1	C
ATOM	1075	CA	PRO	A	141	58.450	-52.164	-67.372	1.00	34.44	MOL1	C
ATOM	1076	CB	PRO	A	141	58.049	-53.616	-67.119	1.00	38.89	MOL1	C
ATOM	1077	CG	PRO	A	141	58.319	-54.293	-68.420	1.00	30.33	MOL1	C
ATOM	1078	C	PRO	A	141	59.856	-51.847	-66.909	1.00	40.54	MOL1	C
ATOM	1079	O	PRO	A	141	60.685	-51.408	-67.704	1.00	43.11	MOL1	O
ATOM	1080	N	LYS	A	142	60.130	-52.076	-65.626	1.00	44.63	MOL1	N
ATOM	1081	CA	LYS	A	142	61.445	-51.758	-65.077	1.00	48.29	MOL1	C
ATOM	1082	CB	LYS	A	142	61.361	-51.566	-63.557	1.00	49.32	MOL1	C
ATOM	1083	CG	LYS	A	142	60.855	-52.783	-62.805	1.00	65.69	MOL1	C
ATOM	1084	CD	LYS	A	142	60.636	-52.527	-61.309	1.00	65.89	MOL1	C
ATOM	1085	CE	LYS	A	142	60.122	-53.799	-60.621	1.00	70.08	MOL1	C
ATOM	1086	NZ	LYS	A	142	59.673	-53.597	-59.215	1.00	70.23	MOL1	N
ATOM	1087	C	LYS	A	142	62.532	-52.758	-65.417	1.00	48.98	MOL1	C
ATOM	1088	O	LYS	A	142	63.711	-52.414	-65.400	1.00	49.13	MOL1	O
ATOM	1089	N	ASP	A	143	62.146	-53.991	-65.722	1.00	49.38	MOL1	N
ATOM	1090	CA	ASP	A	143	63.121	-55.004	-66.072	1.00	51.81	MOL1	C
ATOM	1091	CB	ASP	A	143	62.405	-56.349	-66.242	1.00	59.75	MOL1	C
ATOM	1092	CG	ASP	A	143	63.287	-57.415	-66.886	1.00	72.97	MOL1	C
ATOM	1093	OD1	ASP	A	143	63.166	-57.631	-68.120	1.00	77.86	MOL1	O
ATOM	1094	OD2	ASP	A	143	64.103	-58.033	-66.160	1.00	77.34	MOL1	O
ATOM	1095	C	ASP	A	143	63.815	-54.575	-67.358	1.00	47.42	MOL1	C
ATOM	1096	O	ASP	A	143	63.174	-54.496	-68.406	1.00	53.81	MOL1	O
ATOM	1097	N	ILE	A	144	65.109	-54.274	-67.280	1.00	41.26	MOL1	N
ATOM	1098	CA	ILE	A	144	65.866	-53.860	-68.458	1.00	38.16	MOL1	C
ATOM	1099	CB	ILE	A	144	65.852	-52.337	-68.629	1.00	30.07	MOL1	C
ATOM	1100	CG2	ILE	A	144	66.828	-51.680	-67.685	1.00	20.04	MOL1	C
ATOM	1101	CG1	ILE	A	144	66.262	-51.973	-70.045	1.00	30.24	MOL1	C
ATOM	1102	CD1	ILE	A	144	66.502	-50.492	-70.220	1.00	31.80	MOL1	C
ATOM	1103	C	ILE	A	144	67.289	-54.332	-68.292	1.00	46.52	MOL1	C
ATOM	1104	O	ILE	A	144	67.712	-54.630	-67.178	1.00	60.07	MOL1	O
ATOM	1105	N	ASN	A	145	68.040	-54.386	-69.383	1.00	49.45	MOL1	N
ATOM	1106	CA	ASN	A	145	69.409	-54.870	-69.312	1.00	52.69	MOL1	C
ATOM	1107	CB	ASN	A	145	69.427	-56.322	-69.798	1.00	60.84	MOL1	C
ATOM	1108	CG	ASN	A	145	70.821	-56.857	-69.996	1.00	70.72	MOL1	C
ATOM	1109	OD1	ASN	A	145	71.513	-57.186	-69.028	1.00	81.80	MOL1	O
ATOM	1110	ND2	ASN	A	145	71.252	-56.945	-71.255	1.00	68.81	MOL1	N
ATOM	1111	C	ASN	A	145	70.379	-54.037	-70.131	1.00	46.40	MOL1	C
ATOM	1112	O	ASN	A	145	70.174	-53.853	-71.309	1.00	50.05	MOL1	O
ATOM	1113	N	VAL	A	146	71.440	-53.549	-69.501	1.00	45.51	MOL1	N
ATOM	1114	CA	VAL	A	146	72.448	-52.755	-70.183	1.00	40.80	MOL1	C
ATOM	1115	CB	VAL	A	146	72.802	-51.540	-69.377	1.00	33.02	MOL1	C
ATOM	1116	CG1	VAL	A	146	73.935	-50.820	-70.011	1.00	39.18	MOL1	C
ATOM	1117	CG2	VAL	A	146	71.634	-50.644	-69.307	1.00	37.76	MOL1	C
ATOM	1118	C	VAL	A	146	73.728	-53.539	-70.413	1.00	45.59	MOL1	C
ATOM	1119	O	VAL	A	146	74.178	-54.270	-69.537	1.00	53.43	MOL1	O
ATOM	1120	N	LYS	A	147	74.312	-53.381	-71.595	1.00	45.17	MOL1	N
ATOM	1121	CA	LYS	A	147	75.546	-54.062	-71.934	1.00	41.57	MOL1	C
ATOM	1122	CB	LYS	A	147	75.288	-55.121	-73.003	1.00	35.13	MOL1	C
ATOM	1123	CG	LYS	A	147	76.499	-55.994	-73.323	1.00	48.78	MOL1	C
ATOM	1124	CD	LYS	A	147	76.275	-56.963	-74.494	1.00	56.43	MOL1	C
ATOM	1125	CE	LYS	A	147	75.326	-58.104	-74.130	1.00	63.35	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1126	NZ	LYS	A	147	74.942	-58.897	-75.338	1.00	68.95	MOL1	N
ATOM	1127	C	LYS	A	147	76.536	-53.032	-72.447	1.00	42.36	MOL1	C
ATOM	1128	O	LYS	A	147	76.182	-52.211	-73.278	1.00	49.48	MOL1	O
ATOM	1129	N	TRP	A	148	77.764	-53.046	-71.925	1.00	43.56	MOL1	N
ATOM	1130	CA	TRP	A	148	78.794	-52.119	-72.386	1.00	36.05	MOL1	C
ATOM	1131	CB	TRP	A	148	79.568	-51.540	-71.235	1.00	19.03	MOL1	C
ATOM	1132	CG	TRP	A	148	78.816	-50.550	-70.479	1.00	23.02	MOL1	C
ATOM	1133	CD2	TRP	A	148	78.824	-49.142	-70.685	1.00	19.65	MOL1	C
ATOM	1134	CE2	TRP	A	148	77.996	-48.575	-69.713	1.00	17.44	MOL1	C
ATOM	1135	CE3	TRP	A	148	79.457	-48.307	-71.596	1.00	23.18	MOL1	C
ATOM	1136	CD1	TRP	A	148	78.002	-50.779	-69.421	1.00	26.45	MOL1	C
ATOM	1137	NE1	TRP	A	148	77.503	-49.595	-68.946	1.00	19.46	MOL1	N
ATOM	1138	CZ2	TRP	A	148	77.784	-47.217	-69.627	1.00	20.36	MOL1	C
ATOM	1139	CZ3	TRP	A	148	79.246	-46.958	-71.510	1.00	23.54	MOL1	C
ATOM	1140	CH2	TRP	A	148	78.418	-46.424	-70.536	1.00	28.60	MOL1	C
ATOM	1141	C	TRP	A	148	79.769	-52.794	-73.326	1.00	33.56	MOL1	C
ATOM	1142	O	TRP	A	148	80.045	-53.971	-73.202	1.00	37.20	MOL1	O
ATOM	1143	N	LYS	A	149	80.295	-52.042	-74.274	1.00	36.11	MOL1	N
ATOM	1144	CA	LYS	A	149	81.232	-52.608	-75.215	1.00	39.83	MOL1	C
ATOM	1145	CB	LYS	A	149	80.489	-53.080	-76.462	1.00	26.76	MOL1	C
ATOM	1146	CG	LYS	A	149	79.504	-54.190	-76.223	1.00	21.05	MOL1	C
ATOM	1147	CD	LYS	A	149	79.086	-54.833	-77.556	1.00	31.10	MOL1	C
ATOM	1148	CE	LYS	A	149	78.071	-55.977	-77.358	1.00	37.33	MOL1	C
ATOM	1149	NZ	LYS	A	149	77.637	-56.634	-78.636	1.00	42.65	MOL1	N
ATOM	1150	C	LYS	A	149	82.358	-51.669	-75.624	1.00	47.29	MOL1	C
ATOM	1151	O	LYS	A	149	82.118	-50.633	-76.245	1.00	55.61	MOL1	O
ATOM	1152	N	ILE	A	150	83.590	-52.028	-75.278	1.00	49.76	MOL1	N
ATOM	1153	CA	ILE	A	150	84.721	-51.210	-75.683	1.00	52.87	MOL1	C
ATOM	1154	CB	ILE	A	150	85.764	-51.046	-74.605	1.00	45.48	MOL1	C
ATOM	1155	CG2	ILE	A	150	86.757	-50.004	-75.057	1.00	38.52	MOL1	C
ATOM	1156	CG1	ILE	A	150	85.114	-50.591	-73.302	1.00	43.30	MOL1	C
ATOM	1157	CD1	ILE	A	150	86.118	-50.230	-72.233	1.00	45.01	MOL1	C
ATOM	1158	C	ILE	A	150	85.389	-51.861	-76.873	1.00	56.06	MOL1	C
ATOM	1159	O	ILE	A	150	85.836	-52.997	-76.810	1.00	61.44	MOL1	O
ATOM	1160	N	ASP	A	151	85.444	-51.132	-77.971	1.00	59.45	MOL1	N
ATOM	1161	CA	ASP	A	151	86.049	-51.648	-79.183	1.00	57.43	MOL1	C
ATOM	1162	CB	ASP	A	151	87.559	-51.826	-79.013	1.00	55.63	MOL1	C
ATOM	1163	CG	ASP	A	151	88.340	-50.527	-79.172	1.00	55.29	MOL1	C
ATOM	1164	OD1	ASP	A	151	87.733	-49.459	-79.419	1.00	54.09	MOL1	O
ATOM	1165	OD2	ASP	A	151	89.582	-50.588	-79.050	1.00	55.18	MOL1	O
ATOM	1166	C	ASP	A	151	85.441	-52.975	-79.593	1.00	52.93	MOL1	C
ATOM	1167	O	ASP	A	151	86.107	-53.801	-80.190	1.00	56.66	MOL1	O
ATOM	1168	N	GLY	A	152	84.183	-53.193	-79.252	1.00	52.23	MOL1	N
ATOM	1169	CA	GLY	A	152	83.534	-54.413	-79.674	1.00	56.75	MOL1	C
ATOM	1170	C	GLY	A	152	83.393	-55.515	-78.664	1.00	59.09	MOL1	C
ATOM	1171	O	GLY	A	152	82.607	-56.431	-78.866	1.00	67.69	MOL1	O
ATOM	1172	N	SER	A	153	84.137	-55.438	-77.574	1.00	58.80	MOL1	N
ATOM	1173	CA	SER	A	153	84.077	-56.481	-76.561	1.00	52.16	MOL1	C
ATOM	1174	CB	SER	A	153	85.490	-56.860	-76.129	1.00	50.58	MOL1	C
ATOM	1175	OG	SER	A	153	86.242	-57.306	-77.239	1.00	53.22	MOL1	O
ATOM	1176	C	SER	A	153	83.280	-56.051	-75.353	1.00	46.06	MOL1	C
ATOM	1177	O	SER	A	153	83.348	-54.899	-74.956	1.00	40.77	MOL1	O
ATOM	1178	N	GLU	A	154	82.547	-56.991	-74.764	1.00	42.48	MOL1	N
ATOM	1179	CA	GLU	A	154	81.719	-56.722	-73.596	1.00	37.93	MOL1	C
ATOM	1180	CB	GLU	A	154	80.770	-57.871	-73.372	1.00	42.48	MOL1	C
ATOM	1181	CG	GLU	A	154	79.710	-57.630	-72.329	1.00	56.00	MOL1	C
ATOM	1182	CD	GLU	A	154	78.833	-58.858	-72.137	1.00	68.87	MOL1	C
ATOM	1183	OE1	GLU	A	154	78.314	-59.374	-73.160	1.00	73.99	MOL1	O
ATOM	1184	OE2	GLU	A	154	78.670	-59.307	-70.975	1.00	72.26	MOL1	O
ATOM	1185	C	GLU	A	154	82.513	-56.492	-72.341	1.00	36.65	MOL1	C
ATOM	1186	O	GLU	A	154	83.396	-57.253	-72.001	1.00	40.37	MOL1	O
ATOM	1187	N	ARG	A	155	82.169	-55.432	-71.637	1.00	43.14	MOL1	N
ATOM	1188	CA	ARG	A	155	82.845	-55.045	-70.407	1.00	51.06	MOL1	C
ATOM	1189	CB	ARG	A	155	83.349	-53.614	-70.570	1.00	46.94	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1190	CG	ARG	A	155	84.389	-53.150	-69.581	1.00	57.47	MOL1	C
ATOM	1191	CD	ARG	A	155	85.765	-53.690	-69.926	1.00	64.96	MOL1	C
ATOM	1192	NE	ARG	A	155	86.819	-52.963	-69.222	1.00	71.72	MOL1	N
ATOM	1193	CZ	ARG	A	155	86.825	-52.725	-67.913	1.00	69.39	MOL1	C
ATOM	1194	NH1	ARG	A	155	85.831	-53.150	-67.151	1.00	71.63	MOL1	N
ATOM	1195	NH2	ARG	A	155	87.837	-52.072	-67.365	1.00	66.54	MOL1	N
ATOM	1196	C	ARG	A	155	81.840	-55.110	-69.253	1.00	53.67	MOL1	C
ATOM	1197	O	ARG	A	155	80.711	-54.638	-69.390	1.00	55.24	MOL1	O
ATOM	1198	N	GLN	A	156	82.231	-55.696	-68.124	1.00	55.04	MOL1	N
ATOM	1199	CA	GLN	A	156	81.323	-55.783	-66.986	1.00	58.54	MOL1	C
ATOM	1200	CB	GLN	A	156	81.004	-57.229	-66.615	1.00	61.59	MOL1	C
ATOM	1201	CG	GLN	A	156	80.438	-58.075	-67.737	1.00	79.88	MOL1	C
ATOM	1202	CD	GLN	A	156	79.966	-59.440	-67.262	1.00	87.41	MOL1	C
ATOM	1203	OE1	GLN	A	156	80.640	-60.102	-66.468	1.00	93.29	MOL1	O
ATOM	1204	NE2	GLN	A	156	78.805	-59.873	-67.755	1.00	89.51	MOL1	N
ATOM	1205	C	GLN	A	156	81.928	-55.130	-65.778	1.00	59.64	MOL1	C
ATOM	1206	O	GLN	A	156	81.261	-54.408	-65.058	1.00	65.86	MOL1	O
ATOM	1207	N	ASN	A	157	83.199	-55.395	-65.546	1.00	63.25	MOL1	N
ATOM	1208	CA	ASN	A	157	83.864	-54.823	-64.394	1.00	71.10	MOL1	C
ATOM	1209	CB	ASN	A	157	85.283	-55.394	-64.247	1.00	86.83	MOL1	C
ATOM	1210	CG	ASN	A	157	85.302	-56.760	-63.568	1.00	98.45	MOL1	C
ATOM	1211	OD1	ASN	A	157	84.663	-57.717	-64.031	1.00	103.27	MOL1	O
ATOM	1212	ND2	ASN	A	157	86.042	-56.857	-62.463	1.00	102.54	MOL1	N
ATOM	1213	C	ASN	A	157	83.936	-53.316	-64.490	1.00	65.06	MOL1	C
ATOM	1214	O	ASN	A	157	84.121	-52.756	-65.555	1.00	58.63	MOL1	O
ATOM	1215	N	GLY	A	158	83.781	-52.661	-63.355	1.00	66.40	MOL1	N
ATOM	1216	CA	GLY	A	158	83.860	-51.222	-63.340	1.00	65.80	MOL1	C
ATOM	1217	C	GLY	A	158	82.582	-50.549	-63.763	1.00	60.11	MOL1	C
ATOM	1218	O	GLY	A	158	82.597	-49.387	-64.163	1.00	66.36	MOL1	O
ATOM	1219	N	VAL	A	159	81.470	-51.268	-63.691	1.00	52.44	MOL1	N
ATOM	1220	CA	VAL	A	159	80.195	-50.670	-64.060	1.00	41.97	MOL1	C
ATOM	1221	CB	VAL	A	159	79.426	-51.493	-65.090	1.00	27.90	MOL1	C
ATOM	1222	CG1	VAL	A	159	78.090	-50.867	-65.301	1.00	28.67	MOL1	C
ATOM	1223	CG2	VAL	A	159	80.148	-51.523	-66.408	1.00	15.19	MOL1	C
ATOM	1224	C	VAL	A	159	79.286	-50.500	-62.862	1.00	42.76	MOL1	C
ATOM	1225	O	VAL	A	159	79.097	-51.424	-62.075	1.00	48.52	MOL1	O
ATOM	1226	N	LEU	A	160	78.725	-49.307	-62.730	1.00	42.26	MOL1	N
ATOM	1227	CA	LEU	A	160	77.820	-48.994	-61.632	1.00	45.51	MOL1	C
ATOM	1228	CB	LEU	A	160	78.399	-47.914	-60.728	1.00	40.24	MOL1	C
ATOM	1229	CG	LEU	A	160	79.395	-48.483	-59.731	1.00	46.31	MOL1	C
ATOM	1230	CD1	LEU	A	160	79.255	-47.725	-58.429	1.00	43.90	MOL1	C
ATOM	1231	CD2	LEU	A	160	79.122	-49.969	-59.515	1.00	38.91	MOL1	C
ATOM	1232	C	LEU	A	160	76.470	-48.517	-62.121	1.00	46.77	MOL1	C
ATOM	1233	O	LEU	A	160	76.371	-47.542	-62.854	1.00	45.73	MOL1	O
ATOM	1234	N	ASN	A	161	75.421	-49.198	-61.684	1.00	48.44	MOL1	N
ATOM	1235	CA	ASN	A	161	74.076	-48.846	-62.090	1.00	41.68	MOL1	C
ATOM	1236	CB	ASN	A	161	73.372	-50.060	-62.683	1.00	31.00	MOL1	C
ATOM	1237	CG	ASN	A	161	74.031	-50.548	-63.939	1.00	33.80	MOL1	C
ATOM	1238	OD1	ASN	A	161	74.470	-49.752	-64.760	1.00	44.82	MOL1	O
ATOM	1239	ND2	ASN	A	161	74.098	-51.859	-64.109	1.00	31.39	MOL1	N
ATOM	1240	C	ASN	A	161	73.239	-48.328	-60.953	1.00	40.97	MOL1	C
ATOM	1241	O	ASN	A	161	73.439	-48.691	-59.800	1.00	48.68	MOL1	O
ATOM	1242	N	SER	A	162	72.284	-47.483	-61.299	1.00	42.52	MOL1	N
ATOM	1243	CA	SER	A	162	71.360	-46.920	-60.335	1.00	47.61	MOL1	C
ATOM	1244	CB	SER	A	162	71.866	-45.590	-59.816	1.00	44.97	MOL1	C
ATOM	1245	OG	SER	A	162	70.996	-45.115	-58.808	1.00	56.75	MOL1	O
ATOM	1246	C	SER	A	162	70.011	-46.692	-60.991	1.00	51.05	MOL1	C
ATOM	1247	O	SER	A	162	69.925	-45.990	-61.995	1.00	52.94	MOL1	O
ATOM	1248	N	TRP	A	163	68.958	-47.279	-60.426	1.00	53.80	MOL1	N
ATOM	1249	CA	TRP	A	163	67.607	-47.112	-60.970	1.00	56.76	MOL1	C
ATOM	1250	CB	TRP	A	163	66.916	-48.468	-61.105	1.00	56.83	MOL1	C
ATOM	1251	CG	TRP	A	163	67.638	-49.460	-61.963	1.00	71.33	MOL1	C
ATOM	1252	CD2	TRP	A	163	68.714	-50.316	-61.561	1.00	75.62	MOL1	C
ATOM	1253	CE2	TRP	A	163	69.028	-51.141	-62.663	1.00	74.63	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1254	CE3	TRP	A	163	69.438	-50.468	-60.375	1.00	82.34	MOL1	C
ATOM	1255	CD1	TRP	A	163	67.359	-49.785	-63.259	1.00	73.47	MOL1	C
ATOM	1256	NE1	TRP	A	163	68.188	-50.798	-63.687	1.00	71.93	MOL1	N
ATOM	1257	CZ2	TRP	A	163	70.031	-52.104	-62.614	1.00	85.23	MOL1	C
ATOM	1258	CZ3	TRP	A	163	70.439	-51.430	-60.326	1.00	90.96	MOL1	C
ATOM	1259	CH2	TRP	A	163	70.725	-52.236	-61.440	1.00	91.71	MOL1	C
ATOM	1260	C	TRP	A	163	66.737	-46.208	-60.085	1.00	55.98	MOL1	C
ATOM	1261	O	TRP	A	163	66.921	-46.138	-58.873	1.00	59.76	MOL1	O
ATOM	1262	N	THR	A	164	65.780	-45.518	-60.689	1.00	55.09	MOL1	N
ATOM	1263	CA	THR	A	164	64.887	-44.652	-59.925	1.00	54.84	MOL1	C
ATOM	1264	CB	THR	A	164	64.590	-43.356	-60.667	1.00	52.35	MOL1	C
ATOM	1265	OG1	THR	A	164	63.390	-43.517	-61.435	1.00	50.16	MOL1	O
ATOM	1266	CG2	THR	A	164	65.724	-43.016	-61.605	1.00	46.71	MOL1	C
ATOM	1267	C	THR	A	164	63.543	-45.353	-59.692	1.00	59.43	MOL1	C
ATOM	1268	O	THR	A	164	63.308	-46.466	-60.169	1.00	58.45	MOL1	O
ATOM	1269	N	ASP	A	165	62.653	-44.688	-58.970	1.00	62.09	MOL1	N
ATOM	1270	CA	ASP	A	165	61.343	-45.251	-58.674	1.00	66.67	MOL1	C
ATOM	1271	CB	ASP	A	165	60.917	-44.820	-57.280	1.00	80.07	MOL1	C
ATOM	1272	CG	ASP	A	165	62.003	-45.043	-56.252	1.00	92.52	MOL1	C
ATOM	1273	OD1	ASP	A	165	62.051	-46.153	-55.671	1.00	95.82	MOL1	O
ATOM	1274	OD2	ASP	A	165	62.817	-44.109	-56.044	1.00	99.11	MOL1	O
ATOM	1275	C	ASP	A	165	60.324	-44.762	-59.688	1.00	63.72	MOL1	C
ATOM	1276	O	ASP	A	165	60.561	-43.785	-60.393	1.00	66.68	MOL1	O
ATOM	1277	N	GLN	A	166	59.182	-45.425	-59.754	1.00	56.44	MOL1	N
ATOM	1278	CA	GLN	A	166	58.178	-45.033	-60.713	1.00	58.67	MOL1	C
ATOM	1279	CB	GLN	A	166	56.908	-45.819	-60.432	1.00	59.19	MOL1	C
ATOM	1280	CG	GLN	A	166	56.084	-46.112	-61.663	1.00	58.86	MOL1	C
ATOM	1281	CD	GLN	A	166	55.394	-47.459	-61.581	1.00	64.40	MOL1	C
ATOM	1282	OE1	GLN	A	166	55.010	-47.911	-60.499	1.00	64.45	MOL1	O
ATOM	1283	NE2	GLN	A	166	55.223	-48.104	-62.726	1.00	66.99	MOL1	N
ATOM	1284	C	GLN	A	166	57.950	-43.520	-60.653	1.00	62.82	MOL1	C
ATOM	1285	O	GLN	A	166	57.456	-42.996	-59.658	1.00	68.37	MOL1	O
ATOM	1286	N	ASP	A	167	58.342	-42.816	-61.714	1.00	65.41	MOL1	N
ATOM	1287	CA	ASP	A	167	58.188	-41.364	-61.760	1.00	66.30	MOL1	C
ATOM	1288	CB	ASP	A	167	58.740	-40.756	-63.042	1.00	70.81	MOL1	C
ATOM	1289	CG	ASP	A	167	58.354	-39.276	-63.197	1.00	72.23	MOL1	C
ATOM	1290	OD1	ASP	A	167	58.940	-38.401	-62.506	1.00	73.65	MOL1	O
ATOM	1291	OD2	ASP	A	167	57.451	-38.994	-64.012	1.00	68.65	MOL1	O
ATOM	1292	C	ASP	A	167	56.749	-40.953	-61.658	1.00	65.57	MOL1	C
ATOM	1293	O	ASP	A	167	55.985	-41.154	-62.588	1.00	64.53	MOL1	O
ATOM	1294	N	SER	A	168	56.411	-40.346	-60.523	1.00	73.23	MOL1	N
ATOM	1295	CA	SER	A	168	55.066	-39.872	-60.208	1.00	74.94	MOL1	C
ATOM	1296	CB	SER	A	168	55.128	-38.780	-59.149	1.00	71.48	MOL1	C
ATOM	1297	OG	SER	A	168	55.701	-37.605	-59.694	1.00	75.17	MOL1	O
ATOM	1298	C	SER	A	168	54.254	-39.353	-61.387	1.00	79.14	MOL1	C
ATOM	1299	O	SER	A	168	53.053	-39.603	-61.455	1.00	84.23	MOL1	O
ATOM	1300	N	LYS	A	169	54.880	-38.629	-62.311	1.00	80.12	MOL1	N
ATOM	1301	CA	LYS	A	169	54.130	-38.123	-63.455	1.00	80.42	MOL1	C
ATOM	1302	CB	LYS	A	169	54.921	-37.044	-64.185	1.00	84.94	MOL1	C
ATOM	1303	CG	LYS	A	169	55.039	-35.736	-63.406	1.00	94.72	MOL1	C
ATOM	1304	CD	LYS	A	169	53.685	-35.073	-63.163	1.00	98.23	MOL1	C
ATOM	1305	CE	LYS	A	169	53.842	-33.610	-62.697	1.00	102.08	MOL1	C
ATOM	1306	NZ	LYS	A	169	54.350	-32.673	-63.761	1.00	97.72	MOL1	N
ATOM	1307	C	LYS	A	169	53.656	-39.208	-64.441	1.00	80.54	MOL1	C
ATOM	1308	O	LYS	A	169	52.453	-39.429	-64.560	1.00	83.84	MOL1	O
ATOM	1309	N	ASP	A	170	54.568	-39.900	-65.126	1.00	72.17	MOL1	N
ATOM	1310	CA	ASP	A	170	54.145	-40.923	-66.077	1.00	61.39	MOL1	C
ATOM	1311	CB	ASP	A	170	54.832	-40.683	-67.401	1.00	59.48	MOL1	C
ATOM	1312	CG	ASP	A	170	56.303	-40.674	-67.257	1.00	59.53	MOL1	C
ATOM	1313	OD1	ASP	A	170	57.002	-40.408	-68.264	1.00	63.71	MOL1	O
ATOM	1314	OD2	ASP	A	170	56.740	-40.942	-66.114	1.00	48.77	MOL1	O
ATOM	1315	C	ASP	A	170	54.357	-42.372	-65.631	1.00	56.39	MOL1	C
ATOM	1316	O	ASP	A	170	54.340	-43.301	-66.436	1.00	56.20	MOL1	O
ATOM	1317	N	SER	A	171	54.542	-42.567	-64.340	1.00	52.36	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	1318	CA	SER A 171	54.718	-43.905	-63.795	1.00	54.88	MOL1 C
ATOM	1319	CB	SER A 171	53.345	-44.582	-63.697	1.00	48.11	MOL1 C
ATOM	1320	OG	SER A 171	52.491	-43.858	-62.823	1.00	43.01	MOL1 O
ATOM	1321	C	SER A 171	55.730	-44.828	-64.510	1.00	55.50	MOL1 C
ATOM	1322	O	SER A 171	55.613	-46.054	-64.443	1.00	51.45	MOL1 O
ATOM	1323	N	THR A 172	56.728	-44.230	-65.163	1.00	55.06	MOL1 N
ATOM	1324	CA	THR A 172	57.784	-44.968	-65.872	1.00	55.45	MOL1 C
ATOM	1325	CB	THR A 172	58.251	-44.191	-67.076	1.00	55.67	MOL1 C
ATOM	1326	OG1	THR A 172	58.701	-42.897	-66.648	1.00	59.46	MOL1 O
ATOM	1327	CG2	THR A 172	57.131	-44.038	-68.061	1.00	58.93	MOL1 C
ATOM	1328	C	THR A 172	59.015	-45.158	-64.982	1.00	55.74	MOL1 C
ATOM	1329	O	THR A 172	58.996	-44.796	-63.817	1.00	63.90	MOL1 O
ATOM	1330	N	TYR A 173	60.085	-45.727	-65.526	1.00	52.56	MOL1 N
ATOM	1331	CA	TYR A 173	61.307	-45.895	-64.750	1.00	50.26	MOL1 C
ATOM	1332	CB	TYR A 173	61.607	-47.367	-64.509	1.00	43.79	MOL1 C
ATOM	1333	CG	TYR A 173	60.621	-48.061	-63.605	1.00	43.50	MOL1 C
ATOM	1334	CD1	TYR A 173	59.493	-48.681	-64.113	1.00	44.80	MOL1 C
ATOM	1335	CE1	TYR A 173	58.604	-49.346	-63.278	1.00	45.59	MOL1 C
ATOM	1336	CD2	TYR A 173	60.831	-48.117	-62.239	1.00	44.97	MOL1 C
ATOM	1337	CE2	TYR A 173	59.945	-48.774	-61.400	1.00	43.62	MOL1 C
ATOM	1338	CZ	TYR A 173	58.842	-49.384	-61.923	1.00	44.26	MOL1 C
ATOM	1339	OH	TYR A 173	57.978	-50.036	-61.082	1.00	51.59	MOL1 O
ATOM	1340	C	TYR A 173	62.475	-45.251	-65.486	1.00	55.17	MOL1 C
ATOM	1341	O	TYR A 173	62.322	-44.788	-66.618	1.00	62.28	MOL1 O
ATOM	1342	N	SER A 174	63.636	-45.210	-64.841	1.00	53.72	MOL1 N
ATOM	1343	CA	SER A 174	64.832	-44.632	-65.449	1.00	51.71	MOL1 C
ATOM	1344	CB	SER A 174	64.833	-43.108	-65.304	1.00	50.48	MOL1 C
ATOM	1345	OG	SER A 174	63.860	-42.498	-66.147	1.00	44.82	MOL1 O
ATOM	1346	C	SER A 174	66.065	-45.223	-64.793	1.00	52.24	MOL1 C
ATOM	1347	O	SER A 174	66.041	-45.570	-63.617	1.00	58.50	MOL1 O
ATOM	1348	N	MET A 175	67.143	-45.338	-65.553	1.00	49.18	MOL1 N
ATOM	1349	CA	MET A 175	68.363	-45.922	-65.031	1.00	47.47	MOL1 C
ATOM	1350	CB	MET A 175	68.417	-47.380	-65.443	1.00	40.24	MOL1 C
ATOM	1351	CG	MET A 175	69.757	-48.007	-65.277	1.00	42.37	MOL1 C
ATOM	1352	SD	MET A 175	69.821	-49.506	-66.218	1.00	45.65	MOL1 S
ATOM	1353	CE	MET A 175	70.994	-50.394	-65.304	1.00	40.57	MOL1 C
ATOM	1354	C	MET A 175	69.605	-45.206	-65.533	1.00	50.44	MOL1 C
ATOM	1355	O	MET A 175	69.617	-44.676	-66.647	1.00	55.74	MOL1 O
ATOM	1356	N	SER A 176	70.655	-45.210	-64.718	1.00	46.12	MOL1 N
ATOM	1357	CA	SER A 176	71.892	-44.558	-65.091	1.00	41.27	MOL1 C
ATOM	1358	CB	SER A 176	72.061	-43.303	-64.266	1.00	29.85	MOL1 C
ATOM	1359	OG	SER A 176	73.372	-42.821	-64.386	1.00	43.09	MOL1 O
ATOM	1360	C	SER A 176	73.106	-45.456	-64.923	1.00	45.18	MOL1 C
ATOM	1361	O	SER A 176	73.592	-45.658	-63.812	1.00	54.11	MOL1 O
ATOM	1362	N	SER A 177	73.598	-45.985	-66.041	1.00	46.03	MOL1 N
ATOM	1363	CA	SER A 177	74.766	-46.859	-66.051	1.00	44.00	MOL1 C
ATOM	1364	CB	SER A 177	74.588	-47.925	-67.127	1.00	35.81	MOL1 C
ATOM	1365	OG	SER A 177	75.571	-48.936	-66.998	1.00	38.60	MOL1 O
ATOM	1366	C	SER A 177	76.042	-46.049	-66.314	1.00	43.36	MOL1 C
ATOM	1367	O	SER A 177	76.122	-45.294	-67.273	1.00	37.64	MOL1 O
ATOM	1368	N	THR A 178	77.040	-46.225	-65.458	1.00	49.84	MOL1 N
ATOM	1369	CA	THR A 178	78.297	-45.497	-65.574	1.00	52.81	MOL1 C
ATOM	1370	CB	THR A 178	78.464	-44.563	-64.380	1.00	52.72	MOL1 C
ATOM	1371	OG1	THR A 178	77.268	-43.784	-64.208	1.00	53.19	MOL1 O
ATOM	1372	CG2	THR A 178	79.661	-43.672	-64.585	1.00	49.15	MOL1 C
ATOM	1373	C	THR A 178	79.525	-46.419	-65.642	1.00	53.03	MOL1 C
ATOM	1374	O	THR A 178	79.827	-47.156	-64.706	1.00	50.94	MOL1 O
ATOM	1375	N	LEU A 179	80.235	-46.368	-66.758	1.00	52.76	MOL1 N
ATOM	1376	CA	LEU A 179	81.420	-47.185	-66.946	1.00	49.79	MOL1 C
ATOM	1377	CB	LEU A 179	81.573	-47.529	-68.423	1.00	36.69	MOL1 C
ATOM	1378	CG	LEU A 179	82.180	-48.863	-68.827	1.00	28.63	MOL1 C
ATOM	1379	CD1	LEU A 179	82.723	-48.732	-70.234	1.00	9.54	MOL1 C
ATOM	1380	CD2	LEU A 179	83.255	-49.267	-67.853	1.00	12.92	MOL1 C
ATOM	1381	C	LEU A 179	82.613	-46.359	-66.500	1.00	55.80	MOL1 C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1382	O	LEU	A	179	82.973	-45.379	-67.155	1.00	60.37	MOL1	O
ATOM	1383	N	THR	A	180	83.220	-46.732	-65.380	1.00	59.90	MOL1	N
ATOM	1384	CA	THR	A	180	84.376	-45.994	-64.909	1.00	61.75	MOL1	C
ATOM	1385	CB	THR	A	180	84.280	-45.653	-63.441	1.00	63.39	MOL1	C
ATOM	1386	OG1	THR	A	180	83.254	-44.670	-63.262	1.00	70.29	MOL1	O
ATOM	1387	CG2	THR	A	180	85.597	-45.084	-62.955	1.00	62.81	MOL1	C
ATOM	1388	C	THR	A	180	85.658	-46.751	-65.173	1.00	62.47	MOL1	C
ATOM	1389	O	THR	A	180	85.851	-47.886	-64.737	1.00	54.28	MOL1	O
ATOM	1390	N	LEU	A	181	86.526	-46.084	-65.920	1.00	65.09	MOL1	N
ATOM	1391	CA	LEU	A	181	87.802	-46.615	-66.331	1.00	62.68	MOL1	C
ATOM	1392	CB	LEU	A	181	87.846	-46.659	-67.856	1.00	47.31	MOL1	C
ATOM	1393	CG	LEU	A	181	86.804	-47.394	-68.708	1.00	38.89	MOL1	C
ATOM	1394	CD1	LEU	A	181	86.855	-46.908	-70.141	1.00	32.49	MOL1	C
ATOM	1395	CD2	LEU	A	181	87.068	-48.878	-68.681	1.00	40.25	MOL1	C
ATOM	1396	C	LEU	A	181	88.907	-45.689	-65.840	1.00	71.52	MOL1	C
ATOM	1397	O	LEU	A	181	88.650	-44.647	-65.235	1.00	78.58	MOL1	O
ATOM	1398	N	THR	A	182	90.142	-46.078	-66.124	1.00	74.68	MOL1	N
ATOM	1399	CA	THR	A	182	91.306	-45.298	-65.758	1.00	74.62	MOL1	C
ATOM	1400	CB	THR	A	182	92.413	-46.237	-65.283	1.00	62.12	MOL1	C
ATOM	1401	OG1	THR	A	182	93.526	-45.466	-64.827	1.00	74.80	MOL1	O
ATOM	1402	CG2	THR	A	182	92.834	-47.157	-66.395	1.00	52.68	MOL1	C
ATOM	1403	C	THR	A	182	91.718	-44.554	-67.032	1.00	77.25	MOL1	C
ATOM	1404	O	THR	A	182	91.715	-45.133	-68.108	1.00	74.29	MOL1	O
ATOM	1405	N	LYS	A	183	92.060	-43.274	-66.924	1.00	83.74	MOL1	N
ATOM	1406	CA	LYS	A	183	92.420	-42.525	-68.121	1.00	85.05	MOL1	C
ATOM	1407	CB	LYS	A	183	93.107	-41.200	-67.783	1.00	84.93	MOL1	C
ATOM	1408	CG	LYS	A	183	93.493	-40.396	-69.028	1.00	89.07	MOL1	C
ATOM	1409	CD	LYS	A	183	94.113	-39.041	-68.690	1.00	95.34	MOL1	C
ATOM	1410	CE	LYS	A	183	94.971	-38.505	-69.852	1.00	102.58	MOL1	C
ATOM	1411	NZ	LYS	A	183	94.225	-38.217	-71.122	1.00	101.02	MOL1	N
ATOM	1412	C	LYS	A	183	93.299	-43.336	-69.054	1.00	86.65	MOL1	C
ATOM	1413	O	LYS	A	183	93.243	-43.151	-70.264	1.00	89.84	MOL1	O
ATOM	1414	N	ASP	A	184	94.097	-44.244	-68.498	1.00	84.63	MOL1	N
ATOM	1415	CA	ASP	A	184	94.968	-45.074	-69.320	1.00	78.83	MOL1	C
ATOM	1416	CB	ASP	A	184	95.891	-45.922	-68.454	1.00	76.43	MOL1	C
ATOM	1417	CG	ASP	A	184	97.093	-45.160	-67.978	1.00	74.31	MOL1	C
ATOM	1418	OD1	ASP	A	184	97.602	-44.319	-68.747	1.00	72.34	MOL1	O
ATOM	1419	OD2	ASP	A	184	97.537	-45.412	-66.845	1.00	77.64	MOL1	O
ATOM	1420	C	ASP	A	184	94.164	-45.986	-70.222	1.00	74.98	MOL1	C
ATOM	1421	O	ASP	A	184	94.232	-45.882	-71.442	1.00	74.18	MOL1	O
ATOM	1422	N	GLU	A	185	93.410	-46.886	-69.602	1.00	72.44	MOL1	N
ATOM	1423	CA	GLU	A	185	92.573	-47.843	-70.315	1.00	66.34	MOL1	C
ATOM	1424	CB	GLU	A	185	91.754	-48.663	-69.314	1.00	63.30	MOL1	C
ATOM	1425	CG	GLU	A	185	90.586	-49.427	-69.921	1.00	67.55	MOL1	C
ATOM	1426	CD	GLU	A	185	90.754	-50.947	-69.877	1.00	72.80	MOL1	C
ATOM	1427	OE1	GLU	A	185	91.181	-51.544	-70.902	1.00	65.76	MOL1	O
ATOM	1428	OE2	GLU	A	185	90.456	-51.536	-68.810	1.00	70.09	MOL1	O
ATOM	1429	C	GLU	A	185	91.632	-47.153	-71.280	1.00	60.58	MOL1	C
ATOM	1430	O	GLU	A	185	91.301	-47.688	-72.326	1.00	59.86	MOL1	O
ATOM	1431	N	TYR	A	186	91.198	-45.956	-70.929	1.00	57.50	MOL1	N
ATOM	1432	CA	TYR	A	186	90.287	-45.246	-71.790	1.00	53.11	MOL1	C
ATOM	1433	CB	TYR	A	186	89.787	-43.998	-71.107	1.00	44.58	MOL1	C
ATOM	1434	CG	TYR	A	186	88.920	-43.169	-72.007	1.00	37.74	MOL1	C
ATOM	1435	CD1	TYR	A	186	89.158	-41.819	-72.167	1.00	31.73	MOL1	C
ATOM	1436	CE1	TYR	A	186	88.379	-41.062	-72.985	1.00	36.38	MOL1	C
ATOM	1437	CD2	TYR	A	186	87.870	-43.734	-72.696	1.00	31.82	MOL1	C
ATOM	1438	CE2	TYR	A	186	87.080	-42.980	-73.522	1.00	32.78	MOL1	C
ATOM	1439	CZ	TYR	A	186	87.336	-41.641	-73.664	1.00	35.16	MOL1	C
ATOM	1440	OH	TYR	A	186	86.546	-40.851	-74.466	1.00	32.28	MOL1	O
ATOM	1441	C	TYR	A	186	90.941	-44.873	-73.098	1.00	58.07	MOL1	C
ATOM	1442	O	TYR	A	186	90.287	-44.840	-74.137	1.00	58.04	MOL1	O
ATOM	1443	N	GLU	A	187	92.239	-44.592	-73.044	1.00	64.32	MOL1	N
ATOM	1444	CA	GLU	A	187	92.986	-44.205	-74.235	1.00	63.73	MOL1	C
ATOM	1445	CB	GLU	A	187	94.223	-43.415	-73.828	1.00	57.01	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1446	CG	GLU	A	187	93.924	-42.217	-72.923	1.00	62.09	MOL1	C
ATOM	1447	CD	GLU	A	187	93.226	-41.066	-73.638	1.00	71.91	MOL1	C
ATOM	1448	OE1	GLU	A	187	93.049	-39.993	-73.018	1.00	72.14	MOL1	O
ATOM	1449	OE2	GLU	A	187	92.851	-41.224	-74.819	1.00	80.91	MOL1	O
ATOM	1450	C	GLU	A	187	93.372	-45.394	-75.117	1.00	64.63	MOL1	C
ATOM	1451	O	GLU	A	187	93.408	-45.263	-76.336	1.00	66.47	MOL1	O
ATOM	1452	N	ARG	A	188	93.641	-46.549	-74.504	1.00	63.39	MOL1	N
ATOM	1453	CA	ARG	A	188	94.005	-47.768	-75.234	1.00	58.30	MOL1	C
ATOM	1454	CB	ARG	A	188	94.199	-48.975	-74.289	1.00	49.50	MOL1	C
ATOM	1455	CG	ARG	A	188	95.198	-48.838	-73.133	1.00	57.70	MOL1	C
ATOM	1456	CD	ARG	A	188	95.079	-49.991	-72.096	1.00	51.90	MOL1	C
ATOM	1457	NE	ARG	A	188	94.958	-51.299	-72.754	1.00	76.56	MOL1	N
ATOM	1458	CZ	ARG	A	188	94.852	-52.466	-72.116	1.00	81.12	MOL1	C
ATOM	1459	NH1	ARG	A	188	94.856	-52.484	-70.787	1.00	82.98	MOL1	N
ATOM	1460	NH2	ARG	A	188	94.739	-53.612	-72.800	1.00	68.90	MOL1	N
ATOM	1461	C	ARG	A	188	92.938	-48.176	-76.254	1.00	59.20	MOL1	C
ATOM	1462	O	ARG	A	188	93.225	-48.956	-77.152	1.00	65.46	MOL1	O
ATOM	1463	N	HIS	A	189	91.712	-47.673	-76.112	1.00	56.80	MOL1	N
ATOM	1464	CA	HIS	A	189	90.631	-48.034	-77.032	1.00	55.86	MOL1	C
ATOM	1465	CB	HIS	A	189	89.620	-48.900	-76.317	1.00	42.17	MOL1	C
ATOM	1466	CG	HIS	A	189	90.204	-50.157	-75.762	1.00	38.98	MOL1	C
ATOM	1467	CD2	HIS	A	189	90.437	-51.360	-76.337	1.00	30.28	MOL1	C
ATOM	1468	ND1	HIS	A	189	90.630	-50.266	-74.456	1.00	39.36	MOL1	N
ATOM	1469	CE1	HIS	A	189	91.097	-51.484	-74.245	1.00	35.00	MOL1	C
ATOM	1470	NE2	HIS	A	189	90.991	-52.166	-75.372	1.00	46.08	MOL1	N
ATOM	1471	C	HIS	A	189	89.918	-46.858	-77.663	1.00	58.12	MOL1	C
ATOM	1472	O	HIS	A	189	90.022	-45.749	-77.172	1.00	62.25	MOL1	O
ATOM	1473	N	ASN	A	190	89.164	-47.108	-78.733	1.00	63.31	MOL1	N
ATOM	1474	CA	ASN	A	190	88.482	-46.036	-79.459	1.00	71.60	MOL1	C
ATOM	1475	CB	ASN	A	190	88.913	-46.052	-80.934	1.00	84.21	MOL1	C
ATOM	1476	CG	ASN	A	190	90.226	-46.810	-81.158	1.00	102.56	MOL1	C
ATOM	1477	OD1	ASN	A	190	91.244	-46.527	-80.511	1.00	107.31	MOL1	O
ATOM	1478	ND2	ASN	A	190	90.207	-47.779	-82.082	1.00	104.96	MOL1	N
ATOM	1479	C	ASN	A	190	86.964	-46.031	-79.416	1.00	67.58	MOL1	C
ATOM	1480	O	ASN	A	190	86.351	-44.999	-79.160	1.00	72.39	MOL1	O
ATOM	1481	N	SER	A	191	86.352	-47.173	-79.685	1.00	59.40	MOL1	N
ATOM	1482	CA	SER	A	191	84.902	-47.248	-79.695	1.00	56.91	MOL1	C
ATOM	1483	CB	SER	A	191	84.457	-48.247	-80.739	1.00	57.49	MOL1	C
ATOM	1484	OG	SER	A	191	83.319	-48.946	-80.269	1.00	69.90	MOL1	O
ATOM	1485	C	SER	A	191	84.239	-47.610	-78.375	1.00	54.40	MOL1	C
ATOM	1486	O	SER	A	191	84.642	-48.554	-77.716	1.00	58.76	MOL1	O
ATOM	1487	N	TYR	A	192	83.203	-46.863	-78.003	1.00	51.54	MOL1	N
ATOM	1488	CA	TYR	A	192	82.451	-47.120	-76.773	1.00	43.81	MOL1	C
ATOM	1489	CB	TYR	A	192	82.693	-46.050	-75.749	1.00	31.45	MOL1	C
ATOM	1490	CG	TYR	A	192	84.071	-46.101	-75.234	1.00	33.88	MOL1	C
ATOM	1491	CD1	TYR	A	192	85.092	-45.470	-75.896	1.00	27.09	MOL1	C
ATOM	1492	CE1	TYR	A	192	86.359	-45.561	-75.446	1.00	30.45	MOL1	C
ATOM	1493	CD2	TYR	A	192	84.365	-46.826	-74.105	1.00	35.96	MOL1	C
ATOM	1494	CE2	TYR	A	192	85.638	-46.925	-73.650	1.00	36.01	MOL1	C
ATOM	1495	CZ	TYR	A	192	86.626	-46.291	-74.322	1.00	31.98	MOL1	C
ATOM	1496	OH	TYR	A	192	87.900	-46.375	-73.855	1.00	47.59	MOL1	O
ATOM	1497	C	TYR	A	192	80.974	-47.178	-76.994	1.00	40.63	MOL1	C
ATOM	1498	O	TYR	A	192	80.384	-46.205	-77.423	1.00	52.47	MOL1	O
ATOM	1499	N	THR	A	193	80.357	-48.308	-76.706	1.00	37.69	MOL1	N
ATOM	1500	CA	THR	A	193	78.928	-48.374	-76.892	1.00	38.83	MOL1	C
ATOM	1501	CB	THR	A	193	78.503	-49.230	-78.093	1.00	37.54	MOL1	C
ATOM	1502	OG1	THR	A	193	78.013	-50.486	-77.614	1.00	45.73	MOL1	O
ATOM	1503	CG2	THR	A	193	79.662	-49.433	-79.084	1.00	33.88	MOL1	C
ATOM	1504	C	THR	A	193	78.199	-48.868	-75.663	1.00	41.18	MOL1	C
ATOM	1505	O	THR	A	193	78.737	-49.561	-74.816	1.00	38.28	MOL1	O
ATOM	1506	N	CYS	A	194	76.941	-48.476	-75.598	1.00	47.42	MOL1	N
ATOM	1507	CA	CYS	A	194	76.047	-48.774	-74.502	1.00	47.15	MOL1	C
ATOM	1508	C	CYS	A	194	74.831	-49.431	-75.134	1.00	47.65	MOL1	C
ATOM	1509	O	CYS	A	194	74.062	-48.774	-75.803	1.00	54.03	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	1510	CB	CYS A 194	75.684	-47.442	-73.858	1.00	39.68	MOL1	C
ATOM	1511	SG	CYS A 194	74.348	-47.500	-72.653	1.00	51.74	MOL1	S
ATOM	1512	N	GLU A 195	74.671	-50.731	-74.942	1.00	48.90	MOL1	N
ATOM	1513	CA	GLU A 195	73.563	-51.470	-75.536	1.00	49.80	MOL1	C
ATOM	1514	CB	GLU A 195	74.036	-52.807	-76.101	1.00	53.85	MOL1	C
ATOM	1515	CG	GLU A 195	74.596	-52.777	-77.489	1.00	65.24	MOL1	C
ATOM	1516	CD	GLU A 195	75.010	-54.161	-77.957	1.00	74.76	MOL1	C
ATOM	1517	OE1	GLU A 195	74.373	-55.150	-77.505	1.00	68.48	MOL1	O
ATOM	1518	OE2	GLU A 195	75.960	-54.249	-78.784	1.00	78.03	MOL1	O
ATOM	1519	C	GLU A 195	72.477	-51.790	-74.549	1.00	49.53	MOL1	C
ATOM	1520	O	GLU A 195	72.682	-52.576	-73.630	1.00	54.30	MOL1	O
ATOM	1521	N	ALA A 196	71.299	-51.231	-74.779	1.00	48.84	MOL1	N
ATOM	1522	CA	ALA A 196	70.150	-51.463	-73.914	1.00	45.50	MOL1	C
ATOM	1523	CB	ALA A 196	69.484	-50.169	-73.632	1.00	36.22	MOL1	C
ATOM	1524	C	ALA A 196	69.127	-52.425	-74.496	1.00	42.90	MOL1	C
ATOM	1525	O	ALA A 196	68.513	-52.128	-75.505	1.00	44.36	MOL1	O
ATOM	1526	N	THR A 197	68.941	-53.572	-73.855	1.00	46.25	MOL1	N
ATOM	1527	CA	THR A 197	67.967	-54.546	-74.312	1.00	48.46	MOL1	C
ATOM	1528	CB	THR A 197	68.576	-55.949	-74.334	1.00	48.70	MOL1	C
ATOM	1529	OG1	THR A 197	69.130	-56.194	-75.631	1.00	54.19	MOL1	O
ATOM	1530	CG2	THR A 197	67.535	-56.992	-74.042	1.00	53.48	MOL1	C
ATOM	1531	C	THR A 197	66.702	-54.494	-73.439	1.00	49.26	MOL1	C
ATOM	1532	O	THR A 197	66.755	-54.609	-72.214	1.00	44.04	MOL1	O
ATOM	1533	N	HIS A 198	65.560	-54.320	-74.102	1.00	52.14	MOL1	N
ATOM	1534	CA	HIS A 198	64.278	-54.182	-73.429	1.00	48.51	MOL1	C
ATOM	1535	CB	HIS A 198	63.990	-52.696	-73.274	1.00	50.82	MOL1	C
ATOM	1536	CG	HIS A 198	62.824	-52.388	-72.395	1.00	51.96	MOL1	C
ATOM	1537	CD2	HIS A 198	61.867	-51.440	-72.493	1.00	49.15	MOL1	C
ATOM	1538	ND1	HIS A 198	62.600	-53.040	-71.201	1.00	54.81	MOL1	N
ATOM	1539	CE1	HIS A 198	61.556	-52.504	-70.600	1.00	53.80	MOL1	C
ATOM	1540	NE2	HIS A 198	61.094	-51.530	-71.363	1.00	55.59	MOL1	N
ATOM	1541	C	HIS A 198	63.084	-54.851	-74.106	1.00	47.86	MOL1	C
ATOM	1542	O	HIS A 198	62.980	-54.892	-75.323	1.00	51.50	MOL1	O
ATOM	1543	N	LYS A 199	62.177	-55.352	-73.279	1.00	50.89	MOL1	N
ATOM	1544	CA	LYS A 199	60.943	-56.023	-73.686	1.00	45.78	MOL1	C
ATOM	1545	CB	LYS A 199	59.970	-56.037	-72.489	1.00	44.61	MOL1	C
ATOM	1546	CG	LYS A 199	58.541	-56.495	-72.772	1.00	44.39	MOL1	C
ATOM	1547	CD	LYS A 199	57.756	-56.707	-71.466	1.00	47.28	MOL1	C
ATOM	1548	CE	LYS A 199	56.227	-56.710	-71.638	1.00	53.72	MOL1	C
ATOM	1549	NZ	LYS A 199	55.676	-57.784	-72.524	1.00	62.45	MOL1	N
ATOM	1550	C	LYS A 199	60.263	-55.369	-74.868	1.00	44.08	MOL1	C
ATOM	1551	O	LYS A 199	59.597	-56.048	-75.648	1.00	45.54	MOL1	O
ATOM	1552	N	THR A 200	60.429	-54.054	-75.000	1.00	38.03	MOL1	N
ATOM	1553	CA	THR A 200	59.778	-53.323	-76.077	1.00	39.11	MOL1	C
ATOM	1554	CB	THR A 200	59.803	-51.790	-75.832	1.00	35.10	MOL1	C
ATOM	1555	OG1	THR A 200	61.140	-51.292	-75.896	1.00	43.36	MOL1	O
ATOM	1556	CG2	THR A 200	59.243	-51.468	-74.483	1.00	40.65	MOL1	C
ATOM	1557	C	THR A 200	60.284	-53.601	-77.489	1.00	45.06	MOL1	C
ATOM	1558	O	THR A 200	59.611	-53.251	-78.461	1.00	46.28	MOL1	O
ATOM	1559	N	SER A 201	61.454	-54.226	-77.612	1.00	52.58	MOL1	N
ATOM	1560	CA	SER A 201	62.019	-54.525	-78.928	1.00	56.91	MOL1	C
ATOM	1561	CB	SER A 201	62.890	-53.370	-79.415	1.00	64.84	MOL1	C
ATOM	1562	OG	SER A 201	62.651	-52.186	-78.662	1.00	79.89	MOL1	O
ATOM	1563	C	SER A 201	62.858	-55.786	-78.927	1.00	58.33	MOL1	C
ATOM	1564	O	SER A 201	63.387	-56.203	-77.890	1.00	61.71	MOL1	O
ATOM	1565	N	THR A 202	62.979	-56.377	-80.111	1.00	55.24	MOL1	N
ATOM	1566	CA	THR A 202	63.742	-57.598	-80.313	1.00	54.05	MOL1	C
ATOM	1567	CB	THR A 202	63.183	-58.385	-81.491	1.00	45.01	MOL1	C
ATOM	1568	OG1	THR A 202	63.108	-57.522	-82.631	1.00	44.48	MOL1	O
ATOM	1569	CG2	THR A 202	61.810	-58.921	-81.171	1.00	37.84	MOL1	C
ATOM	1570	C	THR A 202	65.177	-57.225	-80.647	1.00	58.54	MOL1	C
ATOM	1571	O	THR A 202	66.090	-58.049	-80.582	1.00	64.29	MOL1	O
ATOM	1572	N	SER A 203	65.359	-55.967	-81.009	1.00	55.87	MOL1	N
ATOM	1573	CA	SER A 203	66.659	-55.469	-81.390	1.00	55.42	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1574	CB	SER A 203	66.579	-54.862	-82.792	1.00	64.96	MOL1 C
ATOM	1575	OG	SER A 203	65.456	-55.364	-83.506	1.00	68.33	MOL1 O
ATOM	1576	C	SER A 203	67.032	-54.401	-80.405	1.00	51.49	MOL1 C
ATOM	1577	O	SER A 203	66.366	-53.378	-80.324	1.00	56.39	MOL1 O
ATOM	1578	N	PRO A 204	68.125	-54.603	-79.667	1.00	49.57	MOL1 N
ATOM	1579	CD	PRO A 204	69.104	-55.652	-79.978	1.00	45.62	MOL1 C
ATOM	1580	CA	PRO A 204	68.655	-53.689	-78.646	1.00	47.71	MOL1 C
ATOM	1581	CB	PRO A 204	69.883	-54.423	-78.143	1.00	36.27	MOL1 C
ATOM	1582	CG	PRO A 204	70.362	-55.096	-79.363	1.00	46.52	MOL1 C
ATOM	1583	C	PRO A 204	68.969	-52.275	-79.131	1.00	44.75	MOL1 C
ATOM	1584	O	PRO A 204	69.432	-52.078	-80.254	1.00	51.85	MOL1 O
ATOM	1585	N	ILE A 205	68.689	-51.289	-78.286	1.00	37.07	MOL1 N
ATOM	1586	CA	ILE A 205	68.956	-49.906	-78.636	1.00	35.88	MOL1 C
ATOM	1587	CB	ILE A 205	68.136	-48.913	-77.778	1.00	28.59	MOL1 C
ATOM	1588	CG2	ILE A 205	68.284	-47.508	-78.298	1.00	13.39	MOL1 C
ATOM	1589	CG1	ILE A 205	66.658	-49.256	-77.849	1.00	31.89	MOL1 C
ATOM	1590	CD1	ILE A 205	65.760	-48.190	-77.275	1.00	39.23	MOL1 C
ATOM	1591	C	ILE A 205	70.420	-49.701	-78.337	1.00	39.64	MOL1 C
ATOM	1592	O	ILE A 205	70.864	-49.964	-77.230	1.00	44.95	MOL1 O
ATOM	1593	N	VAL A 206	71.179	-49.245	-79.323	1.00	43.84	MOL1 N
ATOM	1594	CA	VAL A 206	72.603	-49.033	-79.113	1.00	46.15	MOL1 C
ATOM	1595	CB	VAL A 206	73.460	-49.918	-80.009	1.00	40.18	MOL1 C
ATOM	1596	CG1	VAL A 206	72.920	-51.328	-80.020	1.00	42.45	MOL1 C
ATOM	1597	CG2	VAL A 206	73.492	-49.351	-81.399	1.00	46.95	MOL1 C
ATOM	1598	C	VAL A 206	73.016	-47.621	-79.397	1.00	49.94	MOL1 C
ATOM	1599	O	VAL A 206	72.652	-47.049	-80.418	1.00	61.62	MOL1 O
ATOM	1600	N	LYS A 207	73.784	-47.059	-78.483	1.00	50.86	MOL1 N
ATOM	1601	CA	LYS A 207	74.274	-45.707	-78.639	1.00	58.81	MOL1 C
ATOM	1602	CB	LYS A 207	73.559	-44.765	-77.671	1.00	58.42	MOL1 C
ATOM	1603	CG	LYS A 207	72.054	-44.611	-77.924	1.00	64.34	MOL1 C
ATOM	1604	CD	LYS A 207	71.751	-44.216	-79.377	1.00	73.63	MOL1 C
ATOM	1605	CE	LYS A 207	70.355	-43.607	-79.559	1.00	74.77	MOL1 C
ATOM	1606	NZ	LYS A 207	70.253	-42.210	-79.017	1.00	80.67	MOL1 N
ATOM	1607	C	LYS A 207	75.760	-45.757	-78.342	1.00	62.66	MOL1 C
ATOM	1608	O	LYS A 207	76.181	-46.435	-77.409	1.00	66.08	MOL1 O
ATOM	1609	N	SER A 208	76.559	-45.064	-79.144	1.00	64.15	MOL1 N
ATOM	1610	CA	SER A 208	77.996	-45.070	-78.937	1.00	63.92	MOL1 C
ATOM	1611	CB	SER A 208	78.621	-46.249	-79.658	1.00	62.29	MOL1 C
ATOM	1612	OG	SER A 208	78.496	-46.087	-81.051	1.00	69.40	MOL1 O
ATOM	1613	C	SER A 208	78.660	-43.803	-79.414	1.00	66.06	MOL1 C
ATOM	1614	O	SER A 208	78.001	-42.892	-79.908	1.00	72.59	MOL1 O
ATOM	1615	N	PHE A 209	79.978	-43.762	-79.272	1.00	66.19	MOL1 N
ATOM	1616	CA	PHE A 209	80.750	-42.605	-79.676	1.00	71.93	MOL1 C
ATOM	1617	CB	PHE A 209	80.563	-41.508	-78.655	1.00	68.73	MOL1 C
ATOM	1618	CG	PHE A 209	81.399	-41.692	-77.441	1.00	62.75	MOL1 C
ATOM	1619	CD1	PHE A 209	82.611	-41.041	-77.318	1.00	64.63	MOL1 C
ATOM	1620	CD2	PHE A 209	81.001	-42.548	-76.443	1.00	64.44	MOL1 C
ATOM	1621	CE1	PHE A 209	83.411	-41.245	-76.220	1.00	68.44	MOL1 C
ATOM	1622	CE2	PHE A 209	81.797	-42.759	-75.339	1.00	71.39	MOL1 C
ATOM	1623	CZ	PHE A 209	83.006	-42.107	-75.227	1.00	71.78	MOL1 C
ATOM	1624	C	PHE A 209	82.222	-42.972	-79.725	1.00	75.88	MOL1 C
ATOM	1625	O	PHE A 209	82.674	-43.788	-78.937	1.00	79.10	MOL1 O
ATOM	1626	N	ASN A 210	82.970	-42.364	-80.639	1.00	80.19	MOL1 N
ATOM	1627	CA	ASN A 210	84.397	-42.637	-80.739	1.00	83.35	MOL1 C
ATOM	1628	CB	ASN A 210	84.787	-42.975	-82.168	1.00	74.44	MOL1 C
ATOM	1629	CG	ASN A 210	83.996	-44.117	-82.729	1.00	72.99	MOL1 C
ATOM	1630	OD1	ASN A 210	84.357	-44.680	-83.759	1.00	75.22	MOL1 O
ATOM	1631	ND2	ASN A 210	82.905	-44.467	-82.067	1.00	72.31	MOL1 N
ATOM	1632	C	ASN A 210	85.172	-41.411	-80.299	1.00	92.82	MOL1 C
ATOM	1633	O	ASN A 210	84.599	-40.327	-80.169	1.00	99.32	MOL1 O
ATOM	1634	N	ARG A 211	86.473	-41.571	-80.073	1.00	99.04	MOL1 N
ATOM	1635	CA	ARG A 211	87.287	-40.439	-79.659	1.00	107.02	MOL1 C
ATOM	1636	CB	ARG A 211	88.451	-40.903	-78.791	1.00	93.10	MOL1 C
ATOM	1637	CG	ARG A 211	88.073	-41.235	-77.356	1.00	79.51	MOL1 C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1638	CD	ARG	A	211	89.295	-41.722	-76.571	1.00	73.79	MOL1	C
ATOM	1639	NE	ARG	A	211	90.006	-42.738	-77.341	1.00	71.41	MOL1	N
ATOM	1640	CZ	ARG	A	211	91.270	-42.640	-77.738	1.00	70.17	MOL1	C
ATOM	1641	NH1	ARG	A	211	91.982	-41.569	-77.420	1.00	71.92	MOL1	N
ATOM	1642	NH2	ARG	A	211	91.805	-43.587	-78.506	1.00	68.06	MOL1	N
ATOM	1643	C	ARG	A	211	87.804	-39.593	-80.827	1.00	121.27	MOL1	C
ATOM	1644	O	ARG	A	211	88.444	-40.099	-81.766	1.00	119.32	MOL1	O
ATOM	1645	N	ASN	A	212	87.487	-38.298	-80.752	1.00	135.01	MOL1	N
ATOM	1646	CA	ASN	A	212	87.890	-37.305	-81.745	1.00	145.02	MOL1	C
ATOM	1647	CB	ASN	A	212	86.663	-36.718	-82.458	1.00	137.80	MOL1	C
ATOM	1648	CG	ASN	A	212	85.950	-37.738	-83.333	1.00	132.35	MOL1	C
ATOM	1649	OD1	ASN	A	212	86.566	-38.393	-84.177	1.00	126.73	MOL1	O
ATOM	1650	ND2	ASN	A	212	84.643	-37.870	-83.140	1.00	128.12	MOL1	N
ATOM	1651	C	ASN	A	212	88.694	-36.198	-81.045	1.00	154.72	MOL1	C
ATOM	1652	O	ASN	A	212	89.535	-35.545	-81.668	1.00	157.30	MOL1	O
ATOM	1653	N	GLU	A	213	88.428	-36.001	-79.750	1.00	162.53	MOL1	N
ATOM	1654	CA	GLU	A	213	89.138	-35.014	-78.920	1.00	168.79	MOL1	C
ATOM	1655	CB	GLU	A	213	90.625	-35.395	-78.813	1.00	169.60	MOL1	C
ATOM	1656	CG	GLU	A	213	90.907	-36.740	-78.141	1.00	170.51	MOL1	C
ATOM	1657	CD	GLU	A	213	92.383	-37.131	-78.192	1.00	169.55	MOL1	C
ATOM	1658	OE1	GLU	A	213	92.749	-38.162	-77.588	1.00	168.02	MOL1	O
ATOM	1659	OE2	GLU	A	213	93.175	-36.411	-78.838	1.00	169.37	MOL1	O
ATOM	1660	C	GLU	A	213	89.049	-33.548	-79.357	1.00	172.64	MOL1	C
ATOM	1661	O	GLU	A	213	89.783	-33.115	-80.248	1.00	173.63	MOL1	O
ATOM	1662	N	CYS	A	214	88.171	-32.784	-78.709	1.00	176.10	MOL1	N
ATOM	1663	CA	CYS	A	214	87.997	-31.359	-79.010	1.00	179.13	MOL1	C
ATOM	1664	CB	CYS	A	214	87.418	-31.162	-80.423	1.00	179.49	MOL1	C
ATOM	1665	SG	CYS	A	214	88.420	-30.127	-81.553	1.00	180.10	MOL1	S
ATOM	1666	C	CYS	A	214	87.067	-30.702	-77.984	1.00	180.20	MOL1	C
ATOM	1667	O	CYS	A	214	86.648	-31.400	-77.034	1.00	181.04	MOL1	O
ATOM	1668	OXT	CYS	A	214	86.764	-29.497	-78.143	1.00	180.10	MOL1	O
ATOM	1669	CB	GLU	B	1	46.708	-39.422	-29.729	1.00	92.80	MOL1	C
ATOM	1670	CG	GLU	B	1	45.511	-38.548	-30.169	1.00	106.71	MOL1	C
ATOM	1671	CD	GLU	B	1	45.054	-37.536	-29.111	1.00	113.96	MOL1	C
ATOM	1672	OE1	GLU	B	1	44.367	-36.557	-29.487	1.00	113.19	MOL1	O
ATOM	1673	OE2	GLU	B	1	45.363	-37.722	-27.908	1.00	118.07	MOL1	O
ATOM	1674	C	GLU	B	1	49.136	-39.618	-29.188	1.00	76.62	MOL1	C
ATOM	1675	O	GLU	B	1	49.286	-39.476	-27.979	1.00	79.69	MOL1	O
ATOM	1676	N	GLU	B	1	48.419	-38.707	-31.390	1.00	83.29	MOL1	N
ATOM	1677	CA	GLU	B	1	48.098	-38.794	-29.937	1.00	81.61	MOL1	C
ATOM	1678	N	VAL	B	2	49.865	-40.468	-29.900	1.00	68.35	MOL1	N
ATOM	1679	CA	VAL	B	2	50.857	-41.313	-29.248	1.00	63.27	MOL1	C
ATOM	1680	CB	VAL	B	2	50.550	-42.780	-29.493	1.00	59.59	MOL1	C
ATOM	1681	CG1	VAL	B	2	51.267	-43.634	-28.481	1.00	51.24	MOL1	C
ATOM	1682	CG2	VAL	B	2	49.052	-42.995	-29.492	1.00	63.72	MOL1	C
ATOM	1683	C	VAL	B	2	52.262	-41.077	-29.757	1.00	67.70	MOL1	C
ATOM	1684	O	VAL	B	2	52.880	-41.996	-30.286	1.00	77.73	MOL1	O
ATOM	1685	N	GLN	B	3	52.781	-39.870	-29.584	1.00	66.29	MOL1	N
ATOM	1686	CA	GLN	B	3	54.125	-39.534	-30.060	1.00	62.99	MOL1	C
ATOM	1687	CB	GLN	B	3	54.452	-38.077	-29.719	1.00	73.78	MOL1	C
ATOM	1688	CG	GLN	B	3	53.589	-37.034	-30.427	1.00	91.77	MOL1	C
ATOM	1689	CD	GLN	B	3	53.525	-37.241	-31.934	1.00	101.46	MOL1	C
ATOM	1690	OE1	GLN	B	3	52.813	-38.126	-32.421	1.00	106.00	MOL1	O
ATOM	1691	NE2	GLN	B	3	54.281	-36.429	-32.682	1.00	105.77	MOL1	N
ATOM	1692	C	GLN	B	3	55.300	-40.401	-29.583	1.00	55.69	MOL1	C
ATOM	1693	O	GLN	B	3	55.367	-40.827	-28.438	1.00	46.69	MOL1	O
ATOM	1694	N	LEU	B	4	56.226	-40.651	-30.500	1.00	54.86	MOL1	N
ATOM	1695	CA	LEU	B	4	57.460	-41.395	-30.236	1.00	51.40	MOL1	C
ATOM	1696	CB	LEU	B	4	57.385	-42.836	-30.704	1.00	50.04	MOL1	C
ATOM	1697	CG	LEU	B	4	56.609	-43.772	-29.813	1.00	53.16	MOL1	C
ATOM	1698	CD1	LEU	B	4	56.653	-45.200	-30.362	1.00	54.68	MOL1	C
ATOM	1699	CD2	LEU	B	4	57.235	-43.682	-28.448	1.00	57.66	MOL1	C
ATOM	1700	C	LEU	B	4	58.491	-40.688	-31.090	1.00	52.50	MOL1	C
ATOM	1701	O	LEU	B	4	58.267	-40.482	-32.290	1.00	55.22	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	1702	N	VAL	B	5	59.603	-40.279	-30.491	1.00	51.49	MOL1	N
ATOM	1703	CA	VAL	B	5	60.636	-39.598	-31.267	1.00	48.73	MOL1	C
ATOM	1704	CB	VAL	B	5	60.564	-38.054	-31.130	1.00	38.29	MOL1	C
ATOM	1705	CG1	VAL	B	5	59.153	-37.620	-30.886	1.00	20.66	MOL1	C
ATOM	1706	CG2	VAL	B	5	61.470	-37.580	-30.024	1.00	46.70	MOL1	C
ATOM	1707	C	VAL	B	5	62.033	-40.067	-30.891	1.00	51.85	MOL1	C
ATOM	1708	O	VAL	B	5	62.441	-40.045	-29.724	1.00	53.70	MOL1	O
ATOM	1709	N	GLU	B	6	62.759	-40.517	-31.904	1.00	54.55	MOL1	N
ATOM	1710	CA	GLU	B	6	64.109	-41.004	-31.698	1.00	59.68	MOL1	C
ATOM	1711	CB	GLU	B	6	64.419	-42.179	-32.638	1.00	58.72	MOL1	C
ATOM	1712	CG	GLU	B	6	63.520	-43.391	-32.442	1.00	63.40	MOL1	C
ATOM	1713	CD	GLU	B	6	62.481	-43.540	-33.538	1.00	68.99	MOL1	C
ATOM	1714	OE1	GLU	B	6	61.896	-42.521	-33.965	1.00	68.13	MOL1	O
ATOM	1715	OE2	GLU	B	6	62.239	-44.684	-33.969	1.00	72.32	MOL1	O
ATOM	1716	C	GLU	B	6	65.102	-39.877	-31.926	1.00	62.51	MOL1	C
ATOM	1717	O	GLU	B	6	64.779	-38.840	-32.519	1.00	62.23	MOL1	O
ATOM	1718	N	SER	B	7	66.317	-40.092	-31.444	1.00	65.47	MOL1	N
ATOM	1719	CA	SER	B	7	67.363	-39.105	-31.564	1.00	67.74	MOL1	C
ATOM	1720	CB	SER	B	7	67.110	-37.975	-30.580	1.00	71.57	MOL1	C
ATOM	1721	OG	SER	B	7	68.305	-37.256	-30.342	1.00	85.77	MOL1	O
ATOM	1722	C	SER	B	7	68.714	-39.718	-31.272	1.00	69.29	MOL1	C
ATOM	1723	O	SER	B	7	68.814	-40.789	-30.668	1.00	66.88	MOL1	O
ATOM	1724	N	GLY	B	8	69.757	-39.021	-31.700	1.00	73.83	MOL1	N
ATOM	1725	CA	GLY	B	8	71.101	-39.503	-31.462	1.00	79.51	MOL1	C
ATOM	1726	C	GLY	B	8	71.689	-40.148	-32.690	1.00	81.37	MOL1	C
ATOM	1727	O	GLY	B	8	72.599	-40.967	-32.594	1.00	80.82	MOL1	O
ATOM	1728	N	GLY	B	9	71.167	-39.775	-33.851	1.00	84.19	MOL1	N
ATOM	1729	CA	GLY	B	9	71.665	-40.342	-35.087	1.00	85.32	MOL1	C
ATOM	1730	C	GLY	B	9	72.935	-39.674	-35.563	1.00	84.49	MOL1	C
ATOM	1731	O	GLY	B	9	73.254	-38.563	-35.144	1.00	83.86	MOL1	O
ATOM	1732	N	GLY	B	10	73.657	-40.358	-36.444	1.00	88.01	MOL1	N
ATOM	1733	CA	GLY	B	10	74.897	-39.823	-36.982	1.00	91.06	MOL1	C
ATOM	1734	C	GLY	B	10	75.817	-40.917	-37.498	1.00	90.60	MOL1	C
ATOM	1735	O	GLY	B	10	75.444	-42.097	-37.503	1.00	89.39	MOL1	O
ATOM	1736	N	LEU	B	11	77.016	-40.535	-37.940	1.00	87.59	MOL1	N
ATOM	1737	CA	LEU	B	11	77.980	-41.515	-38.445	1.00	84.85	MOL1	C
ATOM	1738	CB	LEU	B	11	78.654	-41.035	-39.732	1.00	83.78	MOL1	C
ATOM	1739	CG	LEU	B	11	79.532	-39.793	-39.639	1.00	92.04	MOL1	C
ATOM	1740	CD1	LEU	B	11	80.000	-39.404	-41.038	1.00	89.62	MOL1	C
ATOM	1741	CD2	LEU	B	11	78.752	-38.648	-38.988	1.00	98.71	MOL1	C
ATOM	1742	C	LEU	B	11	79.026	-41.762	-37.387	1.00	80.95	MOL1	C
ATOM	1743	O	LEU	B	11	79.219	-40.940	-36.493	1.00	80.32	MOL1	O
ATOM	1744	N	VAL	B	12	79.706	-42.894	-37.485	1.00	77.34	MOL1	N
ATOM	1745	CA	VAL	B	12	80.713	-43.226	-36.499	1.00	79.50	MOL1	C
ATOM	1746	CB	VAL	B	12	80.055	-43.626	-35.169	1.00	78.17	MOL1	C
ATOM	1747	CG1	VAL	B	12	79.010	-44.677	-35.412	1.00	76.02	MOL1	C
ATOM	1748	CG2	VAL	B	12	81.099	-44.151	-34.203	1.00	82.85	MOL1	C
ATOM	1749	C	VAL	B	12	81.602	-44.362	-36.964	1.00	81.68	MOL1	C
ATOM	1750	O	VAL	B	12	81.129	-45.441	-37.276	1.00	85.47	MOL1	O
ATOM	1751	N	GLN	B	13	82.902	-44.103	-37.004	1.00	87.73	MOL1	N
ATOM	1752	CA	GLN	B	13	83.887	-45.087	-37.429	1.00	87.70	MOL1	C
ATOM	1753	CB	GLN	B	13	85.299	-44.564	-37.106	1.00	93.25	MOL1	C
ATOM	1754	CG	GLN	B	13	85.612	-44.330	-35.600	1.00	105.01	MOL1	C
ATOM	1755	CD	GLN	B	13	84.752	-43.241	-34.923	1.00	108.62	MOL1	C
ATOM	1756	OE1	GLN	B	13	84.530	-42.161	-35.487	1.00	110.17	MOL1	O
ATOM	1757	NE2	GLN	B	13	84.289	-43.521	-33.698	1.00	100.71	MOL1	N
ATOM	1758	C	GLN	B	13	83.650	-46.441	-36.767	1.00	81.85	MOL1	C
ATOM	1759	O	GLN	B	13	83.176	-46.522	-35.644	1.00	83.04	MOL1	O
ATOM	1760	N	PRO	B	14	83.955	-47.527	-37.473	1.00	78.83	MOL1	N
ATOM	1761	CD	PRO	B	14	84.450	-47.575	-38.857	1.00	80.79	MOL1	C
ATOM	1762	CA	PRO	B	14	83.772	-48.872	-36.929	1.00	81.36	MOL1	C
ATOM	1763	CB	PRO	B	14	84.589	-49.731	-37.878	1.00	80.68	MOL1	C
ATOM	1764	CG	PRO	B	14	84.344	-49.058	-39.191	1.00	84.61	MOL1	C
ATOM	1765	C	PRO	B	14	84.300	-48.942	-35.511	1.00	84.32	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1766	O	PRO	B	14	85.114	-48.116	-35.112	1.00	85.63	MOL1	O
ATOM	1767	N	GLY	B	15	83.842	-49.927	-34.750	1.00	89.73	MOL1	N
ATOM	1768	CA	GLY	B	15	84.300	-50.066	-33.380	1.00	93.56	MOL1	C
ATOM	1769	C	GLY	B	15	83.741	-49.008	-32.448	1.00	93.53	MOL1	C
ATOM	1770	O	GLY	B	15	83.483	-49.287	-31.279	1.00	96.75	MOL1	O
ATOM	1771	N	GLY	B	16	83.553	-47.796	-32.963	1.00	93.40	MOL1	N
ATOM	1772	CA	GLY	B	16	83.020	-46.708	-32.156	1.00	93.36	MOL1	C
ATOM	1773	C	GLY	B	16	81.716	-47.030	-31.443	1.00	92.55	MOL1	C
ATOM	1774	O	GLY	B	16	81.203	-48.151	-31.535	1.00	92.88	MOL1	O
ATOM	1775	N	SER	B	17	81.174	-46.054	-30.722	1.00	90.20	MOL1	N
ATOM	1776	CA	SER	B	17	79.921	-46.275	-30.010	1.00	91.53	MOL1	C
ATOM	1777	CB	SER	B	17	80.192	-46.638	-28.553	1.00	90.56	MOL1	C
ATOM	1778	OG	SER	B	17	80.673	-47.965	-28.461	1.00	97.19	MOL1	O
ATOM	1779	C	SER	B	17	78.934	-45.114	-30.066	1.00	91.20	MOL1	C
ATOM	1780	O	SER	B	17	79.320	-43.948	-30.217	1.00	90.40	MOL1	O
ATOM	1781	N	LEU	B	18	77.650	-45.455	-29.957	1.00	87.85	MOL1	N
ATOM	1782	CA	LEU	B	18	76.585	-44.466	-29.973	1.00	81.60	MOL1	C
ATOM	1783	CB	LEU	B	18	76.053	-44.262	-31.388	1.00	80.12	MOL1	C
ATOM	1784	CG	LEU	B	18	76.209	-42.801	-31.815	1.00	81.32	MOL1	C
ATOM	1785	CD1	LEU	B	18	75.633	-42.590	-33.202	1.00	76.33	MOL1	C
ATOM	1786	CD2	LEU	B	18	75.517	-41.904	-30.788	1.00	85.69	MOL1	C
ATOM	1787	C	LEU	B	18	75.449	-44.875	-29.051	1.00	80.39	MOL1	C
ATOM	1788	O	LEU	B	18	75.233	-46.064	-28.795	1.00	77.79	MOL1	O
ATOM	1789	N	ARG	B	19	74.740	-43.870	-28.541	1.00	80.56	MOL1	N
ATOM	1790	CA	ARG	B	19	73.605	-44.078	-27.641	1.00	80.87	MOL1	C
ATOM	1791	CB	ARG	B	19	73.897	-43.494	-26.254	1.00	85.72	MOL1	C
ATOM	1792	CG	ARG	B	19	72.751	-43.590	-25.237	1.00	82.86	MOL1	C
ATOM	1793	CD	ARG	B	19	72.952	-42.531	-24.160	1.00	87.91	MOL1	C
ATOM	1794	NE	ARG	B	19	72.042	-42.612	-23.015	1.00	91.00	MOL1	N
ATOM	1795	CZ	ARG	B	19	71.945	-43.653	-22.189	1.00	94.13	MOL1	C
ATOM	1796	NH1	ARG	B	19	72.693	-44.741	-22.376	1.00	84.28	MOL1	N
ATOM	1797	NH2	ARG	B	19	71.128	-43.583	-21.140	1.00	93.49	MOL1	N
ATOM	1798	C	ARG	B	19	72.382	-43.379	-28.224	1.00	79.41	MOL1	C
ATOM	1799	O	ARG	B	19	72.371	-42.153	-28.396	1.00	79.85	MOL1	O
ATOM	1800	N	LEU	B	20	71.354	-44.168	-28.525	1.00	75.09	MOL1	N
ATOM	1801	CA	LEU	B	20	70.123	-43.640	-29.088	1.00	66.85	MOL1	C
ATOM	1802	CB	LEU	B	20	69.645	-44.530	-30.219	1.00	65.49	MOL1	C
ATOM	1803	CG	LEU	B	20	70.528	-44.532	-31.456	1.00	62.82	MOL1	C
ATOM	1804	CD1	LEU	B	20	70.296	-45.817	-32.218	1.00	57.88	MOL1	C
ATOM	1805	CD2	LEU	B	20	70.231	-43.293	-32.299	1.00	58.37	MOL1	C
ATOM	1806	C	LEU	B	20	69.042	-43.537	-28.035	1.00	67.03	MOL1	C
ATOM	1807	O	LEU	B	20	68.948	-44.373	-27.120	1.00	61.60	MOL1	O
ATOM	1808	N	SER	B	21	68.220	-42.502	-28.177	1.00	66.77	MOL1	N
ATOM	1809	CA	SER	B	21	67.125	-42.249	-27.246	1.00	66.59	MOL1	C
ATOM	1810	CB	SER	B	21	67.440	-41.017	-26.394	1.00	72.40	MOL1	C
ATOM	1811	OG	SER	B	21	68.373	-40.165	-27.051	1.00	86.54	MOL1	O
ATOM	1812	C	SER	B	21	65.795	-42.063	-27.962	1.00	59.32	MOL1	C
ATOM	1813	O	SER	B	21	65.743	-41.647	-29.112	1.00	55.95	MOL1	O
ATOM	1814	N	CYS	B	22	64.719	-42.397	-27.269	1.00	59.26	MOL1	N
ATOM	1815	CA	CYS	B	22	63.376	-42.272	-27.823	1.00	63.35	MOL1	C
ATOM	1816	C	CYS	B	22	62.480	-41.702	-26.749	1.00	58.51	MOL1	C
ATOM	1817	O	CYS	B	22	62.360	-42.256	-25.661	1.00	55.11	MOL1	O
ATOM	1818	CB	CYS	B	22	62.822	-43.632	-28.267	1.00	70.91	MOL1	C
ATOM	1819	SG	CYS	B	22	61.092	-43.638	-28.868	1.00	69.75	MOL1	S
ATOM	1820	N	ALA	B	23	61.858	-40.581	-27.064	1.00	55.49	MOL1	N
ATOM	1821	CA	ALA	B	23	60.983	-39.923	-26.125	1.00	57.79	MOL1	C
ATOM	1822	CB	ALA	B	23	61.141	-38.430	-26.256	1.00	54.12	MOL1	C
ATOM	1823	C	ALA	B	23	59.559	-40.327	-26.438	1.00	62.28	MOL1	C
ATOM	1824	O	ALA	B	23	59.071	-40.043	-27.528	1.00	72.96	MOL1	O
ATOM	1825	N	ALA	B	24	58.892	-40.984	-25.491	1.00	59.76	MOL1	N
ATOM	1826	CA	ALA	B	24	57.515	-41.429	-25.692	1.00	55.65	MOL1	C
ATOM	1827	CB	ALA	B	24	57.333	-42.827	-25.111	1.00	55.99	MOL1	C
ATOM	1828	C	ALA	B	24	56.508	-40.474	-25.068	1.00	50.19	MOL1	C
ATOM	1829	O	ALA	B	24	56.841	-39.698	-24.178	1.00	52.13	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	1830	N	SER	B	25	55.271	-40.545	-25.529	1.00	45.27	MOL1	N
ATOM	1831	CA	SER	B	25	54.232	-39.683	-25.010	1.00	48.65	MOL1	C
ATOM	1832	CB	SER	B	25	54.467	-38.251	-25.461	1.00	48.57	MOL1	C
ATOM	1833	OG	SER	B	25	53.339	-37.781	-26.179	1.00	54.52	MOL1	O
ATOM	1834	C	SER	B	25	52.892	-40.144	-25.535	1.00	53.00	MOL1	C
ATOM	1835	O	SER	B	25	52.822	-40.851	-26.536	1.00	61.24	MOL1	O
ATOM	1836	N	GLY	B	26	51.822	-39.726	-24.872	1.00	54.62	MOL1	N
ATOM	1837	CA	GLY	B	26	50.494	-40.121	-25.308	1.00	54.72	MOL1	C
ATOM	1838	C	GLY	B	26	50.050	-41.474	-24.772	1.00	45.42	MOL1	C
ATOM	1839	O	GLY	B	26	49.043	-42.030	-25.212	1.00	42.66	MOL1	O
ATOM	1840	N	PHE	B	27	50.803	-42.018	-23.833	1.00	36.73	MOL1	N
ATOM	1841	CA	PHE	B	27	50.425	-43.293	-23.273	1.00	45.67	MOL1	C
ATOM	1842	CB	PHE	B	27	50.534	-44.373	-24.333	1.00	39.88	MOL1	C
ATOM	1843	CG	PHE	B	27	51.939	-44.750	-24.695	1.00	46.62	MOL1	C
ATOM	1844	CD1	PHE	B	27	52.425	-46.022	-24.404	1.00	49.24	MOL1	C
ATOM	1845	CD2	PHE	B	27	52.750	-43.875	-25.393	1.00	49.02	MOL1	C
ATOM	1846	CE1	PHE	B	27	53.688	-46.417	-24.813	1.00	49.13	MOL1	C
ATOM	1847	CE2	PHE	B	27	54.016	-44.266	-25.803	1.00	53.94	MOL1	C
ATOM	1848	CZ	PHE	B	27	54.483	-45.542	-25.514	1.00	52.90	MOL1	C
ATOM	1849	C	PHE	B	27	51.206	-43.700	-22.027	1.00	52.80	MOL1	C
ATOM	1850	O	PHE	B	27	52.308	-43.208	-21.763	1.00	56.14	MOL1	O
ATOM	1851	N	THR	B	28	50.627	-44.597	-21.244	1.00	54.92	MOL1	N
ATOM	1852	CA	THR	B	28	51.291	-45.037	-20.032	1.00	59.91	MOL1	C
ATOM	1853	CB	THR	B	28	50.313	-45.847	-19.157	1.00	65.78	MOL1	C
ATOM	1854	OG1	THR	B	28	49.272	-44.972	-18.697	1.00	66.99	MOL1	O
ATOM	1855	CG2	THR	B	28	51.030	-46.477	-17.962	1.00	65.79	MOL1	C
ATOM	1856	C	THR	B	28	52.523	-45.861	-20.388	1.00	57.46	MOL1	C
ATOM	1857	O	THR	B	28	52.479	-47.091	-20.426	1.00	54.80	MOL1	O
ATOM	1858	N	PHE	B	29	53.618	-45.153	-20.654	1.00	57.06	MOL1	N
ATOM	1859	CA	PHE	B	29	54.895	-45.759	-21.036	1.00	60.02	MOL1	C
ATOM	1860	CB	PHE	B	29	55.985	-44.676	-21.068	1.00	55.85	MOL1	C
ATOM	1861	CG	PHE	B	29	57.351	-45.190	-21.448	1.00	57.00	MOL1	C
ATOM	1862	CD1	PHE	B	29	57.749	-45.231	-22.772	1.00	55.30	MOL1	C
ATOM	1863	CD2	PHE	B	29	58.224	-45.676	-20.477	1.00	59.98	MOL1	C
ATOM	1864	CE1	PHE	B	29	58.988	-45.749	-23.121	1.00	51.86	MOL1	C
ATOM	1865	CE2	PHE	B	29	59.465	-46.197	-20.822	1.00	50.05	MOL1	C
ATOM	1866	CZ	PHE	B	29	59.843	-46.233	-22.145	1.00	50.50	MOL1	C
ATOM	1867	C	PHE	B	29	55.321	-46.885	-20.090	1.00	63.14	MOL1	C
ATOM	1868	O	PHE	B	29	55.647	-48.003	-20.518	1.00	57.84	MOL1	O
ATOM	1869	N	SER	B	30	55.318	-46.569	-18.800	1.00	68.76	MOL1	N
ATOM	1870	CA	SER	B	30	55.712	-47.506	-17.747	1.00	73.60	MOL1	C
ATOM	1871	CB	SER	B	30	55.622	-46.801	-16.378	1.00	80.60	MOL1	C
ATOM	1872	OG	SER	B	30	54.426	-46.032	-16.248	1.00	84.81	MOL1	O
ATOM	1873	C	SER	B	30	54.877	-48.782	-17.722	1.00	70.64	MOL1	C
ATOM	1874	O	SER	B	30	55.096	-49.662	-16.898	1.00	69.54	MOL1	O
ATOM	1875	N	ASP	B	31	53.937	-48.881	-18.650	1.00	71.65	MOL1	N
ATOM	1876	CA	ASP	B	31	53.034	-50.013	-18.714	1.00	70.16	MOL1	C
ATOM	1877	CB	ASP	B	31	51.620	-49.500	-18.948	1.00	77.49	MOL1	C
ATOM	1878	CG	ASP	B	31	50.622	-50.126	-18.027	1.00	88.93	MOL1	C
ATOM	1879	OD1	ASP	B	31	50.532	-51.374	-18.020	1.00	95.83	MOL1	O
ATOM	1880	OD2	ASP	B	31	49.929	-49.367	-17.310	1.00	96.84	MOL1	O
ATOM	1881	C	ASP	B	31	53.346	-51.035	-19.784	1.00	65.89	MOL1	C
ATOM	1882	O	ASP	B	31	53.055	-52.207	-19.615	1.00	67.11	MOL1	O
ATOM	1883	N	TYR	B	32	53.927	-50.599	-20.891	1.00	64.43	MOL1	N
ATOM	1884	CA	TYR	B	32	54.207	-51.522	-21.985	1.00	61.62	MOL1	C
ATOM	1885	CB	TYR	B	32	53.581	-50.999	-23.266	1.00	55.41	MOL1	C
ATOM	1886	CG	TYR	B	32	52.108	-50.796	-23.165	1.00	51.34	MOL1	C
ATOM	1887	CD1	TYR	B	32	51.230	-51.709	-23.716	1.00	49.66	MOL1	C
ATOM	1888	CE1	TYR	B	32	49.878	-51.536	-23.616	1.00	53.52	MOL1	C
ATOM	1889	CD2	TYR	B	32	51.592	-49.700	-22.506	1.00	51.65	MOL1	C
ATOM	1890	CE2	TYR	B	32	50.240	-49.522	-22.392	1.00	58.62	MOL1	C
ATOM	1891	CZ	TYR	B	32	49.384	-50.444	-22.946	1.00	58.75	MOL1	C
ATOM	1892	OH	TYR	B	32	48.026	-50.297	-22.785	1.00	70.25	MOL1	O
ATOM	1893	C	TYR	B	32	55.665	-51.785	-22.266	1.00	61.33	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	1894	O	TYR	B	32	56.533	-51.008	-21.877	1.00	64.82	MOL1	O
ATOM	1895	N	ASN	B	33	55.928	-52.888	-22.959	1.00	60.89	MOL1	N
ATOM	1896	CA	ASN	B	33	57.295	-53.215	-23.353	1.00	63.30	MOL1	C
ATOM	1897	CB	ASN	B	33	57.429	-54.661	-23.868	1.00	64.44	MOL1	C
ATOM	1898	CG	ASN	B	33	56.811	-55.686	-22.944	1.00	69.90	MOL1	C
ATOM	1899	OD1	ASN	B	33	56.929	-55.594	-21.722	1.00	71.26	MOL1	O
ATOM	1900	ND2	ASN	B	33	56.159	-56.692	-23.534	1.00	73.88	MOL1	N
ATOM	1901	C	ASN	B	33	57.651	-52.276	-24.519	1.00	62.16	MOL1	C
ATOM	1902	O	ASN	B	33	56.778	-51.737	-25.189	1.00	64.71	MOL1	O
ATOM	1903	N	MET	B	34	58.934	-52.086	-24.771	1.00	58.74	MOL1	N
ATOM	1904	CA	MET	B	34	59.350	-51.240	-25.869	1.00	50.90	MOL1	C
ATOM	1905	CB	MET	B	34	59.902	-49.937	-25.328	1.00	48.83	MOL1	C
ATOM	1906	CG	MET	B	34	58.863	-49.094	-24.625	1.00	47.15	MOL1	C
ATOM	1907	SD	MET	B	34	57.512	-48.641	-25.725	1.00	50.43	MOL1	S
ATOM	1908	CE	MET	B	34	58.261	-47.327	-26.794	1.00	43.83	MOL1	C
ATOM	1909	C	MET	B	34	60.414	-51.986	-26.658	1.00	52.46	MOL1	C
ATOM	1910	O	MET	B	34	61.012	-52.937	-26.158	1.00	53.36	MOL1	O
ATOM	1911	N	ALA	B	35	60.650	-51.578	-27.897	1.00	50.28	MOL1	N
ATOM	1912	CA	ALA	B	35	61.648	-52.266	-28.700	1.00	45.02	MOL1	C
ATOM	1913	CB	ALA	B	35	61.050	-53.515	-29.331	1.00	29.39	MOL1	C
ATOM	1914	C	ALA	B	35	62.235	-51.394	-29.775	1.00	48.08	MOL1	C
ATOM	1915	O	ALA	B	35	61.740	-50.296	-30.056	1.00	49.70	MOL1	O
ATOM	1916	N	TRP	B	36	63.330	-51.881	-30.351	1.00	51.88	MOL1	N
ATOM	1917	CA	TRP	B	36	63.975	-51.177	-31.443	1.00	51.95	MOL1	C
ATOM	1918	CB	TRP	B	36	65.420	-50.809	-31.130	1.00	45.10	MOL1	C
ATOM	1919	CG	TRP	B	36	65.565	-49.798	-30.057	1.00	43.87	MOL1	C
ATOM	1920	CD2	TRP	B	36	65.596	-48.378	-30.210	1.00	40.77	MOL1	C
ATOM	1921	CE2	TRP	B	36	65.788	-47.822	-28.923	1.00	45.65	MOL1	C
ATOM	1922	CE3	TRP	B	36	65.484	-47.521	-31.303	1.00	42.67	MOL1	C
ATOM	1923	CD1	TRP	B	36	65.730	-50.043	-28.729	1.00	54.15	MOL1	C
ATOM	1924	NE1	TRP	B	36	65.868	-48.861	-28.037	1.00	52.53	MOL1	N
ATOM	1925	CZ2	TRP	B	36	65.870	-46.449	-28.701	1.00	38.30	MOL1	C
ATOM	1926	CZ3	TRP	B	36	65.568	-46.151	-31.084	1.00	45.99	MOL1	C
ATOM	1927	CH2	TRP	B	36	65.759	-45.631	-29.789	1.00	42.88	MOL1	C
ATOM	1928	C	TRP	B	36	63.934	-52.117	-32.623	1.00	49.95	MOL1	C
ATOM	1929	O	TRP	B	36	64.092	-53.334	-32.475	1.00	45.55	MOL1	O
ATOM	1930	N	VAL	B	37	63.687	-51.540	-33.788	1.00	46.39	MOL1	N
ATOM	1931	CA	VAL	B	37	63.617	-52.298	-35.013	1.00	47.88	MOL1	C
ATOM	1932	CB	VAL	B	37	62.169	-52.400	-35.492	1.00	41.67	MOL1	C
ATOM	1933	CG1	VAL	B	37	62.065	-53.324	-36.663	1.00	41.23	MOL1	C
ATOM	1934	CG2	VAL	B	37	61.320	-52.898	-34.384	1.00	41.38	MOL1	C
ATOM	1935	C	VAL	B	37	64.427	-51.461	-35.975	1.00	52.48	MOL1	C
ATOM	1936	O	VAL	B	37	64.256	-50.241	-36.035	1.00	55.74	MOL1	O
ATOM	1937	N	ARG	B	38	65.316	-52.105	-36.718	1.00	52.27	MOL1	N
ATOM	1938	CA	ARG	B	38	66.165	-51.393	-37.664	1.00	52.32	MOL1	C
ATOM	1939	CB	ARG	B	38	67.613	-51.778	-37.423	1.00	59.42	MOL1	C
ATOM	1940	CG	ARG	B	38	67.768	-53.293	-37.331	1.00	64.80	MOL1	C
ATOM	1941	CD	ARG	B	38	69.102	-53.780	-37.846	1.00	65.87	MOL1	C
ATOM	1942	NE	ARG	B	38	70.211	-53.258	-37.064	1.00	69.65	MOL1	N
ATOM	1943	CZ	ARG	B	38	71.243	-53.996	-36.676	1.00	76.35	MOL1	C
ATOM	1944	NH1	ARG	B	38	71.299	-55.286	-36.997	1.00	78.10	MOL1	N
ATOM	1945	NH2	ARG	B	38	72.220	-53.444	-35.975	1.00	80.15	MOL1	N
ATOM	1946	C	ARG	B	38	65.814	-51.761	-39.086	1.00	49.40	MOL1	C
ATOM	1947	O	ARG	B	38	65.183	-52.799	-39.333	1.00	48.23	MOL1	O
ATOM	1948	N	GLN	B	39	66.260	-50.924	-40.019	1.00	44.75	MOL1	N
ATOM	1949	CA	GLN	B	39	66.027	-51.157	-41.438	1.00	43.64	MOL1	C
ATOM	1950	CB	GLN	B	39	64.729	-50.505	-41.854	1.00	41.38	MOL1	C
ATOM	1951	CG	GLN	B	39	64.449	-50.506	-43.329	1.00	34.67	MOL1	C
ATOM	1952	CD	GLN	B	39	63.095	-49.913	-43.611	1.00	42.91	MOL1	C
ATOM	1953	OE1	GLN	B	39	62.779	-48.805	-43.156	1.00	43.88	MOL1	O
ATOM	1954	NE2	GLN	B	39	62.278	-50.642	-44.356	1.00	43.01	MOL1	N
ATOM	1955	C	GLN	B	39	67.160	-50.599	-42.279	1.00	47.48	MOL1	C
ATOM	1956	O	GLN	B	39	67.243	-49.390	-42.496	1.00	44.38	MOL1	O
ATOM	1957	N	ALA	B	40	68.029	-51.489	-42.751	1.00	52.72	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	1958	CA	ALA	B	40	69.166	-51.097	-43.577	1.00	57.93	MOL1	C
ATOM	1959	CB	ALA	B	40	70.051	-52.286	-43.815	1.00	60.62	MOL1	C
ATOM	1960	C	ALA	B	40	68.715	-50.525	-44.909	1.00	64.10	MOL1	C
ATOM	1961	O	ALA	B	40	67.752	-51.001	-45.507	1.00	71.54	MOL1	O
ATOM	1962	N	PRO	B	41	69.427	-49.510	-45.411	1.00	66.71	MOL1	N
ATOM	1963	CD	PRO	B	41	70.733	-49.035	-44.936	1.00	66.97	MOL1	C
ATOM	1964	CA	PRO	B	41	69.084	-48.877	-46.687	1.00	71.95	MOL1	C
ATOM	1965	CB	PRO	B	41	70.376	-48.181	-47.081	1.00	65.76	MOL1	C
ATOM	1966	CG	PRO	B	41	70.933	-47.794	-45.769	1.00	69.20	MOL1	C
ATOM	1967	C	PRO	B	41	68.642	-49.890	-47.732	1.00	77.48	MOL1	C
ATOM	1968	O	PRO	B	41	69.321	-50.889	-47.968	1.00	80.43	MOL1	O
ATOM	1969	N	GLY	B	42	67.492	-49.633	-48.341	1.00	82.42	MOL1	N
ATOM	1970	CA	GLY	B	42	66.977	-50.529	-49.357	1.00	82.41	MOL1	C
ATOM	1971	C	GLY	B	42	66.426	-51.829	-48.809	1.00	79.85	MOL1	C
ATOM	1972	O	GLY	B	42	65.435	-52.347	-49.323	1.00	81.14	MOL1	O
ATOM	1973	N	LYS	B	43	67.053	-52.351	-47.760	1.00	75.67	MOL1	N
ATOM	1974	CA	LYS	B	43	66.620	-53.609	-47.167	1.00	78.61	MOL1	C
ATOM	1975	CB	LYS	B	43	67.745	-54.174	-46.297	1.00	87.21	MOL1	C
ATOM	1976	CG	LYS	B	43	69.005	-54.545	-47.080	1.00	100.19	MOL1	C
ATOM	1977	CD	LYS	B	43	69.995	-55.315	-46.201	1.00	112.51	MOL1	C
ATOM	1978	CE	LYS	B	43	69.365	-56.593	-45.627	1.00	117.15	MOL1	C
ATOM	1979	NZ	LYS	B	43	70.287	-57.328	-44.705	1.00	117.37	MOL1	N
ATOM	1980	C	LYS	B	43	65.306	-53.582	-46.367	1.00	73.40	MOL1	C
ATOM	1981	O	LYS	B	43	64.650	-52.543	-46.241	1.00	68.85	MOL1	O
ATOM	1982	N	GLY	B	44	64.939	-54.747	-45.835	1.00	67.59	MOL1	N
ATOM	1983	CA	GLY	B	44	63.712	-54.886	-45.071	1.00	65.22	MOL1	C
ATOM	1984	C	GLY	B	44	63.781	-54.467	-43.614	1.00	64.36	MOL1	C
ATOM	1985	O	GLY	B	44	64.568	-53.594	-43.251	1.00	70.41	MOL1	O
ATOM	1986	N	LEU	B	45	62.960	-55.083	-42.768	1.00	56.81	MOL1	N
ATOM	1987	CA	LEU	B	45	62.943	-54.720	-41.357	1.00	51.84	MOL1	C
ATOM	1988	CB	LEU	B	45	61.515	-54.395	-40.893	1.00	47.66	MOL1	C
ATOM	1989	CG	LEU	B	45	60.686	-53.353	-41.671	1.00	49.11	MOL1	C
ATOM	1990	CD1	LEU	B	45	59.243	-53.418	-41.213	1.00	41.70	MOL1	C
ATOM	1991	CD2	LEU	B	45	61.229	-51.951	-41.487	1.00	34.18	MOL1	C
ATOM	1992	C	LEU	B	45	63.511	-55.831	-40.505	1.00	55.33	MOL1	C
ATOM	1993	O	LEU	B	45	63.154	-57.000	-40.665	1.00	59.00	MOL1	O
ATOM	1994	N	GLU	B	46	64.400	-55.452	-39.593	1.00	57.69	MOL1	N
ATOM	1995	CA	GLU	B	46	65.052	-56.404	-38.697	1.00	61.86	MOL1	C
ATOM	1996	CB	GLU	B	46	66.557	-56.435	-38.971	1.00	75.49	MOL1	C
ATOM	1997	CG	GLU	B	46	67.313	-57.598	-38.340	1.00	87.36	MOL1	C
ATOM	1998	CD	GLU	B	46	68.743	-57.703	-38.864	1.00	92.97	MOL1	C
ATOM	1999	OE1	GLU	B	46	69.650	-57.057	-38.286	1.00	94.73	MOL1	O
ATOM	2000	OE2	GLU	B	46	68.951	-58.423	-39.869	1.00	93.69	MOL1	O
ATOM	2001	C	GLU	B	46	64.819	-55.955	-37.277	1.00	58.22	MOL1	C
ATOM	2002	O	GLU	B	46	64.976	-54.773	-36.965	1.00	53.10	MOL1	O
ATOM	2003	N	TRP	B	47	64.443	-56.895	-36.419	1.00	57.07	MOL1	N
ATOM	2004	CA	TRP	B	47	64.180	-56.569	-35.026	1.00	60.27	MOL1	C
ATOM	2005	CB	TRP	B	47	63.291	-57.625	-34.381	1.00	57.30	MOL1	C
ATOM	2006	CG	TRP	B	47	63.340	-57.537	-32.911	1.00	57.43	MOL1	C
ATOM	2007	CD2	TRP	B	47	63.840	-58.524	-32.010	1.00	64.30	MOL1	C
ATOM	2008	CE2	TRP	B	47	63.765	-57.983	-30.715	1.00	68.83	MOL1	C
ATOM	2009	CE3	TRP	B	47	64.348	-59.813	-32.172	1.00	69.52	MOL1	C
ATOM	2010	CD1	TRP	B	47	62.988	-56.474	-32.153	1.00	64.23	MOL1	C
ATOM	2011	NE1	TRP	B	47	63.238	-56.727	-30.828	1.00	68.28	MOL1	N
ATOM	2012	CZ2	TRP	B	47	64.180	-58.683	-29.592	1.00	69.21	MOL1	C
ATOM	2013	CZ3	TRP	B	47	64.758	-60.507	-31.057	1.00	69.35	MOL1	C
ATOM	2014	CH2	TRP	B	47	64.673	-59.941	-29.784	1.00	72.43	MOL1	C
ATOM	2015	C	TRP	B	47	65.480	-56.507	-34.259	1.00	60.65	MOL1	C
ATOM	2016	O	TRP	B	47	66.271	-57.434	-34.327	1.00	69.26	MOL1	O
ATOM	2017	N	VAL	B	48	65.706	-55.426	-33.527	1.00	58.46	MOL1	N
ATOM	2018	CA	VAL	B	48	66.940	-55.305	-32.764	1.00	55.72	MOL1	C
ATOM	2019	CB	VAL	B	48	67.389	-53.849	-32.644	1.00	48.84	MOL1	C
ATOM	2020	CG1	VAL	B	48	68.417	-53.724	-31.552	1.00	42.05	MOL1	C
ATOM	2021	CG2	VAL	B	48	67.972	-53.385	-33.969	1.00	38.51	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2022	C	VAL	B	48	66.787	-55.889	-31.378	1.00	59.88	MOL1	C
ATOM	2023	O	VAL	B	48	67.259	-56.986	-31.117	1.00	66.07	MOL1	O
ATOM	2024	N	ALA	B	49	66.124	-55.168	-30.485	1.00	64.15	MOL1	N
ATOM	2025	CA	ALA	B	49	65.933	-55.677	-29.136	1.00	68.80	MOL1	C
ATOM	2026	CB	ALA	B	49	67.142	-55.348	-28.286	1.00	67.97	MOL1	C
ATOM	2027	C	ALA	B	49	64.680	-55.095	-28.506	1.00	73.99	MOL1	C
ATOM	2028	O	ALA	B	49	64.124	-54.106	-29.007	1.00	75.88	MOL1	O
ATOM	2029	N	THR	B	50	64.234	-55.727	-27.420	1.00	73.72	MOL1	N
ATOM	2030	CA	THR	B	50	63.061	-55.266	-26.675	1.00	70.84	MOL1	C
ATOM	2031	CB	THR	B	50	61.765	-56.065	-27.022	1.00	70.46	MOL1	C
ATOM	2032	OG1	THR	B	50	61.053	-56.353	-25.812	1.00	66.20	MOL1	O
ATOM	2033	CG2	THR	B	50	62.084	-57.352	-27.765	1.00	63.45	MOL1	C
ATOM	2034	C	THR	B	50	63.330	-55.371	-25.179	1.00	64.29	MOL1	C
ATOM	2035	O	THR	B	50	64.051	-56.257	-24.739	1.00	66.34	MOL1	O
ATOM	2036	N	ILE	B	51	62.750	-54.450	-24.418	1.00	59.03	MOL1	N
ATOM	2037	CA	ILE	B	51	62.903	-54.368	-22.964	1.00	60.21	MOL1	C
ATOM	2038	CB	ILE	B	51	63.628	-53.059	-22.574	1.00	63.37	MOL1	C
ATOM	2039	CG2	ILE	B	51	62.886	-51.870	-23.158	1.00	67.01	MOL1	C
ATOM	2040	CG1	ILE	B	51	63.689	-52.880	-21.056	1.00	60.34	MOL1	C
ATOM	2041	CD1	ILE	B	51	64.217	-51.500	-20.639	1.00	42.72	MOL1	C
ATOM	2042	C	ILE	B	51	61.511	-54.318	-22.358	1.00	63.16	MOL1	C
ATOM	2043	O	ILE	B	51	60.637	-53.651	-22.894	1.00	68.58	MOL1	O
ATOM	2044	N	THR	B	52	61.309	-54.984	-21.229	1.00	64.43	MOL1	N
ATOM	2045	CA	THR	B	52	59.999	-55.014	-20.588	1.00	66.52	MOL1	C
ATOM	2046	CB	THR	B	52	59.940	-56.170	-19.640	1.00	63.07	MOL1	C
ATOM	2047	OG1	THR	B	52	60.431	-57.338	-20.311	1.00	58.32	MOL1	O
ATOM	2048	CG2	THR	B	52	58.517	-56.403	-19.208	1.00	71.39	MOL1	C
ATOM	2049	C	THR	B	52	59.593	-53.743	-19.841	1.00	71.53	MOL1	C
ATOM	2050	O	THR	B	52	60.427	-52.898	-19.546	1.00	74.19	MOL1	O
ATOM	2051	N	TYR	B	53	58.308	-53.613	-19.526	1.00	77.80	MOL1	N
ATOM	2052	CA	TYR	B	53	57.826	-52.418	-18.845	1.00	85.35	MOL1	C
ATOM	2053	CB	TYR	B	53	56.298	-52.455	-18.698	1.00	88.65	MOL1	C
ATOM	2054	CG	TYR	B	53	55.755	-53.391	-17.635	1.00	96.94	MOL1	C
ATOM	2055	CD1	TYR	B	53	55.856	-54.774	-17.766	1.00	100.45	MOL1	C
ATOM	2056	CE1	TYR	B	53	55.303	-55.628	-16.816	1.00	103.92	MOL1	C
ATOM	2057	CD2	TYR	B	53	55.091	-52.887	-16.518	1.00	101.50	MOL1	C
ATOM	2058	CE2	TYR	B	53	54.537	-53.728	-15.567	1.00	105.53	MOL1	C
ATOM	2059	CZ	TYR	B	53	54.643	-55.096	-15.721	1.00	107.84	MOL1	C
ATOM	2060	OH	TYR	B	53	54.066	-55.928	-14.785	1.00	112.40	MOL1	O
ATOM	2061	C	TYR	B	53	58.476	-52.148	-17.492	1.00	89.73	MOL1	C
ATOM	2062	O	TYR	B	53	58.895	-51.020	-17.227	1.00	85.91	MOL1	O
ATOM	2063	N	GLU	B	54	58.555	-53.174	-16.644	1.00	95.57	MOL1	N
ATOM	2064	CA	GLU	B	54	59.158	-53.054	-15.315	1.00	96.04	MOL1	C
ATOM	2065	CB	GLU	B	54	59.150	-54.406	-14.616	1.00	96.47	MOL1	C
ATOM	2066	CG	GLU	B	54	59.909	-55.466	-15.386	1.00	102.64	MOL1	C
ATOM	2067	CD	GLU	B	54	59.069	-56.704	-15.648	1.00	109.60	MOL1	C
ATOM	2068	OE1	GLU	B	54	59.569	-57.620	-16.343	1.00	110.56	MOL1	O
ATOM	2069	OE2	GLU	B	54	57.913	-56.763	-15.160	1.00	106.82	MOL1	O
ATOM	2070	C	GLU	B	54	60.592	-52.579	-15.476	1.00	97.62	MOL1	C
ATOM	2071	O	GLU	B	54	61.138	-51.884	-14.620	1.00	96.02	MOL1	O
ATOM	2072	N	GLY	B	55	61.201	-52.970	-16.586	1.00	98.19	MOL1	N
ATOM	2073	CA	GLY	B	55	62.557	-52.552	-16.849	1.00	98.16	MOL1	C
ATOM	2074	C	GLY	B	55	63.572	-53.608	-16.510	1.00	99.02	MOL1	C
ATOM	2075	O	GLY	B	55	64.768	-53.349	-16.574	1.00	99.87	MOL1	O
ATOM	2076	N	ARG	B	56	63.117	-54.801	-16.151	1.00	102.67	MOL1	N
ATOM	2077	CA	ARG	B	56	64.071	-55.846	-15.815	1.00	109.99	MOL1	C
ATOM	2078	CB	ARG	B	56	64.027	-56.143	-14.310	1.00	120.09	MOL1	C
ATOM	2079	CG	ARG	B	56	65.396	-56.531	-13.704	1.00	131.53	MOL1	C
ATOM	2080	CD	ARG	B	56	66.519	-55.506	-14.023	1.00	138.72	MOL1	C
ATOM	2081	NE	ARG	B	56	66.268	-54.159	-13.493	1.00	142.56	MOL1	N
ATOM	2082	CZ	ARG	B	56	67.086	-53.117	-13.654	1.00	140.61	MOL1	C
ATOM	2083	NH1	ARG	B	56	68.219	-53.255	-14.331	1.00	139.77	MOL1	N
ATOM	2084	NH2	ARG	B	56	66.767	-51.932	-13.145	1.00	137.84	MOL1	N
ATOM	2085	C	ARG	B	56	63.876	-57.122	-16.625	1.00	107.40	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2086	O	ARG	B	56	63.302	-58.099	-16.150	1.00105.77	MOL1	O
ATOM	2087	N	ASN	B	57	64.370	-57.075	-17.859	1.00106.30	MOL1	N
ATOM	2088	CA	ASN	B	57	64.330	-58.175	-18.819	1.00103.13	MOL1	C
ATOM	2089	CB	ASN	B	57	63.020	-58.954	-18.735	1.00109.31	MOL1	C
ATOM	2090	CG	ASN	B	57	63.171	-60.237	-17.943	1.00116.48	MOL1	C
ATOM	2091	OD1	ASN	B	57	64.056	-61.055	-18.226	1.00119.17	MOL1	O
ATOM	2092	ND2	ASN	B	57	62.312	-60.424	-16.946	1.00119.65	MOL1	N
ATOM	2093	C	ASN	B	57	64.532	-57.641	-20.229	1.00 97.02	MOL1	C
ATOM	2094	O	ASN	B	57	63.639	-57.047	-20.824	1.00 94.31	MOL1	O
ATOM	2095	N	THR	B	58	65.735	-57.858	-20.742	1.00 91.48	MOL1	N
ATOM	2096	CA	THR	B	58	66.122	-57.406	-22.063	1.00 88.47	MOL1	C
ATOM	2097	CB	THR	B	58	67.462	-56.667	-21.981	1.00 89.89	MOL1	C
ATOM	2098	OG1	THR	B	58	68.491	-57.583	-21.580	1.00 90.62	MOL1	O
ATOM	2099	CG2	THR	B	58	67.375	-55.537	-20.956	1.00 86.04	MOL1	C
ATOM	2100	C	THR	B	58	66.273	-58.637	-22.939	1.00 87.58	MOL1	C
ATOM	2101	O	THR	B	58	66.523	-59.723	-22.418	1.00 86.67	MOL1	O
ATOM	2102	N	TYR	B	59	66.140	-58.487	-24.257	1.00 86.81	MOL1	N
ATOM	2103	CA	TYR	B	59	66.252	-59.657	-25.112	1.00 92.72	MOL1	C
ATOM	2104	CB	TYR	B	59	64.872	-60.004	-25.665	1.00 94.05	MOL1	C
ATOM	2105	CG	TYR	B	59	63.975	-60.556	-24.578	1.00101.13	MOL1	C
ATOM	2106	CD1	TYR	B	59	63.472	-59.727	-23.579	1.00103.97	MOL1	C
ATOM	2107	CE1	TYR	B	59	62.746	-60.238	-22.511	1.00104.73	MOL1	C
ATOM	2108	CD2	TYR	B	59	63.715	-61.923	-24.485	1.00103.68	MOL1	C
ATOM	2109	CE2	TYR	B	59	62.986	-62.446	-23.418	1.00105.50	MOL1	C
ATOM	2110	CZ	TYR	B	59	62.508	-61.595	-22.433	1.00106.12	MOL1	C
ATOM	2111	OH	TYR	B	59	61.816	-62.095	-21.352	1.00105.21	MOL1	O
ATOM	2112	C	TYR	B	59	67.311	-59.689	-26.214	1.00 93.91	MOL1	C
ATOM	2113	O	TYR	B	59	68.066	-60.661	-26.304	1.00101.59	MOL1	O
ATOM	2114	N	TYR	B	60	67.376	-58.661	-27.052	1.00 86.78	MOL1	N
ATOM	2115	CA	TYR	B	60	68.381	-58.608	-28.123	1.00 81.63	MOL1	C
ATOM	2116	CB	TYR	B	60	69.795	-58.542	-27.542	1.00 68.64	MOL1	C
ATOM	2117	CG	TYR	B	60	69.995	-57.478	-26.506	1.00 59.84	MOL1	C
ATOM	2118	CD1	TYR	B	60	69.653	-57.705	-25.181	1.00 59.97	MOL1	C
ATOM	2119	CE1	TYR	B	60	69.802	-56.716	-24.225	1.00 65.05	MOL1	C
ATOM	2120	CD2	TYR	B	60	70.496	-56.235	-26.852	1.00 57.42	MOL1	C
ATOM	2121	CE2	TYR	B	60	70.644	-55.235	-25.908	1.00 60.53	MOL1	C
ATOM	2122	CZ	TYR	B	60	70.294	-55.477	-24.595	1.00 65.79	MOL1	C
ATOM	2123	OH	TYR	B	60	70.397	-54.476	-23.654	1.00 66.07	MOL1	O
ATOM	2124	C	TYR	B	60	68.372	-59.717	-29.183	1.00 83.30	MOL1	C
ATOM	2125	O	TYR	B	60	67.950	-60.850	-28.948	1.00 83.74	MOL1	O
ATOM	2126	N	ARG	B	61	68.887	-59.354	-30.351	1.00 85.06	MOL1	N
ATOM	2127	CA	ARG	B	61	68.987	-60.229	-31.507	1.00 89.57	MOL1	C
ATOM	2128	CB	ARG	B	61	68.883	-59.366	-32.775	1.00 87.91	MOL1	C
ATOM	2129	CG	ARG	B	61	68.986	-60.104	-34.100	1.00 89.71	MOL1	C
ATOM	2130	CD	ARG	B	61	68.604	-59.191	-35.265	1.00 91.21	MOL1	C
ATOM	2131	NE	ARG	B	61	68.150	-59.964	-36.418	1.00 95.41	MOL1	N
ATOM	2132	CZ	ARG	B	61	68.957	-60.493	-37.334	1.00100.00	MOL1	C
ATOM	2133	NH1	ARG	B	61	70.271	-60.318	-37.239	1.00101.90	MOL1	N
ATOM	2134	NH2	ARG	B	61	68.457	-61.222	-38.326	1.00 96.25	MOL1	N
ATOM	2135	C	ARG	B	61	70.339	-60.938	-31.462	1.00 94.03	MOL1	C
ATOM	2136	O	ARG	B	61	71.350	-60.324	-31.129	1.00 97.78	MOL1	O
ATOM	2137	N	ASP	B	62	70.369	-62.225	-31.784	1.00 96.51	MOL1	N
ATOM	2138	CA	ASP	B	62	71.633	-62.952	-31.779	1.00 97.02	MOL1	C
ATOM	2139	CB	ASP	B	62	71.390	-64.447	-32.022	1.00107.96	MOL1	C
ATOM	2140	CG	ASP	B	62	71.171	-65.232	-30.728	1.00114.45	MOL1	C
ATOM	2141	OD1	ASP	B	62	70.495	-64.717	-29.805	1.00115.26	MOL1	O
ATOM	2142	OD2	ASP	B	62	71.672	-66.376	-30.644	1.00115.30	MOL1	O
ATOM	2143	C	ASP	B	62	72.497	-62.382	-32.888	1.00 92.57	MOL1	C
ATOM	2144	O	ASP	B	62	72.675	-63.016	-33.921	1.00 96.14	MOL1	O
ATOM	2145	N	SER	B	63	73.023	-61.181	-32.674	1.00 86.96	MOL1	N
ATOM	2146	CA	SER	B	63	73.854	-60.516	-33.673	1.00 87.32	MOL1	C
ATOM	2147	CB	SER	B	63	73.075	-60.284	-34.977	1.00 91.29	MOL1	C
ATOM	2148	CG	SER	B	63	72.923	-61.474	-35.742	1.00 96.02	MOL1	O
ATOM	2149	C	SER	B	63	74.340	-59.177	-33.161	1.00 85.60	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2150	O	SER	B	63	75.072	-58.469	-33.850	1.00	86.71	MOL1	O
ATOM	2151	N	VAL	B	64	73.913	-58.823	-31.957	1.00	83.68	MOL1	N
ATOM	2152	CA	VAL	B	64	74.314	-57.565	-31.355	1.00	88.45	MOL1	C
ATOM	2153	CB	VAL	B	64	73.353	-56.437	-31.692	1.00	88.13	MOL1	C
ATOM	2154	CG1	VAL	B	64	73.352	-56.179	-33.179	1.00	94.20	MOL1	C
ATOM	2155	CG2	VAL	B	64	71.963	-56.788	-31.200	1.00	91.56	MOL1	C
ATOM	2156	C	VAL	B	64	74.305	-57.719	-29.858	1.00	92.93	MOL1	C
ATOM	2157	O	VAL	B	64	74.251	-56.726	-29.127	1.00	91.76	MOL1	O
ATOM	2158	N	LYS	B	65	74.342	-58.966	-29.398	1.00	99.29	MOL1	N
ATOM	2159	CA	LYS	B	65	74.343	-59.222	-27.962	1.00	104.57	MOL1	C
ATOM	2160	CB	LYS	B	65	74.088	-60.702	-27.656	1.00	104.76	MOL1	C
ATOM	2161	CG	LYS	B	65	73.871	-60.958	-26.173	1.00	110.85	MOL1	C
ATOM	2162	CD	LYS	B	65	73.555	-62.413	-25.871	1.00	117.47	MOL1	C
ATOM	2163	CE	LYS	B	65	73.388	-62.625	-24.367	1.00	119.04	MOL1	C
ATOM	2164	NZ	LYS	B	65	73.094	-64.045	-24.021	1.00	118.64	MOL1	N
ATOM	2165	C	LYS	B	65	75.684	-58.793	-27.376	1.00	104.37	MOL1	C
ATOM	2166	O	LYS	B	65	76.731	-58.921	-28.021	1.00	103.03	MOL1	O
ATOM	2167	N	GLY	B	66	75.646	-58.274	-26.154	1.00	102.25	MOL1	N
ATOM	2168	CA	GLY	B	66	76.865	-57.819	-25.520	1.00	101.34	MOL1	C
ATOM	2169	C	GLY	B	66	77.301	-56.469	-26.061	1.00	100.26	MOL1	C
ATOM	2170	O	GLY	B	66	77.736	-55.601	-25.293	1.00	102.10	MOL1	O
ATOM	2171	N	ARG	B	67	77.177	-56.288	-27.377	1.00	94.56	MOL1	N
ATOM	2172	CA	ARG	B	67	77.562	-55.039	-28.037	1.00	91.19	MOL1	C
ATOM	2173	CB	ARG	B	67	77.781	-55.274	-29.532	1.00	92.23	MOL1	C
ATOM	2174	CG	ARG	B	67	78.604	-56.509	-29.831	1.00	96.75	MOL1	C
ATOM	2175	CD	ARG	B	67	79.057	-56.587	-31.285	1.00	97.01	MOL1	C
ATOM	2176	NE	ARG	B	67	77.961	-56.587	-32.252	1.00	92.98	MOL1	N
ATOM	2177	CZ	ARG	B	67	77.561	-55.515	-32.927	1.00	90.72	MOL1	C
ATOM	2178	NH1	ARG	B	67	76.560	-55.610	-33.789	1.00	92.03	MOL1	N
ATOM	2179	NH2	ARG	B	67	78.165	-54.348	-32.746	1.00	87.27	MOL1	N
ATOM	2180	C	ARG	B	67	76.520	-53.937	-27.842	1.00	89.64	MOL1	C
ATOM	2181	O	ARG	B	67	76.863	-52.764	-27.696	1.00	82.64	MOL1	O
ATOM	2182	N	PHE	B	68	75.245	-54.315	-27.853	1.00	90.14	MOL1	N
ATOM	2183	CA	PHE	B	68	74.174	-53.345	-27.653	1.00	88.75	MOL1	C
ATOM	2184	CB	PHE	B	68	73.011	-53.548	-28.633	1.00	93.55	MOL1	C
ATOM	2185	CG	PHE	B	68	73.251	-53.011	-30.017	1.00	93.67	MOL1	C
ATOM	2186	CD1	PHE	B	68	74.102	-51.950	-30.237	1.00	92.74	MOL1	C
ATOM	2187	CD2	PHE	B	68	72.587	-53.558	-31.099	1.00	91.80	MOL1	C
ATOM	2188	CE1	PHE	B	68	74.280	-51.455	-31.512	1.00	92.25	MOL1	C
ATOM	2189	CE2	PHE	B	68	72.766	-53.062	-32.366	1.00	91.38	MOL1	C
ATOM	2190	CZ	PHE	B	68	73.613	-52.009	-32.573	1.00	91.73	MOL1	C
ATOM	2191	C	PHE	B	68	73.609	-53.489	-26.255	1.00	86.27	MOL1	C
ATOM	2192	O	PHE	B	68	73.826	-54.497	-25.580	1.00	85.81	MOL1	O
ATOM	2193	N	THR	B	69	72.862	-52.475	-25.839	1.00	82.42	MOL1	N
ATOM	2194	CA	THR	B	69	72.224	-52.481	-24.534	1.00	85.27	MOL1	C
ATOM	2195	CB	THR	B	69	73.225	-52.072	-23.422	1.00	89.83	MOL1	C
ATOM	2196	OG1	THR	B	69	74.120	-53.164	-23.171	1.00	91.62	MOL1	O
ATOM	2197	CG2	THR	B	69	72.494	-51.712	-22.127	1.00	88.90	MOL1	C
ATOM	2198	C	THR	B	69	70.993	-51.571	-24.512	1.00	84.21	MOL1	C
ATOM	2199	O	THR	B	69	71.096	-50.352	-24.666	1.00	84.76	MOL1	O
ATOM	2200	N	ILE	B	70	69.822	-52.180	-24.333	1.00	81.35	MOL1	N
ATOM	2201	CA	ILE	B	70	68.563	-51.442	-24.291	1.00	77.85	MOL1	C
ATOM	2202	CB	ILE	B	70	67.428	-52.236	-24.926	1.00	77.51	MOL1	C
ATOM	2203	CG2	ILE	B	70	67.296	-53.573	-24.230	1.00	65.98	MOL1	C
ATOM	2204	CG1	ILE	B	70	66.131	-51.420	-24.857	1.00	78.19	MOL1	C
ATOM	2205	CD1	ILE	B	70	64.973	-52.037	-25.623	1.00	80.92	MOL1	C
ATOM	2206	C	ILE	B	70	68.159	-51.120	-22.862	1.00	78.88	MOL1	C
ATOM	2207	O	ILE	B	70	68.299	-51.946	-21.964	1.00	78.72	MOL1	O
ATOM	2208	N	SER	B	71	67.629	-49.923	-22.656	1.00	79.84	MOL1	N
ATOM	2209	CA	SER	B	71	67.240	-49.507	-21.318	1.00	81.01	MOL1	C
ATOM	2210	CB	SER	B	71	68.453	-48.931	-20.618	1.00	85.85	MOL1	C
ATOM	2211	OG	SER	B	71	68.959	-47.846	-21.380	1.00	88.29	MOL1	O
ATOM	2212	C	SER	B	71	66.149	-48.450	-21.343	1.00	81.45	MOL1	C
ATOM	2213	O	SER	B	71	65.978	-47.756	-22.342	1.00	83.47	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	2214	N	ARG	B	72	65.424	-48.311	-20.235	1.00	79.53	MOL1	N
ATOM	2215	CA	ARG	B	72	64.360	-47.312	-20.156	1.00	75.39	MOL1	C
ATOM	2216	CB	ARG	B	72	62.994	-47.955	-20.366	1.00	74.44	MOL1	C
ATOM	2217	CG	ARG	B	72	62.578	-48.879	-19.254	1.00	72.98	MOL1	C
ATOM	2218	CD	ARG	B	72	61.431	-49.766	-19.681	1.00	73.00	MOL1	C
ATOM	2219	NE	ARG	B	72	60.224	-49.014	-20.004	1.00	74.85	MOL1	N
ATOM	2220	CZ	ARG	B	72	59.201	-49.538	-20.670	1.00	79.77	MOL1	C
ATOM	2221	NH1	ARG	B	72	59.263	-50.803	-21.070	1.00	79.23	MOL1	N
ATOM	2222	NH2	ARG	B	72	58.128	-48.807	-20.944	1.00	76.87	MOL1	N
ATOM	2223	C	ARG	B	72	64.358	-46.587	-18.826	1.00	73.41	MOL1	C
ATOM	2224	O	ARG	B	72	65.080	-46.979	-17.904	1.00	73.02	MOL1	O
ATOM	2225	N	ASP	B	73	63.554	-45.539	-18.740	1.00	74.36	MOL1	N
ATOM	2226	CA	ASP	B	73	63.448	-44.701	-17.550	1.00	81.05	MOL1	C
ATOM	2227	CB	ASP	B	73	63.675	-43.243	-17.955	1.00	83.64	MOL1	C
ATOM	2228	CG	ASP	B	73	64.128	-42.366	-16.797	1.00	92.05	MOL1	C
ATOM	2229	OD1	ASP	B	73	64.058	-41.122	-16.932	1.00	94.63	MOL1	O
ATOM	2230	OD2	ASP	B	73	64.569	-42.909	-15.760	1.00	96.29	MOL1	O
ATOM	2231	C	ASP	B	73	62.082	-44.815	-16.854	1.00	86.43	MOL1	C
ATOM	2232	O	ASP	B	73	62.000	-44.913	-15.622	1.00	92.37	MOL1	O
ATOM	2233	N	ASN	B	74	61.016	-44.798	-17.648	1.00	86.94	MOL1	N
ATOM	2234	CA	ASN	B	74	59.648	-44.868	-17.138	1.00	85.28	MOL1	C
ATOM	2235	CB	ASN	B	74	59.461	-45.995	-16.123	1.00	85.17	MOL1	C
ATOM	2236	CG	ASN	B	74	59.699	-47.366	-16.723	1.00	88.63	MOL1	C
ATOM	2237	OD1	ASN	B	74	60.796	-47.914	-16.624	1.00	91.67	MOL1	O
ATOM	2238	ND2	ASN	B	74	58.676	-47.925	-17.357	1.00	89.10	MOL1	N
ATOM	2239	C	ASN	B	74	59.337	-43.538	-16.493	1.00	87.31	MOL1	C
ATOM	2240	O	ASN	B	74	58.180	-43.192	-16.275	1.00	89.89	MOL1	O
ATOM	2241	N	ALA	B	75	60.389	-42.806	-16.164	1.00	90.07	MOL1	N
ATOM	2242	CA	ALA	B	75	60.256	-41.469	-15.611	1.00	92.90	MOL1	C
ATOM	2243	CB	ALA	B	75	61.235	-41.264	-14.466	1.00	92.92	MOL1	C
ATOM	2244	C	ALA	B	75	60.701	-40.707	-16.850	1.00	96.53	MOL1	C
ATOM	2245	O	ALA	B	75	61.474	-41.246	-17.651	1.00	95.38	MOL1	O
ATOM	2246	N	LYS	B	76	60.212	-39.489	-17.051	1.00	98.10	MOL1	N
ATOM	2247	CA	LYS	B	76	60.616	-38.745	-18.247	1.00	102.03	MOL1	C
ATOM	2248	CB	LYS	B	76	62.130	-38.474	-18.242	1.00	108.64	MOL1	C
ATOM	2249	CG	LYS	B	76	62.651	-37.617	-17.097	1.00	119.35	MOL1	C
ATOM	2250	CD	LYS	B	76	64.154	-37.329	-17.254	1.00	121.07	MOL1	C
ATOM	2251	CE	LYS	B	76	64.445	-36.455	-18.478	1.00	122.47	MOL1	C
ATOM	2252	NZ	LYS	B	76	65.893	-36.117	-18.612	1.00	120.70	MOL1	N
ATOM	2253	C	LYS	B	76	60.284	-39.513	-19.541	1.00	98.96	MOL1	C
ATOM	2254	O	LYS	B	76	60.682	-39.091	-20.635	1.00	98.32	MOL1	O
ATOM	2255	N	ASN	B	77	59.594	-40.649	-19.406	1.00	92.93	MOL1	N
ATOM	2256	CA	ASN	B	77	59.181	-41.484	-20.541	1.00	83.37	MOL1	C
ATOM	2257	CB	ASN	B	77	57.922	-40.899	-21.192	1.00	84.04	MOL1	C
ATOM	2258	CG	ASN	B	77	56.797	-40.662	-20.205	1.00	82.21	MOL1	C
ATOM	2259	OD1	ASN	B	77	55.857	-39.916	-20.491	1.00	79.91	MOL1	O
ATOM	2260	ND2	ASN	B	77	56.878	-41.301	-19.046	1.00	85.38	MOL1	N
ATOM	2261	C	ASN	B	77	60.242	-41.606	-21.629	1.00	78.60	MOL1	C
ATOM	2262	O	ASN	B	77	60.103	-40.983	-22.682	1.00	81.00	MOL1	O
ATOM	2263	N	SER	B	78	61.286	-42.398	-21.416	1.00	66.48	MOL1	N
ATOM	2264	CA	SER	B	78	62.295	-42.502	-22.458	1.00	55.65	MOL1	C
ATOM	2265	CB	SER	B	78	63.417	-41.496	-22.208	1.00	50.88	MOL1	C
ATOM	2266	OG	SER	B	78	62.949	-40.162	-22.348	1.00	50.06	MOL1	O
ATOM	2267	C	SER	B	78	62.876	-43.880	-22.645	1.00	55.66	MOL1	C
ATOM	2268	O	SER	B	78	63.030	-44.640	-21.694	1.00	58.81	MOL1	O
ATOM	2269	N	LEU	B	79	63.195	-44.195	-23.895	1.00	56.03	MOL1	N
ATOM	2270	CA	LEU	B	79	63.763	-45.484	-24.252	1.00	55.87	MOL1	C
ATOM	2271	CB	LEU	B	79	62.862	-46.194	-25.238	1.00	50.03	MOL1	C
ATOM	2272	CG	LEU	B	79	63.500	-47.475	-25.721	1.00	55.46	MOL1	C
ATOM	2273	CD1	LEU	B	79	63.850	-48.333	-24.526	1.00	49.32	MOL1	C
ATOM	2274	CD2	LEU	B	79	62.548	-48.181	-26.668	1.00	63.53	MOL1	C
ATOM	2275	C	LEU	B	79	65.125	-45.234	-24.877	1.00	61.11	MOL1	C
ATOM	2276	O	LEU	B	79	65.275	-44.350	-25.717	1.00	64.98	MOL1	O
ATOM	2277	N	TYR	B	80	66.113	-46.024	-24.472	1.00	65.65	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	2278	CA	TYR	B	80	67.480	-45.851	-24.946	1.00	61.24	MOL1	C
ATOM	2279	CB	TYR	B	80	68.356	-45.415	-23.779	1.00	61.18	MOL1	C
ATOM	2280	CG	TYR	B	80	67.859	-44.220	-23.016	1.00	58.98	MOL1	C
ATOM	2281	CD1	TYR	B	80	67.927	-42.957	-23.570	1.00	62.20	MOL1	C
ATOM	2282	CE1	TYR	B	80	67.500	-41.848	-22.874	1.00	69.50	MOL1	C
ATOM	2283	CD2	TYR	B	80	67.342	-44.352	-21.733	1.00	56.61	MOL1	C
ATOM	2284	CE2	TYR	B	80	66.909	-43.245	-21.026	1.00	63.76	MOL1	C
ATOM	2285	CZ	TYR	B	80	66.992	-41.991	-21.607	1.00	66.48	MOL1	C
ATOM	2286	OH	TYR	B	80	66.566	-40.862	-20.946	1.00	68.86	MOL1	O
ATOM	2287	C	TYR	B	80	68.114	-47.098	-25.536	1.00	61.79	MOL1	C
ATOM	2288	O	TYR	B	80	67.772	-48.225	-25.165	1.00	63.10	MOL1	O
ATOM	2289	N	LEU	B	81	69.059	-46.882	-26.447	1.00	59.82	MOL1	N
ATOM	2290	CA	LEU	B	81	69.812	-47.982	-27.036	1.00	61.74	MOL1	C
ATOM	2291	CB	LEU	B	81	69.406	-48.262	-28.486	1.00	56.22	MOL1	C
ATOM	2292	CG	LEU	B	81	70.141	-49.486	-29.055	1.00	46.81	MOL1	C
ATOM	2293	CD1	LEU	B	81	69.833	-50.675	-28.204	1.00	41.50	MOL1	C
ATOM	2294	CD2	LEU	B	81	69.740	-49.759	-30.483	1.00	47.33	MOL1	C
ATOM	2295	C	LEU	B	81	71.288	-47.608	-26.990	1.00	65.52	MOL1	C
ATOM	2296	O	LEU	B	81	71.699	-46.578	-27.524	1.00	64.49	MOL1	O
ATOM	2297	N	GLN	B	82	72.077	-48.443	-26.325	1.00	70.88	MOL1	N
ATOM	2298	CA	GLN	B	82	73.512	-48.225	-26.198	1.00	73.73	MOL1	C
ATOM	2299	CB	GLN	B	82	73.973	-48.589	-24.790	1.00	76.90	MOL1	C
ATOM	2300	CG	GLN	B	82	75.325	-48.035	-24.429	1.00	79.20	MOL1	C
ATOM	2301	CD	GLN	B	82	75.358	-46.529	-24.538	1.00	83.44	MOL1	C
ATOM	2302	OE1	GLN	B	82	74.528	-45.832	-23.948	1.00	86.30	MOL1	O
ATOM	2303	NE2	GLN	B	82	76.319	-46.015	-25.294	1.00	84.32	MOL1	N
ATOM	2304	C	GLN	B	82	74.216	-49.120	-27.206	1.00	77.08	MOL1	C
ATOM	2305	O	GLN	B	82	74.270	-50.352	-27.046	1.00	77.12	MOL1	O
ATOM	2306	N	MET	B	83	74.763	-48.491	-28.237	1.00	75.62	MOL1	N
ATOM	2307	CA	MET	B	83	75.442	-49.207	-29.293	1.00	79.14	MOL1	C
ATOM	2308	CB	MET	B	83	74.988	-48.633	-30.626	1.00	79.62	MOL1	C
ATOM	2309	CG	MET	B	83	73.469	-48.606	-30.753	1.00	77.11	MOL1	C
ATOM	2310	SD	MET	B	83	72.892	-48.228	-32.398	1.00	76.47	MOL1	S
ATOM	2311	CE	MET	B	83	73.300	-46.496	-32.473	1.00	77.56	MOL1	C
ATOM	2312	C	MET	B	83	76.956	-49.133	-29.165	1.00	84.61	MOL1	C
ATOM	2313	O	MET	B	83	77.557	-48.105	-29.477	1.00	82.10	MOL1	O
ATOM	2314	N	ASN	B	84	77.563	-50.228	-28.701	1.00	90.93	MOL1	N
ATOM	2315	CA	ASN	B	84	79.016	-50.311	-28.526	1.00	94.51	MOL1	C
ATOM	2316	CB	ASN	B	84	79.376	-50.905	-27.155	1.00	95.79	MOL1	C
ATOM	2317	CG	ASN	B	84	78.835	-50.094	-25.989	1.00	96.64	MOL1	C
ATOM	2318	OD1	ASN	B	84	79.009	-48.873	-25.928	1.00	96.83	MOL1	O
ATOM	2319	ND2	ASN	B	84	78.190	-50.779	-25.042	1.00	94.23	MOL1	N
ATOM	2320	C	ASN	B	84	79.627	-51.206	-29.603	1.00	96.78	MOL1	C
ATOM	2321	O	ASN	B	84	78.947	-52.075	-30.152	1.00	98.20	MOL1	O
ATOM	2322	N	SER	B	85	80.912	-50.999	-29.888	1.00	97.63	MOL1	N
ATOM	2323	CA	SER	B	85	81.625	-51.803	-30.880	1.00	98.44	MOL1	C
ATOM	2324	CB	SER	B	85	81.849	-53.222	-30.333	1.00	102.16	MOL1	C
ATOM	2325	OG	SER	B	85	82.641	-54.008	-31.207	1.00	106.22	MOL1	O
ATOM	2326	C	SER	B	85	80.842	-51.855	-32.186	1.00	95.62	MOL1	C
ATOM	2327	O	SER	B	85	80.756	-52.895	-32.844	1.00	96.27	MOL1	O
ATOM	2328	N	LEU	B	86	80.274	-50.718	-32.559	1.00	91.53	MOL1	N
ATOM	2329	CA	LEU	B	86	79.482	-50.633	-33.774	1.00	91.52	MOL1	C
ATOM	2330	CB	LEU	B	86	79.114	-49.172	-34.058	1.00	90.47	MOL1	C
ATOM	2331	CG	LEU	B	86	77.932	-48.622	-33.253	1.00	87.14	MOL1	C
ATOM	2332	CD1	LEU	B	86	77.789	-47.125	-33.449	1.00	82.82	MOL1	C
ATOM	2333	CD2	LEU	B	86	76.673	-49.345	-33.693	1.00	84.80	MOL1	C
ATOM	2334	C	LEU	B	86	80.153	-51.231	-34.997	1.00	89.27	MOL1	C
ATOM	2335	O	LEU	B	86	81.104	-50.667	-35.517	1.00	86.74	MOL1	O
ATOM	2336	N	ARG	B	87	79.656	-52.379	-35.446	1.00	91.09	MOL1	N
ATOM	2337	CA	ARG	B	87	80.190	-53.022	-36.641	1.00	93.95	MOL1	C
ATOM	2338	CB	ARG	B	87	79.627	-54.444	-36.801	1.00	100.00	MOL1	C
ATOM	2339	CG	ARG	B	87	79.675	-55.332	-35.556	1.00	111.29	MOL1	C
ATOM	2340	CD	ARG	B	87	81.094	-55.636	-35.096	1.00	124.71	MOL1	C
ATOM	2341	NE	ARG	B	87	81.114	-56.577	-33.973	1.00	136.98	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	2342	CZ	ARG	B	87	82.197	-56.881	-33.258	1.00142.47	MOL1	C	
ATOM	2343	NH1	ARG	B	87	83.366	-56.317	-33.542	1.00145.24	MOL1	N	
ATOM	2344	NH2	ARG	B	87	82.112	-57.746	-32.252	1.00142.45	MOL1	N	
ATOM	2345	C	ARG	B	87	79.706	-52.153	-37.807	1.00	91.66	MOL1	C
ATOM	2346	O	ARG	B	87	79.058	-51.135	-37.591	1.00	87.56	MOL1	O
ATOM	2347	N	ALA	B	88	80.005	-52.549	-39.038	1.00	94.65	MOL1	N
ATOM	2348	CA	ALA	B	88	79.567	-51.769	-40.193	1.00	95.57	MOL1	C
ATOM	2349	CB	ALA	B	88	80.627	-51.802	-41.291	1.00	98.24	MOL1	C
ATOM	2350	C	ALA	B	88	78.236	-52.291	-40.725	1.00	95.75	MOL1	C
ATOM	2351	O	ALA	B	88	77.481	-51.559	-41.361	1.00	92.75	MOL1	O
ATOM	2352	N	GLU	B	89	77.953	-53.561	-40.462	1.00	96.30	MOL1	N
ATOM	2353	CA	GLU	B	89	76.707	-54.154	-40.905	1.00	97.62	MOL1	C
ATOM	2354	CB	GLU	B	89	76.835	-55.684	-40.919	1.00106.24	MOL1	C	
ATOM	2355	CG	GLU	B	89	77.211	-56.320	-39.581	1.00120.92	MOL1	C	
ATOM	2356	CD	GLU	B	89	76.088	-57.184	-38.988	1.00130.30	MOL1	C	
ATOM	2357	OE1	GLU	B	89	76.312	-57.809	-37.924	1.00131.94	MOL1	O	
ATOM	2358	OE2	GLU	B	89	74.984	-57.240	-39.583	1.00133.92	MOL1	O	
ATOM	2359	C	GLU	B	89	75.562	-53.700	-39.989	1.00	94.40	MOL1	C
ATOM	2360	O	GLU	B	89	74.442	-54.207	-40.067	1.00	95.94	MOL1	O
ATOM	2361	N	ASP	B	90	75.848	-52.724	-39.131	1.00	89.39	MOL1	N
ATOM	2362	CA	ASP	B	90	74.857	-52.193	-38.199	1.00	83.27	MOL1	C
ATOM	2363	CB	ASP	B	90	75.499	-51.873	-36.842	1.00	85.32	MOL1	C
ATOM	2364	CG	ASP	B	90	75.718	-53.110	-35.974	1.00	91.03	MOL1	C
ATOM	2365	OD1	ASP	B	90	75.267	-54.217	-36.357	1.00	89.00	MOL1	O
ATOM	2366	OD2	ASP	B	90	76.340	-52.964	-34.894	1.00	88.62	MOL1	O
ATOM	2367	C	ASP	B	90	74.206	-50.924	-38.716	1.00	79.69	MOL1	C
ATOM	2368	O	ASP	B	90	73.295	-50.399	-38.088	1.00	78.86	MOL1	O
ATOM	2369	N	THR	B	91	74.686	-50.420	-39.848	1.00	78.76	MOL1	N
ATOM	2370	CA	THR	B	91	74.142	-49.194	-40.433	1.00	73.34	MOL1	C
ATOM	2371	CB	THR	B	91	74.872	-48.823	-41.706	1.00	68.24	MOL1	C
ATOM	2372	OG1	THR	B	91	76.279	-48.980	-41.516	1.00	69.85	MOL1	O
ATOM	2373	CG2	THR	B	91	74.572	-47.409	-42.073	1.00	62.10	MOL1	C
ATOM	2374	C	THR	B	91	72.679	-49.375	-40.808	1.00	76.36	MOL1	C
ATOM	2375	O	THR	B	91	72.315	-50.390	-41.410	1.00	81.79	MOL1	O
ATOM	2376	N	ALA	B	92	71.846	-48.395	-40.465	1.00	70.36	MOL1	N
ATOM	2377	CA	ALA	B	92	70.423	-48.463	-40.783	1.00	66.19	MOL1	C
ATOM	2378	CB	ALA	B	92	69.854	-49.814	-40.373	1.00	64.76	MOL1	C
ATOM	2379	C	ALA	B	92	69.651	-47.370	-40.081	1.00	64.77	MOL1	C
ATOM	2380	O	ALA	B	92	70.229	-46.506	-39.420	1.00	67.65	MOL1	O
ATOM	2381	N	VAL	B	93	68.334	-47.393	-40.250	1.00	60.04	MOL1	N
ATOM	2382	CA	VAL	B	93	67.507	-46.435	-39.555	1.00	54.68	MOL1	C
ATOM	2383	CB	VAL	B	93	66.386	-45.886	-40.390	1.00	52.41	MOL1	C
ATOM	2384	CG1	VAL	B	93	65.218	-45.538	-39.484	1.00	51.63	MOL1	C
ATOM	2385	CG2	VAL	B	93	66.852	-44.630	-41.082	1.00	54.11	MOL1	C
ATOM	2386	C	VAL	B	93	66.917	-47.182	-38.382	1.00	55.09	MOL1	C
ATOM	2387	O	VAL	B	93	66.327	-48.256	-38.529	1.00	53.60	MOL1	O
ATOM	2388	N	TYR	B	94	67.112	-46.622	-37.202	1.00	52.57	MOL1	N
ATOM	2389	CA	TYR	B	94	66.617	-47.261	-36.021	1.00	47.72	MOL1	C
ATOM	2390	CB	TYR	B	94	67.615	-47.108	-34.885	1.00	48.04	MOL1	C
ATOM	2391	CG	TYR	B	94	68.771	-48.070	-35.032	1.00	52.97	MOL1	C
ATOM	2392	CD1	TYR	B	94	69.714	-47.909	-36.045	1.00	58.49	MOL1	C
ATOM	2393	CE1	TYR	B	94	70.727	-48.831	-36.233	1.00	62.20	MOL1	C
ATOM	2394	CD2	TYR	B	94	68.880	-49.182	-34.209	1.00	50.31	MOL1	C
ATOM	2395	CE2	TYR	B	94	69.882	-50.112	-34.389	1.00	56.78	MOL1	C
ATOM	2396	CZ	TYR	B	94	70.802	-49.935	-35.401	1.00	64.78	MOL1	C
ATOM	2397	OH	TYR	B	94	71.788	-50.876	-35.585	1.00	67.91	MOL1	O
ATOM	2398	C	TYR	B	94	65.277	-46.716	-35.648	1.00	47.66	MOL1	C
ATOM	2399	O	TYR	B	94	65.106	-45.509	-35.519	1.00	47.18	MOL1	O
ATOM	2400	N	TYR	B	95	64.330	-47.642	-35.499	1.00	47.28	MOL1	N
ATOM	2401	CA	TYR	B	95	62.946	-47.356	-35.146	1.00	42.92	MOL1	C
ATOM	2402	CB	TYR	B	95	62.009	-48.074	-36.112	1.00	41.96	MOL1	C
ATOM	2403	CG	TYR	B	95	61.952	-47.495	-37.503	1.00	36.03	MOL1	C
ATOM	2404	CD1	TYR	B	95	62.216	-48.286	-38.610	1.00	31.42	MOL1	C
ATOM	2405	CE1	TYR	B	95	62.135	-47.770	-39.894	1.00	31.36	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2406	CD2	TYR	B	95	61.605	-46.169	-37.714	1.00	32.69	MOL1	C
ATOM	2407	CE2	TYR	B	95	61.523	-45.649	-38.990	1.00	30.52	MOL1	C
ATOM	2408	CZ	TYR	B	95	61.791	-46.452	-40.079	1.00	31.84	MOL1	C
ATOM	2409	OH	TYR	B	95	61.740	-45.936	-41.358	1.00	37.32	MOL1	O
ATOM	2410	C	TYR	B	95	62.565	-47.757	-33.716	1.00	44.74	MOL1	C
ATOM	2411	O	TYR	B	95	62.956	-48.813	-33.208	1.00	43.15	MOL1	O
ATOM	2412	N	CYS	B	96	61.769	-46.898	-33.096	1.00	42.45	MOL1	N
ATOM	2413	CA	CYS	B	96	61.280	-47.080	-31.742	1.00	48.18	MOL1	C
ATOM	2414	C	CYS	B	96	59.858	-47.591	-31.935	1.00	45.66	MOL1	C
ATOM	2415	O	CYS	B	96	59.094	-46.997	-32.686	1.00	52.35	MOL1	O
ATOM	2416	CB	CYS	B	96	61.289	-45.712	-31.041	1.00	56.99	MOL1	C
ATOM	2417	SG	CYS	B	96	60.788	-45.606	-29.285	1.00	75.20	MOL1	S
ATOM	2418	N	ALA	B	97	59.486	-48.680	-31.275	1.00	45.29	MOL1	N
ATOM	2419	CA	ALA	B	97	58.133	-49.219	-31.462	1.00	48.97	MOL1	C
ATOM	2420	CB	ALA	B	97	58.159	-50.387	-32.454	1.00	50.04	MOL1	C
ATOM	2421	C	ALA	B	97	57.430	-49.675	-30.198	1.00	51.55	MOL1	C
ATOM	2422	O	ALA	B	97	57.971	-50.473	-29.418	1.00	53.04	MOL1	O
ATOM	2423	N	SER	B	98	56.201	-49.201	-30.011	1.00	48.82	MOL1	N
ATOM	2424	CA	SER	B	98	55.446	-49.593	-28.830	1.00	49.76	MOL1	C
ATOM	2425	CB	SER	B	98	54.932	-48.364	-28.088	1.00	52.60	MOL1	C
ATOM	2426	OG	SER	B	98	53.682	-47.961	-28.593	1.00	57.72	MOL1	O
ATOM	2427	C	SER	B	98	54.279	-50.490	-29.191	1.00	48.56	MOL1	C
ATOM	2428	O	SER	B	98	53.865	-50.547	-30.337	1.00	56.57	MOL1	O
ATOM	2429	N	PRO	B	99	53.742	-51.225	-28.215	1.00	48.25	MOL1	N
ATOM	2430	CD	PRO	B	99	54.274	-51.498	-26.872	1.00	43.96	MOL1	C
ATOM	2431	CA	PRO	B	99	52.610	-52.100	-28.520	1.00	49.92	MOL1	C
ATOM	2432	CB	PRO	B	99	52.755	-53.200	-27.486	1.00	51.02	MOL1	C
ATOM	2433	CG	PRO	B	99	53.243	-52.431	-26.296	1.00	49.83	MOL1	C
ATOM	2434	C	PRO	B	99	51.284	-51.323	-28.417	1.00	49.50	MOL1	C
ATOM	2435	O	PRO	B	99	51.265	-50.148	-28.028	1.00	42.62	MOL1	O
ATOM	2436	N	PRO	B	100	50.164	-51.973	-28.766	1.00	49.50	MOL1	N
ATOM	2437	CD	PRO	B	100	50.098	-53.401	-29.117	1.00	51.43	MOL1	C
ATOM	2438	CA	PRO	B	100	48.817	-51.394	-28.741	1.00	51.65	MOL1	C
ATOM	2439	CB	PRO	B	100	47.961	-52.496	-29.362	1.00	47.03	MOL1	C
ATOM	2440	CG	PRO	B	100	48.628	-53.716	-28.901	1.00	49.55	MOL1	C
ATOM	2441	C	PRO	B	100	48.306	-50.961	-27.374	1.00	53.54	MOL1	C
ATOM	2442	O	PRO	B	100	48.489	-51.655	-26.386	1.00	51.78	MOL1	O
ATOM	2443	N	GLN	B	101	47.658	-49.799	-27.351	1.00	61.09	MOL1	N
ATOM	2444	CA	GLN	B	101	47.094	-49.205	-26.147	1.00	61.80	MOL1	C
ATOM	2445	CB	GLN	B	101	46.495	-47.829	-26.477	1.00	74.11	MOL1	C
ATOM	2446	CG	GLN	B	101	47.203	-47.058	-27.621	1.00	89.30	MOL1	C
ATOM	2447	CD	GLN	B	101	46.706	-47.425	-29.055	1.00	96.41	MOL1	C
ATOM	2448	OE1	GLN	B	101	46.819	-48.574	-29.511	1.00	84.58	MOL1	O
ATOM	2449	NE2	GLN	B	101	46.167	-46.427	-29.763	1.00	98.03	MOL1	N
ATOM	2450	C	GLN	B	101	46.026	-50.122	-25.538	1.00	61.51	MOL1	C
ATOM	2451	O	GLN	B	101	45.799	-50.078	-24.329	1.00	66.28	MOL1	O
ATOM	2452	N	TYR	B	102	45.340	-50.926	-26.355	1.00	57.93	MOL1	N
ATOM	2453	CA	TYR	B	102	44.368	-51.870	-25.795	1.00	58.68	MOL1	C
ATOM	2454	CB	TYR	B	102	43.306	-52.305	-26.814	1.00	59.50	MOL1	C
ATOM	2455	CG	TYR	B	102	43.723	-52.267	-28.270	1.00	67.62	MOL1	C
ATOM	2456	CD1	TYR	B	102	43.665	-53.410	-29.054	1.00	73.12	MOL1	C
ATOM	2457	CE1	TYR	B	102	44.086	-53.404	-30.379	1.00	70.43	MOL1	C
ATOM	2458	CD2	TYR	B	102	44.205	-51.104	-28.855	1.00	67.71	MOL1	C
ATOM	2459	CE2	TYR	B	102	44.629	-51.089	-30.179	1.00	70.68	MOL1	C
ATOM	2460	CZ	TYR	B	102	44.574	-52.244	-30.930	1.00	68.95	MOL1	C
ATOM	2461	OH	TYR	B	102	45.076	-52.264	-32.208	1.00	70.49	MOL1	O
ATOM	2462	C	TYR	B	102	45.219	-53.056	-25.344	1.00	62.41	MOL1	C
ATOM	2463	O	TYR	B	102	46.342	-52.854	-24.889	1.00	72.10	MOL1	O
ATOM	2464	N	TYR	B	103	44.734	-54.282	-25.442	1.00	56.35	MOL1	N
ATOM	2465	CA	TYR	B	103	45.562	-55.419	-25.004	1.00	55.06	MOL1	C
ATOM	2466	CB	TYR	B	103	46.477	-55.850	-26.139	1.00	39.42	MOL1	C
ATOM	2467	CG	TYR	B	103	45.779	-56.647	-27.189	1.00	40.53	MOL1	C
ATOM	2468	CD1	TYR	B	103	45.431	-57.966	-26.965	1.00	40.77	MOL1	C
ATOM	2469	CE1	TYR	B	103	44.739	-58.689	-27.913	1.00	39.01	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2470	CD2	TYR	B	103	45.421	-56.073	-28.389	1.00	37.07	MOL1	C
ATOM	2471	CE2	TYR	B	103	44.725	-56.785	-29.340	1.00	37.65	MOL1	C
ATOM	2472	CZ	TYR	B	103	44.385	-58.092	-29.098	1.00	40.30	MOL1	C
ATOM	2473	OH	TYR	B	103	43.664	-58.795	-30.040	1.00	45.78	MOL1	O
ATOM	2474	C	TYR	B	103	46.438	-55.312	-23.731	1.00	61.14	MOL1	C
ATOM	2475	O	TYR	B	103	45.971	-55.407	-22.597	1.00	62.53	MOL1	O
ATOM	2476	N	GLU	B	104	47.731	-55.126	-23.953	1.00	71.54	MOL1	N
ATOM	2477	CA	GLU	B	104	48.736	-55.073	-22.892	1.00	75.42	MOL1	C
ATOM	2478	CB	GLU	B	104	48.692	-53.817	-22.049	1.00	78.09	MOL1	C
ATOM	2479	CG	GLU	B	104	50.036	-53.557	-21.290	1.00	87.24	MOL1	C
ATOM	2480	CD	GLU	B	104	50.854	-54.815	-20.883	1.00	86.28	MOL1	C
ATOM	2481	OE1	GLU	B	104	51.228	-55.640	-21.750	1.00	77.83	MOL1	O
ATOM	2482	OE2	GLU	B	104	51.150	-54.965	-19.675	1.00	86.79	MOL1	O
ATOM	2483	C	GLU	B	104	48.567	-56.198	-21.930	1.00	76.64	MOL1	C
ATOM	2484	O	GLU	B	104	48.897	-57.337	-22.238	1.00	78.00	MOL1	O
ATOM	2485	N	GLY	B	105	48.055	-55.851	-20.751	1.00	82.01	MOL1	N
ATOM	2486	CA	GLY	B	105	47.872	-56.824	-19.687	1.00	92.10	MOL1	C
ATOM	2487	C	GLY	B	105	49.226	-57.315	-19.172	1.00	95.69	MOL1	C
ATOM	2488	O	GLY	B	105	49.336	-57.738	-18.017	1.00	97.30	MOL1	O
ATOM	2489	N	SER	B	106	50.234	-57.239	-20.055	1.00	91.89	MOL1	N
ATOM	2490	CA	SER	B	106	51.622	-57.640	-19.842	1.00	80.13	MOL1	C
ATOM	2491	CB	SER	B	106	51.757	-58.534	-18.624	1.00	86.39	MOL1	C
ATOM	2492	OG	SER	B	106	51.584	-57.772	-17.440	1.00	101.06	MOL1	O
ATOM	2493	C	SER	B	106	52.076	-58.392	-21.075	1.00	76.46	MOL1	C
ATOM	2494	O	SER	B	106	53.261	-58.468	-21.354	1.00	80.98	MOL1	O
ATOM	2495	N	ILE	B	107	51.106	-58.931	-21.808	1.00	72.52	MOL1	N
ATOM	2496	CA	ILE	B	107	51.317	-59.712	-23.026	1.00	69.30	MOL1	C
ATOM	2497	CB	ILE	B	107	50.163	-59.504	-24.009	1.00	63.37	MOL1	C
ATOM	2498	CG2	ILE	B	107	50.364	-60.364	-25.232	1.00	69.72	MOL1	C
ATOM	2499	CG1	ILE	B	107	48.850	-59.916	-23.365	1.00	57.52	MOL1	C
ATOM	2500	CD1	ILE	B	107	47.709	-59.969	-24.330	1.00	59.21	MOL1	C
ATOM	2501	C	ILE	B	107	52.626	-59.449	-23.762	1.00	75.37	MOL1	C
ATOM	2502	O	ILE	B	107	52.846	-58.365	-24.315	1.00	80.43	MOL1	O
ATOM	2503	N	TYR	B	108	53.491	-60.459	-23.799	1.00	76.32	MOL1	N
ATOM	2504	CA	TYR	B	108	54.787	-60.298	-24.446	1.00	70.22	MOL1	C
ATOM	2505	CB	TYR	B	108	55.791	-61.316	-23.879	1.00	72.00	MOL1	C
ATOM	2506	CG	TYR	B	108	57.129	-61.320	-24.581	1.00	68.39	MOL1	C
ATOM	2507	CD1	TYR	B	108	57.881	-60.166	-24.681	1.00	67.40	MOL1	C
ATOM	2508	CE1	TYR	B	108	59.066	-60.144	-25.388	1.00	68.09	MOL1	C
ATOM	2509	CD2	TYR	B	108	57.606	-62.465	-25.201	1.00	70.66	MOL1	C
ATOM	2510	CE2	TYR	B	108	58.787	-62.454	-25.910	1.00	73.27	MOL1	C
ATOM	2511	CZ	TYR	B	108	59.513	-61.286	-26.007	1.00	73.12	MOL1	C
ATOM	2512	OH	TYR	B	108	60.659	-61.241	-26.779	1.00	78.13	MOL1	O
ATOM	2513	C	TYR	B	108	54.763	-60.376	-25.966	1.00	63.70	MOL1	C
ATOM	2514	O	TYR	B	108	55.273	-59.478	-26.626	1.00	63.97	MOL1	O
ATOM	2515	N	ARG	B	109	54.155	-61.425	-26.510	1.00	56.91	MOL1	N
ATOM	2516	CA	ARG	B	109	54.105	-61.642	-27.958	1.00	58.47	MOL1	C
ATOM	2517	CB	ARG	B	109	53.480	-63.008	-28.221	1.00	69.08	MOL1	C
ATOM	2518	CG	ARG	B	109	53.583	-63.920	-27.003	1.00	81.72	MOL1	C
ATOM	2519	CD	ARG	B	109	54.439	-65.146	-27.246	1.00	89.25	MOL1	C
ATOM	2520	NE	ARG	B	109	54.686	-65.846	-25.985	1.00	103.95	MOL1	N
ATOM	2521	CZ	ARG	B	109	55.168	-67.084	-25.885	1.00	107.07	MOL1	C
ATOM	2522	NH1	ARG	B	109	55.456	-67.775	-26.983	1.00	108.09	MOL1	N
ATOM	2523	NH2	ARG	B	109	55.362	-67.629	-24.683	1.00	102.84	MOL1	N
ATOM	2524	C	ARG	B	109	53.410	-60.554	-28.790	1.00	52.75	MOL1	C
ATOM	2525	O	ARG	B	109	53.235	-60.691	-30.002	1.00	47.41	MOL1	O
ATOM	2526	N	LEU	B	110	53.047	-59.465	-28.126	1.00	50.30	MOL1	N
ATOM	2527	CA	LEU	B	110	52.395	-58.316	-28.750	1.00	46.56	MOL1	C
ATOM	2528	CB	LEU	B	110	52.212	-57.227	-27.706	1.00	47.54	MOL1	C
ATOM	2529	CG	LEU	B	110	50.759	-56.842	-27.519	1.00	54.43	MOL1	C
ATOM	2530	CD1	LEU	B	110	49.916	-58.104	-27.459	1.00	59.21	MOL1	C
ATOM	2531	CD2	LEU	B	110	50.610	-56.026	-26.262	1.00	47.23	MOL1	C
ATOM	2532	C	LEU	B	110	53.118	-57.698	-29.944	1.00	45.48	MOL1	C
ATOM	2533	O	LEU	B	110	54.291	-57.357	-29.876	1.00	46.46	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	2534	N	TRP	B	111	52.399	-57.530	-31.040	1.00	48.24	MOL1	N
ATOM	2535	CA	TRP	B	111	52.964	-56.916	-32.237	1.00	48.84	MOL1	C
ATOM	2536	CB	TRP	B	111	51.964	-57.012	-33.391	1.00	48.00	MOL1	C
ATOM	2537	CG	TRP	B	111	50.647	-56.428	-33.029	1.00	46.57	MOL1	C
ATOM	2538	CD2	TRP	B	111	49.580	-57.099	-32.362	1.00	50.74	MOL1	C
ATOM	2539	CE2	TRP	B	111	48.584	-56.150	-32.102	1.00	52.04	MOL1	C
ATOM	2540	CE3	TRP	B	111	49.373	-58.414	-31.956	1.00	54.75	MOL1	C
ATOM	2541	CD1	TRP	B	111	50.262	-55.132	-33.152	1.00	51.34	MOL1	C
ATOM	2542	NE1	TRP	B	111	49.018	-54.949	-32.593	1.00	52.39	MOL1	N
ATOM	2543	CZ2	TRP	B	111	47.406	-56.477	-31.454	1.00	60.95	MOL1	C
ATOM	2544	CZ3	TRP	B	111	48.203	-58.732	-31.314	1.00	55.14	MOL1	C
ATOM	2545	CH2	TRP	B	111	47.237	-57.776	-31.069	1.00	56.14	MOL1	C
ATOM	2546	C	TRP	B	111	53.129	-55.463	-31.863	1.00	50.24	MOL1	C
ATOM	2547	O	TRP	B	111	53.102	-55.116	-30.673	1.00	55.63	MOL1	O
ATOM	2548	N	PHE	B	112	53.309	-54.598	-32.851	1.00	46.77	MOL1	N
ATOM	2549	CA	PHE	B	112	53.379	-53.205	-32.490	1.00	45.05	MOL1	C
ATOM	2550	CB	PHE	B	112	54.753	-52.826	-31.905	1.00	54.59	MOL1	C
ATOM	2551	CG	PHE	B	112	55.953	-53.481	-32.564	1.00	57.92	MOL1	C
ATOM	2552	CD1	PHE	B	112	56.749	-54.370	-31.842	1.00	62.59	MOL1	C
ATOM	2553	CD2	PHE	B	112	56.354	-53.130	-33.825	1.00	48.83	MOL1	C
ATOM	2554	CE1	PHE	B	112	57.913	-54.882	-32.363	1.00	51.33	MOL1	C
ATOM	2555	CE2	PHE	B	112	57.516	-53.645	-34.337	1.00	55.91	MOL1	C
ATOM	2556	CZ	PHE	B	112	58.297	-54.525	-33.595	1.00	49.90	MOL1	C
ATOM	2557	C	PHE	B	112	52.935	-52.155	-33.470	1.00	42.66	MOL1	C
ATOM	2558	O	PHE	B	112	53.405	-52.088	-34.608	1.00	43.22	MOL1	O
ATOM	2559	N	ALA	B	113	51.977	-51.358	-32.997	1.00	39.22	MOL1	N
ATOM	2560	CA	ALA	B	113	51.449	-50.220	-33.736	1.00	40.32	MOL1	C
ATOM	2561	CB	ALA	B	113	50.021	-49.963	-33.398	1.00	42.03	MOL1	C
ATOM	2562	C	ALA	B	113	52.290	-49.105	-33.185	1.00	39.72	MOL1	C
ATOM	2563	O	ALA	B	113	52.953	-49.271	-32.180	1.00	43.81	MOL1	O
ATOM	2564	N	HIS	B	114	52.277	-47.958	-33.824	1.00	44.26	MOL1	N
ATOM	2565	CA	HIS	B	114	53.095	-46.866	-33.327	1.00	47.45	MOL1	C
ATOM	2566	CB	HIS	B	114	52.703	-46.561	-31.895	1.00	47.23	MOL1	C
ATOM	2567	CG	HIS	B	114	51.233	-46.414	-31.723	1.00	51.11	MOL1	C
ATOM	2568	CD2	HIS	B	114	50.310	-45.801	-32.496	1.00	58.42	MOL1	C
ATOM	2569	ND1	HIS	B	114	50.543	-47.002	-30.688	1.00	54.21	MOL1	N
ATOM	2570	CE1	HIS	B	114	49.254	-46.761	-30.832	1.00	58.58	MOL1	C
ATOM	2571	NE2	HIS	B	114	49.086	-46.035	-31.922	1.00	67.53	MOL1	N
ATOM	2572	C	HIS	B	114	54.597	-47.136	-33.424	1.00	46.61	MOL1	C
ATOM	2573	O	HIS	B	114	55.181	-47.914	-32.653	1.00	39.62	MOL1	O
ATOM	2574	N	TRP	B	115	55.190	-46.471	-34.410	1.00	46.04	MOL1	N
ATOM	2575	CA	TRP	B	115	56.600	-46.539	-34.686	1.00	43.95	MOL1	C
ATOM	2576	CB	TRP	B	115	56.829	-47.107	-36.088	1.00	43.82	MOL1	C
ATOM	2577	CG	TRP	B	115	56.477	-48.548	-36.286	1.00	39.43	MOL1	C
ATOM	2578	CD2	TRP	B	115	57.369	-49.604	-36.671	1.00	41.48	MOL1	C
ATOM	2579	CE2	TRP	B	115	56.605	-50.784	-36.769	1.00	38.25	MOL1	C
ATOM	2580	CE3	TRP	B	115	58.737	-49.665	-36.941	1.00	37.30	MOL1	C
ATOM	2581	CD1	TRP	B	115	55.253	-49.112	-36.171	1.00	41.90	MOL1	C
ATOM	2582	NE1	TRP	B	115	55.313	-50.459	-36.460	1.00	37.95	MOL1	N
ATOM	2583	CZ2	TRP	B	115	57.162	-52.007	-37.122	1.00	29.39	MOL1	C
ATOM	2584	CZ3	TRP	B	115	59.283	-50.880	-37.291	1.00	37.81	MOL1	C
ATOM	2585	CH2	TRP	B	115	58.497	-52.035	-37.377	1.00	28.35	MOL1	C
ATOM	2586	C	TRP	B	115	57.033	-45.077	-34.653	1.00	44.33	MOL1	C
ATOM	2587	O	TRP	B	115	56.209	-44.188	-34.870	1.00	47.44	MOL1	O
ATOM	2588	N	GLY	B	116	58.306	-44.820	-34.376	1.00	42.65	MOL1	N
ATOM	2589	CA	GLY	B	116	58.788	-43.451	-34.384	1.00	44.00	MOL1	C
ATOM	2590	C	GLY	B	116	59.147	-43.119	-35.819	1.00	47.25	MOL1	C
ATOM	2591	O	GLY	B	116	58.853	-43.902	-36.710	1.00	48.39	MOL1	O
ATOM	2592	N	GLN	B	117	59.763	-41.973	-36.075	1.00	53.34	MOL1	N
ATOM	2593	CA	GLN	B	117	60.145	-41.652	-37.449	1.00	55.82	MOL1	C
ATOM	2594	CB	GLN	B	117	60.268	-40.147	-37.671	1.00	63.13	MOL1	C
ATOM	2595	CG	GLN	B	117	61.399	-39.485	-36.898	1.00	80.29	MOL1	C
ATOM	2596	CD	GLN	B	117	61.066	-39.298	-35.429	1.00	90.29	MOL1	C
ATOM	2597	OE1	GLN	B	117	60.009	-38.752	-35.086	1.00	91.75	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	2598	NE2	GLN	B	117	61.968	-39.739	-34.551	1.00	90.06	MOL1	N
ATOM	2599	C	GLN	B	117	61.490	-42.306	-37.710	1.00	52.56	MOL1	C
ATOM	2600	O	GLN	B	117	61.863	-42.539	-38.852	1.00	53.79	MOL1	O
ATOM	2601	N	GLY	B	118	62.212	-42.596	-36.632	1.00	52.43	MOL1	N
ATOM	2602	CA	GLY	B	118	63.508	-43.246	-36.736	1.00	53.65	MOL1	C
ATOM	2603	C	GLY	B	118	64.687	-42.320	-36.967	1.00	52.41	MOL1	C
ATOM	2604	O	GLY	B	118	64.507	-41.207	-37.462	1.00	54.86	MOL1	O
ATOM	2605	N	THR	B	119	65.884	-42.769	-36.579	1.00	49.15	MOL1	N
ATOM	2606	CA	THR	B	119	67.110	-41.997	-36.793	1.00	49.60	MOL1	C
ATOM	2607	CB	THR	B	119	67.827	-41.574	-35.514	1.00	49.83	MOL1	C
ATOM	2608	OG1	THR	B	119	67.548	-42.508	-34.471	1.00	53.93	MOL1	O
ATOM	2609	CG2	THR	B	119	67.453	-40.166	-35.136	1.00	53.96	MOL1	C
ATOM	2610	C	THR	B	119	68.119	-42.816	-37.554	1.00	50.51	MOL1	C
ATOM	2611	O	THR	B	119	68.283	-44.019	-37.318	1.00	47.34	MOL1	O
ATOM	2612	N	LEU	B	120	68.825	-42.131	-38.442	1.00	48.83	MOL1	N
ATOM	2613	CA	LEU	B	120	69.820	-42.761	-39.274	0.50	49.21	MOL1	C
ATOM	2614	CB	LEU	B	120	70.031	-41.891	-40.498	1.00	48.65	MOL1	C
ATOM	2615	CG	LEU	B	120	71.120	-42.347	-41.453	1.00	46.65	MOL1	C
ATOM	2616	CD1	LEU	B	120	71.069	-43.865	-41.702	1.00	30.50	MOL1	C
ATOM	2617	CD2	LEU	B	120	70.940	-41.538	-42.727	1.00	53.75	MOL1	C
ATOM	2618	C	LEU	B	120	71.137	-42.968	-38.554	1.00	46.13	MOL1	C
ATOM	2619	O	LEU	B	120	71.641	-42.058	-37.916	1.00	48.24	MOL1	O
ATOM	2620	N	VAL	B	121	71.696	-44.164	-38.670	1.00	44.98	MOL1	N
ATOM	2621	CA	VAL	B	121	72.966	-44.463	-38.034	1.00	51.17	MOL1	C
ATOM	2622	CB	VAL	B	121	72.765	-45.379	-36.821	1.00	51.60	MOL1	C
ATOM	2623	CG1	VAL	B	121	74.104	-45.701	-36.172	1.00	40.79	MOL1	C
ATOM	2624	CG2	VAL	B	121	71.847	-44.700	-35.836	1.00	49.63	MOL1	C
ATOM	2625	C	VAL	B	121	73.879	-45.136	-39.046	1.00	56.48	MOL1	C
ATOM	2626	O	VAL	B	121	73.668	-46.300	-39.410	1.00	58.82	MOL1	O
ATOM	2627	N	THR	B	122	74.890	-44.396	-39.503	1.00	59.17	MOL1	N
ATOM	2628	CA	THR	B	122	75.838	-44.905	-40.497	1.00	61.81	MOL1	C
ATOM	2629	CB	THR	B	122	75.924	-43.949	-41.736	1.00	52.31	MOL1	C
ATOM	2630	OG1	THR	B	122	75.576	-42.622	-41.342	1.00	46.25	MOL1	O
ATOM	2631	CG2	THR	B	122	74.970	-44.378	-42.848	1.00	52.37	MOL1	C
ATOM	2632	C	THR	B	122	77.259	-45.152	-39.970	1.00	67.95	MOL1	C
ATOM	2633	O	THR	B	122	78.011	-44.216	-39.694	1.00	72.78	MOL1	O
ATOM	2634	N	VAL	B	123	77.617	-46.423	-39.836	1.00	71.58	MOL1	N
ATOM	2635	CA	VAL	B	123	78.941	-46.804	-39.378	1.00	76.99	MOL1	C
ATOM	2636	CB	VAL	B	123	78.872	-48.098	-38.544	1.00	75.96	MOL1	C
ATOM	2637	CG1	VAL	B	123	78.099	-49.149	-39.286	1.00	86.41	MOL1	C
ATOM	2638	CG2	VAL	B	123	80.254	-48.607	-38.261	1.00	84.18	MOL1	C
ATOM	2639	C	VAL	B	123	79.872	-46.995	-40.592	1.00	81.61	MOL1	C
ATOM	2640	O	VAL	B	123	79.843	-48.030	-41.269	1.00	81.81	MOL1	O
ATOM	2641	N	SER	B	124	80.685	-45.974	-40.865	1.00	86.73	MOL1	N
ATOM	2642	CA	SER	B	124	81.627	-45.986	-41.986	1.00	90.91	MOL1	C
ATOM	2643	CB	SER	B	124	81.040	-45.209	-43.173	1.00	94.67	MOL1	C
ATOM	2644	OG	SER	B	124	81.931	-45.159	-44.277	1.00	93.43	MOL1	O
ATOM	2645	C	SER	B	124	82.956	-45.355	-41.572	1.00	92.08	MOL1	C
ATOM	2646	O	SER	B	124	82.978	-44.409	-40.783	1.00	94.13	MOL1	O
ATOM	2647	N	SER	B	125	84.058	-45.877	-42.110	1.00	90.43	MOL1	N
ATOM	2648	CA	SER	B	125	85.388	-45.366	-41.794	1.00	83.28	MOL1	C
ATOM	2649	CB	SER	B	125	86.423	-46.486	-41.903	1.00	79.81	MOL1	C
ATOM	2650	OG	SER	B	125	86.211	-47.259	-43.068	1.00	85.28	MOL1	O
ATOM	2651	C	SER	B	125	85.782	-44.194	-42.681	1.00	79.66	MOL1	C
ATOM	2652	O	SER	B	125	86.730	-43.481	-42.384	1.00	78.73	MOL1	O
ATOM	2653	N	ALA	B	126	85.044	-43.990	-43.763	1.00	79.96	MOL1	N
ATOM	2654	CA	ALA	B	126	85.318	-42.887	-44.675	1.00	81.43	MOL1	C
ATOM	2655	CB	ALA	B	126	84.326	-42.895	-45.809	1.00	86.30	MOL1	C
ATOM	2656	C	ALA	B	126	85.265	-41.548	-43.954	1.00	81.14	MOL1	C
ATOM	2657	O	ALA	B	126	84.682	-41.431	-42.875	1.00	82.37	MOL1	O
ATOM	2658	N	LYS	B	127	85.859	-40.535	-44.573	1.00	81.98	MOL1	N
ATOM	2659	CA	LYS	B	127	85.926	-39.206	-43.983	1.00	87.15	MOL1	C
ATOM	2660	CB	LYS	B	127	87.391	-38.794	-43.795	1.00	99.20	MOL1	C
ATOM	2661	CG	LYS	B	127	88.340	-39.923	-43.332	1.00	111.33	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2662	CD	LYS	B	127	88.734	-40.877	-44.484	1.00116.04	MOL1	C
ATOM	2663	CE	LYS	B	127	89.702	-41.978	-44.023	1.00114.55	MOL1	C
ATOM	2664	NZ	LYS	B	127	90.022	-42.962	-45.103	1.00107.62	MOL1	N
ATOM	2665	C	LYS	B	127	85.243	-38.193	-44.871	1.00 80.91	MOL1	C
ATOM	2666	O	LYS	B	127	85.237	-38.340	-46.079	1.00 79.56	MOL1	O
ATOM	2667	N	THR	B	128	84.683	-37.155	-44.267	1.00 79.13	MOL1	N
ATOM	2668	CA	THR	B	128	83.999	-36.115	-45.026	1.00 80.44	MOL1	C
ATOM	2669	CB	THR	B	128	83.662	-34.900	-44.123	1.00 87.75	MOL1	C
ATOM	2670	OG1	THR	B	128	83.157	-33.824	-44.930	1.00 91.00	MOL1	O
ATOM	2671	CG2	THR	B	128	84.906	-34.433	-43.354	1.00 95.92	MOL1	C
ATOM	2672	C	THR	B	128	84.809	-35.622	-46.228	1.00 73.65	MOL1	C
ATOM	2673	O	THR	B	128	85.880	-35.041	-46.066	1.00 73.18	MOL1	O
ATOM	2674	N	THR	B	129	84.277	-35.852	-47.428	1.00 67.55	MOL1	N
ATOM	2675	CA	THR	B	129	84.915	-35.451	-48.687	1.00 63.55	MOL1	C
ATOM	2676	CB	THR	B	129	85.295	-36.655	-49.546	1.00 55.93	MOL1	C
ATOM	2677	OG1	THR	B	129	86.154	-37.538	-48.824	1.00 47.85	MOL1	O
ATOM	2678	CG2	THR	B	129	85.970	-36.184	-50.808	1.00 52.38	MOL1	C
ATOM	2679	C	THR	B	129	83.945	-34.681	-49.578	1.00 69.74	MOL1	C
ATOM	2680	O	THR	B	129	82.822	-35.132	-49.801	1.00 72.74	MOL1	O
ATOM	2681	N	PRO	B	130	84.365	-33.534	-50.135	1.00 71.79	MOL1	N
ATOM	2682	CD	PRO	B	130	85.698	-32.910	-50.191	1.00 69.95	MOL1	C
ATOM	2683	CA	PRO	B	130	83.422	-32.813	-50.994	1.00 74.26	MOL1	C
ATOM	2684	CB	PRO	B	130	84.089	-31.461	-51.166	1.00 71.83	MOL1	C
ATOM	2685	CG	PRO	B	130	85.521	-31.858	-51.298	1.00 71.38	MOL1	C
ATOM	2686	C	PRO	B	130	83.356	-33.576	-52.310	1.00 75.56	MOL1	C
ATOM	2687	O	PRO	B	130	84.231	-34.384	-52.599	1.00 70.43	MOL1	O
ATOM	2688	N	PRO	B	131	82.327	-33.319	-53.130	1.00 79.47	MOL1	N
ATOM	2689	CD	PRO	B	131	81.168	-32.449	-52.863	1.00 85.88	MOL1	C
ATOM	2690	CA	PRO	B	131	82.155	-33.989	-54.414	1.00 77.67	MOL1	C
ATOM	2691	CB	PRO	B	131	80.657	-33.953	-54.607	1.00 76.78	MOL1	C
ATOM	2692	CG	PRO	B	131	80.355	-32.572	-54.162	1.00 79.89	MOL1	C
ATOM	2693	C	PRO	B	131	82.866	-33.286	-55.549	1.00 77.13	MOL1	C
ATOM	2694	O	PRO	B	131	83.061	-32.072	-55.528	1.00 78.86	MOL1	O
ATOM	2695	N	SER	B	132	83.243	-34.073	-56.545	1.00 76.12	MOL1	N
ATOM	2696	CA	SER	B	132	83.907	-33.569	-57.736	1.00 73.56	MOL1	C
ATOM	2697	CB	SER	B	132	85.007	-34.543	-58.161	1.00 73.15	MOL1	C
ATOM	2698	OG	SER	B	132	85.763	-34.980	-57.040	1.00 68.08	MOL1	O
ATOM	2699	C	SER	B	132	82.787	-33.547	-58.767	1.00 69.58	MOL1	C
ATOM	2700	O	SER	B	132	82.091	-34.534	-58.938	1.00 72.95	MOL1	O
ATOM	2701	N	VAL	B	133	82.588	-32.438	-59.452	1.00 63.51	MOL1	N
ATOM	2702	CA	VAL	B	133	81.497	-32.403	-60.407	1.00 60.40	MOL1	C
ATOM	2703	CB	VAL	B	133	80.504	-31.297	-60.066	1.00 63.33	MOL1	C
ATOM	2704	CG1	VAL	B	133	79.595	-31.022	-61.262	1.00 55.60	MOL1	C
ATOM	2705	CG2	VAL	B	133	79.703	-31.696	-58.852	1.00 63.03	MOL1	C
ATOM	2706	C	VAL	B	133	81.900	-32.224	-61.847	1.00 61.09	MOL1	C
ATOM	2707	O	VAL	B	133	82.502	-31.222	-62.217	1.00 70.14	MOL1	O
ATOM	2708	N	TYR	B	134	81.548	-33.196	-62.669	1.00 57.45	MOL1	N
ATOM	2709	CA	TYR	B	134	81.873	-33.138	-64.084	1.00 56.17	MOL1	C
ATOM	2710	CB	TYR	B	134	82.598	-34.411	-64.514	1.00 50.84	MOL1	C
ATOM	2711	CG	TYR	B	134	83.717	-34.851	-63.598	1.00 47.52	MOL1	C
ATOM	2712	CD1	TYR	B	134	84.846	-34.068	-63.410	1.00 53.56	MOL1	C
ATOM	2713	CE1	TYR	B	134	85.896	-34.481	-62.580	1.00 48.90	MOL1	C
ATOM	2714	CD2	TYR	B	134	83.656	-36.059	-62.937	1.00 47.93	MOL1	C
ATOM	2715	CE2	TYR	B	134	84.693	-36.477	-62.114	1.00 53.51	MOL1	C
ATOM	2716	CZ	TYR	B	134	85.812	-35.685	-61.939	1.00 50.11	MOL1	C
ATOM	2717	OH	TYR	B	134	86.847	-36.114	-61.130	1.00 54.69	MOL1	O
ATOM	2718	C	TYR	B	134	80.573	-33.020	-64.854	1.00 57.98	MOL1	C
ATOM	2719	O	TYR	B	134	79.548	-33.544	-64.437	1.00 66.11	MOL1	O
ATOM	2720	N	PRO	B	135	80.602	-32.350	-66.002	1.00 55.25	MOL1	N
ATOM	2721	CD	PRO	B	135	81.773	-31.604	-66.474	1.00 55.20	MOL1	C
ATOM	2722	CA	PRO	B	135	79.462	-32.118	-66.886	1.00 60.31	MOL1	C
ATOM	2723	CB	PRO	B	135	79.797	-30.778	-67.489	1.00 62.52	MOL1	C
ATOM	2724	CG	PRO	B	135	81.253	-30.947	-67.754	1.00 60.17	MOL1	C
ATOM	2725	C	PRO	B	135	79.298	-33.162	-67.980	1.00 61.19	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2726	O	PRO B 135	80.232	-33.431	-68.716	1.00	62.45	MOL1	O
ATOM	2727	N	LEU B 136	78.113	-33.739	-68.109	1.00	63.16	MOL1	N
ATOM	2728	CA	LEU B 136	77.899	-34.718	-69.164	1.00	64.19	MOL1	C
ATOM	2729	CB	LEU B 136	76.916	-35.804	-68.735	1.00	59.59	MOL1	C
ATOM	2730	CG	LEU B 136	77.425	-37.016	-67.963	1.00	54.68	MOL1	C
ATOM	2731	CD1	LEU B 136	78.316	-36.594	-66.824	1.00	51.35	MOL1	C
ATOM	2732	CD2	LEU B 136	76.233	-37.783	-67.448	1.00	50.74	MOL1	C
ATOM	2733	C	LEU B 136	77.348	-34.011	-70.387	1.00	67.26	MOL1	C
ATOM	2734	O	LEU B 136	76.183	-33.621	-70.421	1.00	67.76	MOL1	O
ATOM	2735	N	ALA B 137	78.196	-33.841	-71.391	1.00	71.61	MOL1	N
ATOM	2736	CA	ALA B 137	77.782	-33.184	-72.626	1.00	74.68	MOL1	C
ATOM	2737	CB	ALA B 137	78.735	-32.051	-72.966	1.00	78.07	MOL1	C
ATOM	2738	C	ALA B 137	77.775	-34.205	-73.744	1.00	76.08	MOL1	C
ATOM	2739	O	ALA B 137	78.578	-35.130	-73.745	1.00	79.25	MOL1	O
ATOM	2740	N	PRO B 138	76.874	-34.046	-74.718	1.00	77.50	MOL1	N
ATOM	2741	CD	PRO B 138	75.871	-32.985	-74.845	1.00	79.23	MOL1	C
ATOM	2742	CA	PRO B 138	76.783	-34.981	-75.841	1.00	82.58	MOL1	C
ATOM	2743	CB	PRO B 138	75.610	-34.451	-76.653	1.00	78.60	MOL1	C
ATOM	2744	CG	PRO B 138	75.611	-33.004	-76.329	1.00	85.88	MOL1	C
ATOM	2745	C	PRO B 138	78.048	-35.128	-76.659	1.00	89.70	MOL1	C
ATOM	2746	O	PRO B 138	79.032	-34.421	-76.451	1.00	90.70	MOL1	O
ATOM	2747	N	GLY B 139	78.024	-36.085	-77.574	1.00	98.32	MOL1	N
ATOM	2748	CA	GLY B 139	79.177	-36.318	-78.413	1.00113.85		MOL1	C
ATOM	2749	C	GLY B 139	78.962	-35.612	-79.730	1.00124.92		MOL1	C
ATOM	2750	O	GLY B 139	77.951	-34.928	-79.916	1.00126.20		MOL1	O
ATOM	2751	N	SER B 140	79.905	-35.768	-80.651	1.00133.36		MOL1	N
ATOM	2752	CA	SER B 140	79.789	-35.132	-81.953	1.00140.03		MOL1	C
ATOM	2753	CB	SER B 140	81.176	-34.925	-82.550	1.00140.08		MOL1	C
ATOM	2754	OG	SER B 140	82.012	-34.265	-81.617	1.00143.82		MOL1	O
ATOM	2755	C	SER B 140	78.940	-35.998	-82.879	1.00145.00		MOL1	C
ATOM	2756	O	SER B 140	79.256	-36.157	-84.058	1.00145.81		MOL1	O
ATOM	2757	N	ALA B 141	77.861	-36.555	-82.331	1.00150.83		MOL1	N
ATOM	2758	CA	ALA B 141	76.948	-37.411	-83.087	1.00154.88		MOL1	C
ATOM	2759	CB	ALA B 141	76.494	-38.575	-82.222	1.00155.02		MOL1	C
ATOM	2760	C	ALA B 141	75.734	-36.636	-83.591	1.00158.07		MOL1	C
ATOM	2761	O	ALA B 141	74.611	-37.145	-83.580	1.00156.84		MOL1	O
ATOM	2762	N	ALA B 142	75.979	-35.401	-84.024	1.00162.10		MOL1	N
ATOM	2763	CA	ALA B 142	74.948	-34.514	-84.556	1.00163.53		MOL1	C
ATOM	2764	CB	ALA B 142	74.538	-34.974	-85.957	1.00164.67		MOL1	C
ATOM	2765	C	ALA B 142	73.711	-34.363	-83.671	1.00162.99		MOL1	C
ATOM	2766	O	ALA B 142	73.661	-34.880	-82.550	1.00161.99		MOL1	O
ATOM	2767	N	GLN B 143	72.716	-33.648	-84.196	1.00162.28		MOL1	N
ATOM	2768	CA	GLN B 143	71.471	-33.386	-83.480	1.00160.11		MOL1	C
ATOM	2769	CB	GLN B 143	71.247	-31.877	-83.359	1.00156.48		MOL1	C
ATOM	2770	CG	GLN B 143	69.969	-31.516	-82.638	1.00150.39		MOL1	C
ATOM	2771	CD	GLN B 143	69.859	-32.222	-81.307	1.00146.35		MOL1	C
ATOM	2772	OE1	GLN B 143	70.743	-32.106	-80.459	1.00141.00		MOL1	O
ATOM	2773	NE2	GLN B 143	68.774	-32.966	-81.118	1.00145.15		MOL1	N
ATOM	2774	C	GLN B 143	70.235	-34.018	-84.115	1.00159.54		MOL1	C
ATOM	2775	O	GLN B 143	69.692	-33.505	-85.095	1.00158.40		MOL1	O
ATOM	2776	N	THR B 144	69.796	-35.135	-83.546	1.00159.59		MOL1	N
ATOM	2777	CA	THR B 144	68.609	-35.826	-84.032	1.00157.12		MOL1	C
ATOM	2778	CB	THR B 144	68.856	-37.357	-84.186	1.00155.18		MOL1	C
ATOM	2779	OG1	THR B 144	69.976	-37.584	-85.055	1.00147.12		MOL1	O
ATOM	2780	CG2	THR B 144	67.622	-38.043	-84.775	1.00151.91		MOL1	C
ATOM	2781	C	THR B 144	67.500	-35.579	-83.006	1.00156.85		MOL1	C
ATOM	2782	O	THR B 144	67.773	-35.375	-81.817	1.00157.41		MOL1	O
ATOM	2783	N	ASN B 145	66.255	-35.579	-83.474	1.00153.16		MOL1	N
ATOM	2784	CA	ASN B 145	65.106	-35.354	-82.604	1.00147.39		MOL1	C
ATOM	2785	CB	ASN B 145	65.129	-36.354	-81.432	1.00151.09		MOL1	C
ATOM	2786	CG	ASN B 145	63.833	-36.355	-80.623	1.00153.65		MOL1	C
ATOM	2787	OD1	ASN B 145	62.736	-36.473	-81.178	1.00155.14		MOL1	O
ATOM	2788	ND2	ASN B 145	63.960	-36.238	-79.304	1.00151.49		MOL1	N
ATOM	2789	C	ASN B 145	65.089	-33.911	-82.087	1.00139.28		MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2790	O	ASN B 145	66.083	-33.184	-82.169	1.00134.73	MOL1	O
ATOM	2791	N	SER B 146	63.942	-33.513	-81.556	1.00130.39	MOL1	N
ATOM	2792	CA	SER B 146	63.742	-32.174	-81.039	1.00121.32	MOL1	C
ATOM	2793	CB	SER B 146	62.252	-31.872	-81.046	1.00121.39	MOL1	C
ATOM	2794	OG	SER B 146	61.539	-32.977	-80.523	1.00119.93	MOL1	O
ATOM	2795	C	SER B 146	64.287	-31.963	-79.638	1.00116.49	MOL1	C
ATOM	2796	O	SER B 146	64.423	-30.829	-79.190	1.00117.95	MOL1	O
ATOM	2797	N	MET B 147	64.606	-33.049	-78.947	1.00109.47	MOL1	N
ATOM	2798	CA	MET B 147	65.106	-32.945	-77.581	1.00 99.96	MOL1	C
ATOM	2799	CB	MET B 147	64.206	-33.771	-76.668	1.00 98.20	MOL1	C
ATOM	2800	CG	MET B 147	62.771	-33.302	-76.684	1.00 91.48	MOL1	C
ATOM	2801	SD	MET B 147	62.722	-31.573	-76.210	1.00 87.10	MOL1	S
ATOM	2802	CE	MET B 147	62.533	-31.694	-74.406	1.00 83.70	MOL1	C
ATOM	2803	C	MET B 147	66.559	-33.372	-77.387	1.00 93.01	MOL1	C
ATOM	2804	O	MET B 147	67.080	-34.206	-78.129	1.00 93.00	MOL1	O
ATOM	2805	N	VAL B 148	67.212	-32.786	-76.388	1.00 82.04	MOL1	N
ATOM	2806	CA	VAL B 148	68.590	-33.132	-76.080	1.00 80.26	MOL1	C
ATOM	2807	CB	VAL B 148	69.568	-32.017	-76.436	1.00 73.03	MOL1	C
ATOM	2808	CG1	VAL B 148	69.355	-31.586	-77.857	1.00 79.27	MOL1	C
ATOM	2809	CG2	VAL B 148	69.407	-30.862	-75.481	1.00 74.82	MOL1	C
ATOM	2810	C	VAL B 148	68.728	-33.401	-74.592	1.00 83.56	MOL1	C
ATOM	2811	O	VAL B 148	68.186	-32.669	-73.762	1.00 88.38	MOL1	O
ATOM	2812	N	THR B 149	69.455	-34.457	-74.247	1.00 79.56	MOL1	N
ATOM	2813	CA	THR B 149	69.642	-34.792	-72.845	1.00 65.55	MOL1	C
ATOM	2814	CB	THR B 149	69.385	-36.266	-72.587	1.00 57.01	MOL1	C
ATOM	2815	OG1	THR B 149	68.077	-36.610	-73.051	1.00 50.89	MOL1	O
ATOM	2816	CG2	THR B 149	69.479	-36.550	-71.110	1.00 53.41	MOL1	C
ATOM	2817	C	THR B 149	71.048	-34.477	-72.394	1.00 60.64	MOL1	C
ATOM	2818	O	THR B 149	72.009	-34.912	-73.003	1.00 63.37	MOL1	O
ATOM	2819	N	LEU B 150	71.156	-33.698	-71.331	1.00 57.09	MOL1	N
ATOM	2820	CA	LEU B 150	72.446	-33.320	-70.776	1.00 56.17	MOL1	C
ATOM	2821	CB	LEU B 150	72.576	-31.801	-70.667	1.00 51.09	MOL1	C
ATOM	2822	CG	LEU B 150	72.751	-31.001	-71.961	1.00 48.86	MOL1	C
ATOM	2823	CD1	LEU B 150	72.505	-31.870	-73.200	1.00 42.57	MOL1	C
ATOM	2824	CD2	LEU B 150	71.794	-29.820	-71.914	1.00 45.75	MOL1	C
ATOM	2825	C	LEU B 150	72.550	-33.936	-69.402	1.00 56.81	MOL1	C
ATOM	2826	O	LEU B 150	71.550	-34.351	-68.825	1.00 56.89	MOL1	O
ATOM	2827	N	GLY B 151	73.758	-33.992	-68.867	1.00 57.09	MOL1	N
ATOM	2828	CA	GLY B 151	73.912	-34.609	-67.569	1.00 61.99	MOL1	C
ATOM	2829	C	GLY B 151	74.929	-33.945	-66.687	1.00 62.66	MOL1	C
ATOM	2830	O	GLY B 151	75.595	-32.999	-67.085	1.00 67.22	MOL1	O
ATOM	2831	N	CYS B 152	75.059	-34.462	-65.478	1.00 59.76	MOL1	N
ATOM	2832	CA	CYS B 152	75.987	-33.897	-64.547	1.00 60.32	MOL1	C
ATOM	2833	C	CYS B 152	76.411	-34.971	-63.561	1.00 59.67	MOL1	C
ATOM	2834	O	CYS B 152	75.625	-35.381	-62.715	1.00 62.50	MOL1	O
ATOM	2835	CB	CYS B 152	75.304	-32.742	-63.842	1.00 66.12	MOL1	C
ATOM	2836	SG	CYS B 152	76.409	-31.855	-62.723	1.00 92.70	MOL1	S
ATOM	2837	N	LEU B 153	77.655	-35.432	-63.677	1.00 55.92	MOL1	N
ATOM	2838	CA	LEU B 153	78.167	-36.475	-62.794	1.00 51.19	MOL1	C
ATOM	2839	CB	LEU B 153	79.177	-37.346	-63.533	1.00 46.56	MOL1	C
ATOM	2840	CG	LEU B 153	79.817	-38.482	-62.739	1.00 45.38	MOL1	C
ATOM	2841	CD1	LEU B 153	78.795	-39.162	-61.856	1.00 45.70	MOL1	C
ATOM	2842	CD2	LEU B 153	80.412	-39.469	-63.708	1.00 40.29	MOL1	C
ATOM	2843	C	LEU B 153	78.798	-35.905	-61.543	1.00 48.55	MOL1	C
ATOM	2844	O	LEU B 153	79.663	-35.045	-61.612	1.00 53.93	MOL1	O
ATOM	2845	N	VAL B 154	78.349	-36.401	-60.400	1.00 47.25	MOL1	N
ATOM	2846	CA	VAL B 154	78.826	-35.965	-59.098	1.00 45.87	MOL1	C
ATOM	2847	CB	VAL B 154	77.657	-35.631	-58.207	1.00 44.57	MOL1	C
ATOM	2848	CG1	VAL B 154	78.155	-35.068	-56.905	1.00 47.69	MOL1	C
ATOM	2849	CG2	VAL B 154	76.720	-34.683	-58.936	1.00 41.90	MOL1	C
ATOM	2850	C	VAL B 154	79.578	-37.129	-58.480	1.00 50.77	MOL1	C
ATOM	2851	O	VAL B 154	78.977	-38.021	-57.874	1.00 52.29	MOL1	O
ATOM	2852	N	LYS B 155	80.898	-37.103	-58.611	1.00 51.62	MOL1	N
ATOM	2853	CA	LYS B 155	81.726	-38.187	-58.128	1.00 47.10	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2854	CB	LYS	B	155	82.759	-38.509	-59.200	1.00	45.20	MOL1	C
ATOM	2855	CG	LYS	B	155	82.964	-39.984	-59.438	1.00	48.09	MOL1	C
ATOM	2856	CD	LYS	B	155	83.884	-40.241	-60.616	1.00	49.66	MOL1	C
ATOM	2857	CE	LYS	B	155	83.733	-41.672	-61.098	1.00	53.64	MOL1	C
ATOM	2858	NZ	LYS	B	155	83.873	-42.644	-59.971	1.00	57.44	MOL1	N
ATOM	2859	C	LYS	B	155	82.416	-38.002	-56.791	1.00	48.90	MOL1	C
ATOM	2860	O	LYS	B	155	82.639	-36.886	-56.327	1.00	46.39	MOL1	O
ATOM	2861	N	GLY	B	156	82.741	-39.140	-56.189	1.00	55.33	MOL1	N
ATOM	2862	CA	GLY	B	156	83.435	-39.204	-54.912	1.00	65.86	MOL1	C
ATOM	2863	C	GLY	B	156	83.200	-38.165	-53.833	1.00	69.92	MOL1	C
ATOM	2864	O	GLY	B	156	84.041	-37.293	-53.618	1.00	77.50	MOL1	O
ATOM	2865	N	TYR	B	157	82.068	-38.264	-53.142	1.00	70.11	MOL1	N
ATOM	2866	CA	TYR	B	157	81.761	-37.336	-52.063	1.00	64.80	MOL1	C
ATOM	2867	CB	TYR	B	157	80.689	-36.337	-52.476	1.00	59.00	MOL1	C
ATOM	2868	CG	TYR	B	157	79.327	-36.949	-52.703	1.00	56.79	MOL1	C
ATOM	2869	CD1	TYR	B	157	78.771	-37.001	-53.974	1.00	54.06	MOL1	C
ATOM	2870	CE1	TYR	B	157	77.503	-37.508	-54.172	1.00	57.42	MOL1	C
ATOM	2871	CD2	TYR	B	157	78.574	-37.433	-51.636	1.00	53.29	MOL1	C
ATOM	2872	CE2	TYR	B	157	77.309	-37.942	-51.826	1.00	53.49	MOL1	C
ATOM	2873	CZ	TYR	B	157	76.775	-37.974	-53.093	1.00	54.99	MOL1	C
ATOM	2874	OH	TYR	B	157	75.499	-38.445	-53.273	1.00	54.48	MOL1	O
ATOM	2875	C	TYR	B	157	81.267	-38.141	-50.886	1.00	63.04	MOL1	C
ATOM	2876	O	TYR	B	157	80.821	-39.272	-51.039	1.00	59.06	MOL1	O
ATOM	2877	N	PHE	B	158	81.346	-37.548	-49.708	1.00	69.10	MOL1	N
ATOM	2878	CA	PHE	B	158	80.910	-38.216	-48.493	1.00	74.39	MOL1	C
ATOM	2879	CB	PHE	B	158	81.953	-39.236	-48.058	1.00	65.26	MOL1	C
ATOM	2880	CG	PHE	B	158	81.537	-40.048	-46.880	1.00	64.19	MOL1	C
ATOM	2881	CD1	PHE	B	158	81.138	-41.365	-47.036	1.00	72.15	MOL1	C
ATOM	2882	CD2	PHE	B	158	81.528	-39.500	-45.619	1.00	57.90	MOL1	C
ATOM	2883	CE1	PHE	B	158	80.736	-42.127	-45.947	1.00	68.39	MOL1	C
ATOM	2884	CE2	PHE	B	158	81.128	-40.250	-44.534	1.00	66.03	MOL1	C
ATOM	2885	CZ	PHE	B	158	80.732	-41.566	-44.698	1.00	64.34	MOL1	C
ATOM	2886	C	PHE	B	158	80.699	-37.205	-47.372	1.00	77.11	MOL1	C
ATOM	2887	O	PHE	B	158	81.484	-36.273	-47.214	1.00	76.37	MOL1	O
ATOM	2888	N	PRO	B	159	79.621	-37.374	-46.593	1.00	79.21	MOL1	N
ATOM	2889	CD	PRO	B	159	79.436	-36.783	-45.258	1.00	82.61	MOL1	C
ATOM	2890	CA	PRO	B	159	78.670	-38.466	-46.792	1.00	81.88	MOL1	C
ATOM	2891	CB	PRO	B	159	78.413	-38.939	-45.377	1.00	79.81	MOL1	C
ATOM	2892	CG	PRO	B	159	78.304	-37.633	-44.661	1.00	83.36	MOL1	C
ATOM	2893	C	PRO	B	159	77.401	-37.925	-47.440	1.00	83.67	MOL1	C
ATOM	2894	O	PRO	B	159	77.364	-36.787	-47.913	1.00	79.92	MOL1	O
ATOM	2895	N	GLU	B	160	76.361	-38.748	-47.469	1.00	84.54	MOL1	N
ATOM	2896	CA	GLU	B	160	75.104	-38.307	-48.032	1.00	83.10	MOL1	C
ATOM	2897	CB	GLU	B	160	74.082	-39.444	-47.971	1.00	85.56	MOL1	C
ATOM	2898	CG	GLU	B	160	74.270	-40.523	-49.046	1.00	82.66	MOL1	C
ATOM	2899	CD	GLU	B	160	73.359	-40.326	-50.260	1.00	85.85	MOL1	C
ATOM	2900	OE1	GLU	B	160	73.429	-39.260	-50.926	1.00	75.99	MOL1	O
ATOM	2901	OE2	GLU	B	160	72.565	-41.251	-50.541	1.00	87.30	MOL1	O
ATOM	2902	C	GLU	B	160	74.687	-37.133	-47.156	1.00	83.85	MOL1	C
ATOM	2903	O	GLU	B	160	75.079	-37.043	-46.002	1.00	91.45	MOL1	O
ATOM	2904	N	PRO	B	161	73.876	-36.225	-47.687	1.00	84.59	MOL1	N
ATOM	2905	CD	PRO	B	161	73.067	-35.272	-46.909	1.00	87.46	MOL1	C
ATOM	2906	CA	PRO	B	161	73.371	-36.300	-49.047	1.00	89.94	MOL1	C
ATOM	2907	CB	PRO	B	161	71.877	-36.223	-48.826	1.00	94.06	MOL1	C
ATOM	2908	CG	PRO	B	161	71.822	-35.061	-47.816	1.00	92.06	MOL1	C
ATOM	2909	C	PRO	B	161	73.854	-35.095	-49.828	1.00	89.06	MOL1	C
ATOM	2910	O	PRO	B	161	74.339	-34.119	-49.257	1.00	90.78	MOL1	O
ATOM	2911	N	VAL	B	162	73.706	-35.170	-51.140	1.00	84.16	MOL1	N
ATOM	2912	CA	VAL	B	162	74.078	-34.072	-51.996	1.00	81.00	MOL1	C
ATOM	2913	CB	VAL	B	162	75.002	-34.526	-53.121	1.00	79.53	MOL1	C
ATOM	2914	CG1	VAL	B	162	75.202	-33.410	-54.113	1.00	81.10	MOL1	C
ATOM	2915	CG2	VAL	B	162	76.316	-34.922	-52.553	1.00	79.59	MOL1	C
ATOM	2916	C	VAL	B	162	72.760	-33.631	-52.583	1.00	81.88	MOL1	C
ATOM	2917	O	VAL	B	162	71.836	-34.439	-52.701	1.00	83.89	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	2918	N	THR	B	163	72.657	-32.356	-52.935	1.00	79.62	MOL1	N
ATOM	2919	CA	THR	B	163	71.424	-31.850	-53.511	1.00	83.82	MOL1	C
ATOM	2920	CB	THR	B	163	70.814	-30.706	-52.668	1.00	88.23	MOL1	C
ATOM	2921	OG1	THR	B	163	71.513	-29.485	-52.941	1.00	92.89	MOL1	O
ATOM	2922	CG2	THR	B	163	70.906	-31.022	-51.178	1.00	90.95	MOL1	C
ATOM	2923	C	THR	B	163	71.715	-31.297	-54.890	1.00	82.59	MOL1	C
ATOM	2924	O	THR	B	163	72.513	-30.376	-55.037	1.00	83.05	MOL1	O
ATOM	2925	N	VAL	B	164	71.071	-31.855	-55.904	1.00	82.18	MOL1	N
ATOM	2926	CA	VAL	B	164	71.288	-31.372	-57.252	1.00	81.58	MOL1	C
ATOM	2927	CB	VAL	B	164	71.659	-32.497	-58.183	1.00	79.13	MOL1	C
ATOM	2928	CG1	VAL	B	164	71.828	-31.964	-59.589	1.00	80.19	MOL1	C
ATOM	2929	CG2	VAL	B	164	72.927	-33.140	-57.694	1.00	81.90	MOL1	C
ATOM	2930	C	VAL	B	164	70.059	-30.683	-57.793	1.00	85.73	MOL1	C
ATOM	2931	O	VAL	B	164	68.930	-31.037	-57.445	1.00	90.71	MOL1	O
ATOM	2932	N	THR	B	165	70.293	-29.690	-58.646	1.00	85.71	MOL1	N
ATOM	2933	CA	THR	B	165	69.223	-28.911	-59.254	1.00	86.99	MOL1	C
ATOM	2934	CB	THR	B	165	68.794	-27.760	-58.365	1.00	84.35	MOL1	C
ATOM	2935	OG1	THR	B	165	68.662	-26.588	-59.174	1.00	86.68	MOL1	O
ATOM	2936	CG2	THR	B	165	69.826	-27.504	-57.282	1.00	82.83	MOL1	C
ATOM	2937	C	THR	B	165	69.696	-28.297	-60.557	1.00	87.96	MOL1	C
ATOM	2938	O	THR	B	165	70.889	-28.119	-60.763	1.00	89.58	MOL1	O
ATOM	2939	N	TRP	B	166	68.764	-27.957	-61.436	1.00	89.74	MOL1	N
ATOM	2940	CA	TRP	B	166	69.156	-27.363	-62.703	1.00	95.35	MOL1	C
ATOM	2941	CB	TRP	B	166	68.700	-28.246	-63.870	1.00	95.27	MOL1	C
ATOM	2942	CG	TRP	B	166	69.333	-29.610	-63.827	1.00	92.11	MOL1	C
ATOM	2943	CD2	TRP	B	166	70.536	-30.013	-64.481	1.00	91.36	MOL1	C
ATOM	2944	CE2	TRP	B	166	70.811	-31.331	-64.076	1.00	90.40	MOL1	C
ATOM	2945	CE3	TRP	B	166	71.412	-29.386	-65.367	1.00	93.22	MOL1	C
ATOM	2946	CD1	TRP	B	166	68.934	-30.675	-63.077	1.00	91.33	MOL1	C
ATOM	2947	NE1	TRP	B	166	69.817	-31.714	-63.218	1.00	88.04	MOL1	N
ATOM	2948	CZ2	TRP	B	166	71.921	-32.029	-64.523	1.00	94.04	MOL1	C
ATOM	2949	CZ3	TRP	B	166	72.514	-30.079	-65.811	1.00	92.47	MOL1	C
ATOM	2950	CH2	TRP	B	166	72.760	-31.385	-65.390	1.00	95.29	MOL1	C
ATOM	2951	C	TRP	B	166	68.626	-25.945	-62.851	1.00	99.39	MOL1	C
ATOM	2952	O	TRP	B	166	67.432	-25.692	-62.691	1.00	105.82	MOL1	O
ATOM	2953	N	ASN	B	167	69.539	-25.026	-63.159	1.00	99.81	MOL1	N
ATOM	2954	CA	ASN	B	167	69.233	-23.606	-63.308	1.00	98.01	MOL1	C
ATOM	2955	CB	ASN	B	167	68.418	-23.362	-64.586	1.00	91.86	MOL1	C
ATOM	2956	CG	ASN	B	167	69.292	-23.352	-65.848	1.00	87.45	MOL1	C
ATOM	2957	OD1	ASN	B	167	70.279	-22.622	-65.929	1.00	83.06	MOL1	O
ATOM	2958	ND2	ASN	B	167	68.921	-24.153	-66.833	1.00	86.61	MOL1	N
ATOM	2959	C	ASN	B	167	68.531	-23.075	-62.051	1.00	97.63	MOL1	C
ATOM	2960	O	ASN	B	167	67.612	-22.263	-62.099	1.00	95.45	MOL1	O
ATOM	2961	N	SER	B	168	69.013	-23.571	-60.920	1.00	99.16	MOL1	N
ATOM	2962	CA	SER	B	168	68.530	-23.209	-59.605	1.00	103.13	MOL1	C
ATOM	2963	CB	SER	B	168	68.962	-21.781	-59.282	1.00	105.76	MOL1	C
ATOM	2964	OG	SER	B	168	70.379	-21.701	-59.186	1.00	104.13	MOL1	O
ATOM	2965	C	SER	B	168	67.034	-23.389	-59.391	1.00	105.80	MOL1	C
ATOM	2966	O	SER	B	168	66.469	-22.866	-58.430	1.00	112.60	MOL1	O
ATOM	2967	N	GLY	B	169	66.396	-24.151	-60.271	1.00	103.98	MOL1	N
ATOM	2968	CA	GLY	B	169	64.975	-24.395	-60.122	1.00	102.24	MOL1	C
ATOM	2969	C	GLY	B	169	64.203	-24.118	-61.390	1.00	101.31	MOL1	C
ATOM	2970	O	GLY	B	169	63.037	-24.491	-61.506	1.00	101.78	MOL1	O
ATOM	2971	N	SER	B	170	64.851	-23.459	-62.344	1.00	100.43	MOL1	N
ATOM	2972	CA	SER	B	170	64.206	-23.136	-63.610	1.00	103.82	MOL1	C
ATOM	2973	CB	SER	B	170	65.167	-22.362	-64.524	1.00	105.34	MOL1	C
ATOM	2974	OG	SER	B	170	65.513	-21.096	-63.976	1.00	106.93	MOL1	O
ATOM	2975	C	SER	B	170	63.739	-24.410	-64.312	1.00	103.24	MOL1	C
ATOM	2976	O	SER	B	170	62.668	-24.447	-64.916	1.00	104.85	MOL1	O
ATOM	2977	N	LEU	B	171	64.552	-25.454	-64.220	1.00	101.77	MOL1	N
ATOM	2978	CA	LEU	B	171	64.245	-26.737	-64.838	1.00	97.44	MOL1	C
ATOM	2979	CB	LEU	B	171	65.469	-27.234	-65.596	1.00	85.50	MOL1	C
ATOM	2980	CG	LEU	B	171	65.734	-26.597	-66.954	1.00	75.09	MOL1	C
ATOM	2981	CD1	LEU	B	171	65.330	-25.148	-66.967	1.00	81.51	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	2982	CD2	LEU	B	171	67.183	-26.741	-67.257	1.00	74.81	MOL1	C
ATOM	2983	C	LEU	B	171	63.859	-27.751	-63.774	1.00	100.19	MOL1	C
ATOM	2984	O	LEU	B	171	64.701	-28.165	-62.975	1.00	99.25	MOL1	O
ATOM	2985	N	SER	B	172	62.593	-28.153	-63.756	1.00	103.78	MOL1	N
ATOM	2986	CA	SER	B	172	62.139	-29.123	-62.766	1.00	111.40	MOL1	C
ATOM	2987	CB	SER	B	172	61.091	-28.490	-61.843	1.00	118.82	MOL1	C
ATOM	2988	OG	SER	B	172	60.013	-27.933	-62.582	1.00	129.27	MOL1	O
ATOM	2989	C	SER	B	172	61.560	-30.351	-63.450	1.00	110.58	MOL1	C
ATOM	2990	O	SER	B	172	61.656	-31.471	-62.938	1.00	109.57	MOL1	O
ATOM	2991	N	SER	B	173	60.966	-30.128	-64.615	1.00	109.96	MOL1	N
ATOM	2992	CA	SER	B	173	60.360	-31.200	-65.385	1.00	110.01	MOL1	C
ATOM	2993	CB	SER	B	173	59.115	-30.675	-66.105	1.00	115.15	MOL1	C
ATOM	2994	OG	SER	B	173	59.278	-29.312	-66.472	1.00	120.73	MOL1	O
ATOM	2995	C	SER	B	173	61.354	-31.773	-66.381	1.00	106.83	MOL1	C
ATOM	2996	O	SER	B	173	62.180	-31.047	-66.939	1.00	106.61	MOL1	O
ATOM	2997	N	GLY	B	174	61.272	-33.082	-66.594	1.00	103.41	MOL1	N
ATOM	2998	CA	GLY	B	174	62.182	-33.735	-67.519	1.00	98.00	MOL1	C
ATOM	2999	C	GLY	B	174	63.556	-33.909	-66.902	1.00	90.42	MOL1	C
ATOM	3000	O	GLY	B	174	64.568	-34.021	-67.598	1.00	90.12	MOL1	O
ATOM	3001	N	VAL	B	175	63.590	-33.928	-65.579	1.00	82.41	MOL1	N
ATOM	3002	CA	VAL	B	175	64.839	-34.086	-64.867	1.00	75.83	MOL1	C
ATOM	3003	CB	VAL	B	175	65.078	-32.923	-63.895	1.00	72.58	MOL1	C
ATOM	3004	CG1	VAL	B	175	65.923	-33.385	-62.725	1.00	68.11	MOL1	C
ATOM	3005	CG2	VAL	B	175	65.777	-31.797	-64.621	1.00	69.58	MOL1	C
ATOM	3006	C	VAL	B	175	64.865	-35.377	-64.087	1.00	73.80	MOL1	C
ATOM	3007	O	VAL	B	175	63.891	-35.744	-63.435	1.00	76.99	MOL1	O
ATOM	3008	N	HIS	B	176	65.995	-36.064	-64.164	1.00	69.57	MOL1	N
ATOM	3009	CA	HIS	B	176	66.170	-37.313	-63.459	1.00	63.67	MOL1	C
ATOM	3010	CB	HIS	B	176	66.184	-38.477	-64.440	1.00	59.02	MOL1	C
ATOM	3011	CG	HIS	B	176	64.846	-38.786	-65.024	1.00	54.57	MOL1	C
ATOM	3012	CD2	HIS	B	176	64.443	-38.915	-66.310	1.00	56.32	MOL1	C
ATOM	3013	ND1	HIS	B	176	63.741	-39.040	-64.245	1.00	47.59	MOL1	N
ATOM	3014	CE1	HIS	B	176	62.712	-39.314	-65.028	1.00	57.73	MOL1	C
ATOM	3015	NE2	HIS	B	176	63.111	-39.245	-66.286	1.00	55.09	MOL1	N
ATOM	3016	C	HIS	B	176	67.473	-37.301	-62.687	1.00	60.01	MOL1	C
ATOM	3017	O	HIS	B	176	68.550	-37.359	-63.277	1.00	63.17	MOL1	O
ATOM	3018	N	THR	B	177	67.377	-37.199	-61.369	1.00	49.33	MOL1	N
ATOM	3019	CA	THR	B	177	68.564	-37.228	-60.542	1.00	44.72	MOL1	C
ATOM	3020	CB	THR	B	177	68.535	-36.154	-59.466	1.00	44.70	MOL1	C
ATOM	3021	OG1	THR	B	177	68.910	-34.901	-60.048	1.00	47.85	MOL1	O
ATOM	3022	CG2	THR	B	177	69.493	-36.513	-58.319	1.00	37.69	MOL1	C
ATOM	3023	C	THR	B	177	68.557	-38.587	-59.883	1.00	44.14	MOL1	C
ATOM	3024	O	THR	B	177	67.717	-38.863	-59.032	1.00	48.38	MOL1	O
ATOM	3025	N	PHE	B	178	69.496	-39.437	-60.276	1.00	36.90	MOL1	N
ATOM	3026	CA	PHE	B	178	69.556	-40.784	-59.757	1.00	35.45	MOL1	C
ATOM	3027	CB	PHE	B	178	70.324	-41.622	-60.749	1.00	34.29	MOL1	C
ATOM	3028	CG	PHE	B	178	69.831	-41.470	-62.154	1.00	34.63	MOL1	C
ATOM	3029	CD1	PHE	B	178	68.988	-42.419	-62.722	1.00	41.22	MOL1	C
ATOM	3030	CD2	PHE	B	178	70.168	-40.363	-62.898	1.00	31.17	MOL1	C
ATOM	3031	CE1	PHE	B	178	68.489	-42.261	-64.007	1.00	31.40	MOL1	C
ATOM	3032	CE2	PHE	B	178	69.671	-40.200	-64.187	1.00	36.21	MOL1	C
ATOM	3033	CZ	PHE	B	178	68.834	-41.147	-64.735	1.00	34.22	MOL1	C
ATOM	3034	C	PHE	B	178	70.133	-40.938	-58.361	1.00	38.82	MOL1	C
ATOM	3035	O	PHE	B	178	70.817	-40.066	-57.844	1.00	41.93	MOL1	O
ATOM	3036	N	PRO	B	179	69.823	-42.053	-57.717	1.00	39.92	MOL1	N
ATOM	3037	CD	PRO	B	179	68.718	-42.912	-58.147	1.00	42.26	MOL1	C
ATOM	3038	CA	PRO	B	179	70.266	-42.412	-56.374	1.00	47.21	MOL1	C
ATOM	3039	CB	PRO	B	179	69.563	-43.732	-56.129	1.00	46.52	MOL1	C
ATOM	3040	CG	PRO	B	179	68.292	-43.536	-56.842	1.00	52.05	MOL1	C
ATOM	3041	C	PRO	B	179	71.763	-42.577	-56.319	1.00	55.33	MOL1	C
ATOM	3042	O	PRO	B	179	72.362	-43.179	-57.207	1.00	63.13	MOL1	O
ATOM	3043	N	ALA	B	180	72.374	-42.053	-55.270	1.00	61.91	MOL1	N
ATOM	3044	CA	ALA	B	180	73.815	-42.181	-55.123	1.00	66.51	MOL1	C
ATOM	3045	CB	ALA	B	180	74.289	-41.361	-53.931	1.00	67.83	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3046	C	ALA	B	180	74.169	-43.653	-54.925	1.00	65.38	MOL1	C
ATOM	3047	O	ALA	B	180	73.400	-44.417	-54.350	1.00	64.94	MOL1	O
ATOM	3048	N	VAL	B	181	75.335	-44.050	-55.410	1.00	64.96	MOL1	N
ATOM	3049	CA	VAL	B	181	75.767	-45.420	-55.260	1.00	65.29	MOL1	C
ATOM	3050	CB	VAL	B	181	75.769	-46.121	-56.625	1.00	61.30	MOL1	C
ATOM	3051	CG1	VAL	B	181	76.559	-45.307	-57.626	1.00	64.46	MOL1	C
ATOM	3052	CG2	VAL	B	181	76.329	-47.508	-56.486	1.00	64.55	MOL1	C
ATOM	3053	C	VAL	B	181	77.149	-45.427	-54.610	1.00	66.47	MOL1	C
ATOM	3054	O	VAL	B	181	77.930	-44.495	-54.776	1.00	67.34	MOL1	O
ATOM	3055	N	LEU	B	182	77.437	-46.476	-53.857	1.00	69.39	MOL1	N
ATOM	3056	CA	LEU	B	182	78.691	-46.592	-53.137	1.00	78.26	MOL1	C
ATOM	3057	CB	LEU	B	182	78.452	-47.552	-51.971	1.00	70.74	MOL1	C
ATOM	3058	CG	LEU	B	182	79.035	-47.244	-50.592	1.00	65.11	MOL1	C
ATOM	3059	CD1	LEU	B	182	78.896	-45.782	-50.266	1.00	60.40	MOL1	C
ATOM	3060	CD2	LEU	B	182	78.320	-48.081	-49.560	1.00	60.68	MOL1	C
ATOM	3061	C	LEU	B	182	79.862	-47.069	-54.004	1.00	87.33	MOL1	C
ATOM	3062	O	LEU	B	182	79.929	-48.242	-54.360	1.00	91.59	MOL1	O
ATOM	3063	N	GLN	B	183	80.782	-46.166	-54.347	1.00	95.95	MOL1	N
ATOM	3064	CA	GLN	B	183	81.940	-46.550	-55.159	1.00103.35		MOL1	C
ATOM	3065	CB	GLN	B	183	82.149	-45.585	-56.339	1.00105.01		MOL1	C
ATOM	3066	CG	GLN	B	183	82.928	-46.219	-57.510	1.00108.00		MOL1	C
ATOM	3067	CD	GLN	B	183	83.172	-45.267	-58.686	1.00107.81		MOL1	C
ATOM	3068	OE1	GLN	B	183	82.239	-44.649	-59.208	1.00102.97		MOL1	O
ATOM	3069	NE2	GLN	B	183	84.433	-45.161	-59.114	1.00106.13		MOL1	N
ATOM	3070	C	GLN	B	183	83.192	-46.588	-54.282	1.00107.21		MOL1	C
ATOM	3071	O	GLN	B	183	83.994	-45.644	-54.255	1.00107.06		MOL1	O
ATOM	3072	N	SER	B	184	83.338	-47.696	-53.560	1.00108.45		MOL1	N
ATOM	3073	CA	SER	B	184	84.467	-47.900	-52.670	1.00106.07		MOL1	C
ATOM	3074	CB	SER	B	184	85.754	-48.042	-53.491	1.00109.58		MOL1	C
ATOM	3075	OG	SER	B	184	85.668	-49.151	-54.380	1.00107.72		MOL1	O
ATOM	3076	C	SER	B	184	84.577	-46.756	-51.664	1.00102.55		MOL1	C
ATOM	3077	O	SER	B	184	85.286	-45.768	-51.876	1.00	98.16	MOL1	O
ATOM	3078	N	ASP	B	185	83.833	-46.908	-50.576	1.00	99.87	MOL1	N
ATOM	3079	CA	ASP	B	185	83.800	-45.945	-49.489	1.00	99.99	MOL1	C
ATOM	3080	CB	ASP	B	185	85.049	-46.132	-48.633	1.00113.23		MOL1	C
ATOM	3081	CG	ASP	B	185	85.294	-47.599	-48.287	1.00121.20		MOL1	C
ATOM	3082	OD1	ASP	B	185	84.360	-48.258	-47.771	1.00123.76		MOL1	O
ATOM	3083	OD2	ASP	B	185	86.417	-48.092	-48.537	1.00125.07		MOL1	O
ATOM	3084	C	ASP	B	185	83.642	-44.500	-49.939	1.00	93.27	MOL1	C
ATOM	3085	O	ASP	B	185	84.261	-43.592	-49.402	1.00	91.74	MOL1	O
ATOM	3086	N	LEU	B	186	82.783	-44.297	-50.926	1.00	89.70	MOL1	N
ATOM	3087	CA	LEU	B	186	82.510	-42.969	-51.455	1.00	86.69	MOL1	C
ATOM	3088	CB	LEU	B	186	83.707	-42.465	-52.251	1.00	88.84	MOL1	C
ATOM	3089	CG	LEU	B	186	84.700	-41.676	-51.407	1.00	89.92	MOL1	C
ATOM	3090	CD1	LEU	B	186	86.042	-41.580	-52.110	1.00	95.15	MOL1	C
ATOM	3091	CD2	LEU	B	186	84.116	-40.304	-51.137	1.00	92.37	MOL1	C
ATOM	3092	C	LEU	B	186	81.261	-42.961	-52.331	1.00	83.18	MOL1	C
ATOM	3093	O	LEU	B	186	81.013	-43.903	-53.083	1.00	80.46	MOL1	O
ATOM	3094	N	TYR	B	187	80.475	-41.892	-52.231	1.00	79.09	MOL1	N
ATOM	3095	CA	TYR	B	187	79.246	-41.781	-53.008	1.00	71.05	MOL1	C
ATOM	3096	CB	TYR	B	187	78.164	-41.040	-52.218	1.00	61.53	MOL1	C
ATOM	3097	CG	TYR	B	187	77.685	-41.764	-50.982	1.00	57.01	MOL1	C
ATOM	3098	CD1	TYR	B	187	77.217	-43.059	-51.049	1.00	55.02	MOL1	C
ATOM	3099	CE1	TYR	B	187	76.772	-43.715	-49.925	1.00	55.39	MOL1	C
ATOM	3100	CD2	TYR	B	187	77.693	-41.144	-49.751	1.00	61.70	MOL1	C
ATOM	3101	CE2	TYR	B	187	77.248	-41.797	-48.616	1.00	66.45	MOL1	C
ATOM	3102	CZ	TYR	B	187	76.790	-43.084	-48.709	1.00	63.73	MOL1	C
ATOM	3103	OH	TYR	B	187	76.358	-43.739	-47.574	1.00	69.10	MOL1	O
ATOM	3104	C	TYR	B	187	79.427	-41.100	-54.353	1.00	70.21	MOL1	C
ATOM	3105	O	TYR	B	187	80.110	-40.085	-54.474	1.00	70.77	MOL1	O
ATOM	3106	N	THR	B	188	78.791	-41.680	-55.362	1.00	69.39	MOL1	N
ATOM	3107	CA	THR	B	188	78.835	-41.170	-56.723	1.00	67.27	MOL1	C
ATOM	3108	CB	THR	B	188	79.666	-42.073	-57.625	1.00	69.30	MOL1	C
ATOM	3109	OG1	THR	B	188	81.015	-42.117	-57.148	1.00	79.26	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	3110	CG2	THR	B	188	79.631	-41.560	-59.049	1.00	66.69	MOL1	C
ATOM	3111	C	THR	B	188	77.423	-41.187	-57.269	1.00	63.71	MOL1	C
ATOM	3112	O	THR	B	188	76.751	-42.216	-57.202	1.00	65.03	MOL1	O
ATOM	3113	N	LEU	B	189	76.966	-40.062	-57.806	1.00	54.59	MOL1	N
ATOM	3114	CA	LEU	B	189	75.628	-40.017	-58.361	1.00	49.73	MOL1	C
ATOM	3115	CB	LEU	B	189	74.648	-39.449	-57.338	1.00	42.85	MOL1	C
ATOM	3116	CG	LEU	B	189	74.286	-37.964	-57.332	1.00	45.67	MOL1	C
ATOM	3117	CD1	LEU	B	189	73.527	-37.544	-58.587	1.00	38.70	MOL1	C
ATOM	3118	CD2	LEU	B	189	73.423	-37.721	-56.134	1.00	37.05	MOL1	C
ATOM	3119	C	LEU	B	189	75.625	-39.179	-59.619	1.00	50.85	MOL1	C
ATOM	3120	O	LEU	B	189	76.489	-38.333	-59.805	1.00	54.33	MOL1	O
ATOM	3121	N	SER	B	190	74.649	-39.424	-60.482	1.00	52.64	MOL1	N
ATOM	3122	CA	SER	B	190	74.530	-38.697	-61.735	1.00	54.20	MOL1	C
ATOM	3123	CB	SER	B	190	74.757	-39.646	-62.900	1.00	57.86	MOL1	C
ATOM	3124	OG	SER	B	190	73.943	-40.796	-62.755	1.00	67.10	MOL1	O
ATOM	3125	C	SER	B	190	73.143	-38.105	-61.849	1.00	54.39	MOL1	C
ATOM	3126	O	SER	B	190	72.240	-38.492	-61.119	1.00	54.55	MOL1	O
ATOM	3127	N	SER	B	191	72.972	-37.167	-62.769	1.00	55.30	MOL1	N
ATOM	3128	CA	SER	B	191	71.674	-36.547	-62.973	1.00	54.42	MOL1	C
ATOM	3129	CB	SER	B	191	71.467	-35.389	-62.014	1.00	54.05	MOL1	C
ATOM	3130	OG	SER	B	191	70.266	-34.717	-62.335	1.00	58.62	MOL1	O
ATOM	3131	C	SER	B	191	71.542	-36.039	-64.387	1.00	55.25	MOL1	C
ATOM	3132	O	SER	B	191	72.363	-35.252	-64.845	1.00	55.60	MOL1	O
ATOM	3133	N	SER	B	192	70.503	-36.496	-65.075	1.00	57.49	MOL1	N
ATOM	3134	CA	SER	B	192	70.266	-36.083	-66.447	1.00	61.32	MOL1	C
ATOM	3135	CB	SER	B	192	69.892	-37.274	-67.324	1.00	65.44	MOL1	C
ATOM	3136	OG	SER	B	192	68.551	-37.665	-67.081	1.00	73.00	MOL1	O
ATOM	3137	C	SER	B	192	69.132	-35.086	-66.492	1.00	59.32	MOL1	C
ATOM	3138	O	SER	B	192	68.349	-34.980	-65.556	1.00	58.01	MOL1	O
ATOM	3139	N	VAL	B	193	69.059	-34.361	-67.599	1.00	59.58	MOL1	N
ATOM	3140	CA	VAL	B	193	68.026	-33.364	-67.820	1.00	59.14	MOL1	C
ATOM	3141	CB	VAL	B	193	68.414	-31.991	-67.232	1.00	58.14	MOL1	C
ATOM	3142	CG1	VAL	B	193	69.794	-31.566	-67.710	1.00	50.78	MOL1	C
ATOM	3143	CG2	VAL	B	193	67.375	-30.971	-67.633	1.00	54.34	MOL1	C
ATOM	3144	C	VAL	B	193	67.775	-33.209	-69.307	1.00	60.40	MOL1	C
ATOM	3145	O	VAL	B	193	68.679	-32.894	-70.076	1.00	63.83	MOL1	O
ATOM	3146	N	THR	B	194	66.545	-33.448	-69.725	1.00	59.61	MOL1	N
ATOM	3147	CA	THR	B	194	66.239	-33.325	-71.133	1.00	67.96	MOL1	C
ATOM	3148	CB	THR	B	194	65.172	-34.333	-71.551	1.00	68.81	MOL1	C
ATOM	3149	OG1	THR	B	194	65.509	-35.610	-70.996	1.00	77.62	MOL1	O
ATOM	3150	CG2	THR	B	194	65.114	-34.466	-73.079	1.00	63.49	MOL1	C
ATOM	3151	C	THR	B	194	65.791	-31.904	-71.423	1.00	73.21	MOL1	C
ATOM	3152	O	THR	B	194	65.368	-31.179	-70.527	1.00	76.10	MOL1	O
ATOM	3153	N	VAL	B	195	65.883	-31.506	-72.684	1.00	76.41	MOL1	N
ATOM	3154	CA	VAL	B	195	65.545	-30.150	-73.068	1.00	74.34	MOL1	C
ATOM	3155	CB	VAL	B	195	66.631	-29.206	-72.555	1.00	66.37	MOL1	C
ATOM	3156	CG1	VAL	B	195	67.130	-28.335	-73.675	1.00	61.14	MOL1	C
ATOM	3157	CG2	VAL	B	195	66.110	-28.397	-71.401	1.00	63.66	MOL1	C
ATOM	3158	C	VAL	B	195	65.457	-30.016	-74.585	1.00	81.67	MOL1	C
ATOM	3159	O	VAL	B	195	66.125	-30.733	-75.325	1.00	83.13	MOL1	O
ATOM	3160	N	PRO	B	196	64.634	-29.081	-75.066	1.00	88.47	MOL1	N
ATOM	3161	CD	PRO	B	196	63.774	-28.181	-74.282	1.00	92.03	MOL1	C
ATOM	3162	CA	PRO	B	196	64.462	-28.854	-76.506	1.00	91.83	MOL1	C
ATOM	3163	CB	PRO	B	196	63.408	-27.750	-76.561	1.00	93.80	MOL1	C
ATOM	3164	CG	PRO	B	196	62.659	-27.902	-75.253	1.00	94.40	MOL1	C
ATOM	3165	C	PRO	B	196	65.763	-28.429	-77.180	1.00	94.22	MOL1	C
ATOM	3166	O	PRO	B	196	66.427	-27.493	-76.734	1.00	92.88	MOL1	O
ATOM	3167	N	SER	B	197	66.113	-29.115	-78.262	1.00	97.48	MOL1	N
ATOM	3168	CA	SER	B	197	67.334	-28.826	-79.007	1.00	100.32	MOL1	C
ATOM	3169	CB	SER	B	197	67.385	-29.693	-80.272	1.00	96.90	MOL1	C
ATOM	3170	OG	SER	B	197	66.139	-29.707	-80.948	1.00	94.23	MOL1	O
ATOM	3171	C	SER	B	197	67.478	-27.356	-79.377	1.00	104.09	MOL1	C
ATOM	3172	O	SER	B	197	68.592	-26.849	-79.514	1.00	104.50	MOL1	O
ATOM	3173	N	SER	B	198	66.347	-26.674	-79.533	1.00	109.43	MOL1	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	3174	CA	SER B 198	66.355	-25.263	-79.897	1.00110.51	MOL1 C
ATOM	3175	CB	SER B 198	64.976	-24.833	-80.411	1.00108.99	MOL1 C
ATOM	3176	OG	SER B 198	63.989	-24.930	-79.401	1.00111.15	MOL1 O
ATOM	3177	C	SER B 198	66.780	-24.372	-78.733	1.00109.23	MOL1 C
ATOM	3178	O	SER B 198	67.292	-23.275	-78.952	1.00110.24	MOL1 O
ATOM	3179	N	THR B 199	66.580	-24.848	-77.503	1.00108.30	MOL1 N
ATOM	3180	CA	THR B 199	66.951	-24.080	-76.310	1.00110.76	MOL1 C
ATOM	3181	CB	THR B 199	65.942	-24.276	-75.138	1.00113.30	MOL1 C
ATOM	3182	OG1	THR B 199	65.832	-25.667	-74.821	1.00114.54	MOL1 O
ATOM	3183	CG2	THR B 199	64.566	-23.722	-75.502	1.00118.95	MOL1 C
ATOM	3184	C	THR B 199	68.343	-24.413	-75.769	1.00108.82	MOL1 C
ATOM	3185	O	THR B 199	68.614	-24.202	-74.584	1.00105.85	MOL1 O
ATOM	3186	N	TRP B 200	69.208	-24.946	-76.633	1.00107.48	MOL1 N
ATOM	3187	CA	TRP B 200	70.586	-25.292	-76.269	1.00103.53	MOL1 C
ATOM	3188	CB	TRP B 200	70.656	-26.539	-75.387	1.00 95.81	MOL1 C
ATOM	3189	CG	TRP B 200	72.013	-26.735	-74.724	1.00 90.49	MOL1 C
ATOM	3190	CD2	TRP B 200	73.033	-27.677	-75.094	1.00 86.20	MOL1 C
ATOM	3191	CE2	TRP B 200	74.106	-27.515	-74.183	1.00 82.66	MOL1 C
ATOM	3192	CE3	TRP B 200	73.144	-28.641	-76.103	1.00 80.27	MOL1 C
ATOM	3193	CD1	TRP B 200	72.503	-26.059	-73.638	1.00 91.69	MOL1 C
ATOM	3194	NE1	TRP B 200	73.758	-26.523	-73.306	1.00 84.66	MOL1 N
ATOM	3195	CZ2	TRP B 200	75.265	-28.278	-74.254	1.00 77.42	MOL1 C
ATOM	3196	CZ3	TRP B 200	74.296	-29.397	-76.170	1.00 74.97	MOL1 C
ATOM	3197	CH2	TRP B 200	75.341	-29.213	-75.252	1.00 78.91	MOL1 C
ATOM	3198	C	TRP B 200	71.377	-25.572	-77.531	1.00106.26	MOL1 C
ATOM	3199	O	TRP B 200	70.889	-26.238	-78.443	1.00105.91	MOL1 O
ATOM	3200	N	PRO B 201	72.622	-25.080	-77.597	1.00109.15	MOL1 N
ATOM	3201	CD	PRO B 201	73.557	-25.484	-78.659	1.00106.75	MOL1 C
ATOM	3202	CA	PRO B 201	73.313	-24.290	-76.566	1.00110.89	MOL1 C
ATOM	3203	CB	PRO B 201	74.772	-24.323	-77.019	1.00108.78	MOL1 C
ATOM	3204	CG	PRO B 201	74.846	-25.553	-77.912	1.00108.54	MOL1 C
ATOM	3205	C	PRO B 201	72.801	-22.855	-76.450	1.00114.98	MOL1 C
ATOM	3206	O	PRO B 201	73.366	-22.051	-75.706	1.00115.76	MOL1 O
ATOM	3207	N	SER B 202	71.742	-22.545	-77.201	1.00117.80	MOL1 N
ATOM	3208	CA	SER B 202	71.126	-21.219	-77.212	1.00119.64	MOL1 C
ATOM	3209	CB	SER B 202	69.705	-21.322	-77.764	1.00117.95	MOL1 C
ATOM	3210	OG	SER B 202	69.691	-22.078	-78.964	1.00117.45	MOL1 O
ATOM	3211	C	SER B 202	71.098	-20.610	-75.812	1.00123.42	MOL1 C
ATOM	3212	O	SER B 202	71.941	-19.774	-75.476	1.00126.01	MOL1 O
ATOM	3213	N	GLU B 203	70.126	-21.013	-74.997	1.00125.06	MOL1 N
ATOM	3214	CA	GLU B 203	70.054	-20.503	-73.633	1.00127.20	MOL1 C
ATOM	3215	CB	GLU B 203	68.661	-20.722	-73.028	1.00132.57	MOL1 C
ATOM	3216	CG	GLU B 203	67.622	-19.666	-73.421	1.00136.08	MOL1 C
ATOM	3217	CD	GLU B 203	66.306	-19.821	-72.662	1.00139.23	MOL1 C
ATOM	3218	OE1	GLU B 203	65.553	-20.785	-72.933	1.00139.00	MOL1 O
ATOM	3219	OE2	GLU B 203	66.028	-18.977	-71.783	1.00141.09	MOL1 O
ATOM	3220	C	GLU B 203	71.115	-21.241	-72.820	1.00126.53	MOL1 C
ATOM	3221	O	GLU B 203	71.971	-21.915	-73.389	1.00125.59	MOL1 O
ATOM	3222	N	THR B 204	71.074	-21.118	-71.499	1.00127.33	MOL1 N
ATOM	3223	CA	THR B 204	72.072	-21.792	-70.672	1.00127.07	MOL1 C
ATOM	3224	CB	THR B 204	72.915	-20.775	-69.852	1.00131.21	MOL1 C
ATOM	3225	OG1	THR B 204	72.050	-19.947	-69.060	1.00133.18	MOL1 O
ATOM	3226	CG2	THR B 204	73.756	-19.902	-70.787	1.00131.27	MOL1 C
ATOM	3227	C	THR B 204	71.500	-22.841	-69.718	1.00124.11	MOL1 C
ATOM	3228	O	THR B 204	70.357	-22.739	-69.254	1.00125.30	MOL1 O
ATOM	3229	N	VAL B 205	72.318	-23.854	-69.440	1.00116.10	MOL1 N
ATOM	3230	CA	VAL B 205	71.960	-24.957	-68.553	1.00105.02	MOL1 C
ATOM	3231	CB	VAL B 205	71.807	-26.267	-69.329	1.00 98.74	MOL1 C
ATOM	3232	CG1	VAL B 205	70.477	-26.318	-70.020	1.00 96.87	MOL1 C
ATOM	3233	CG2	VAL B 205	72.917	-26.371	-70.356	1.00 94.57	MOL1 C
ATOM	3234	C	VAL B 205	73.104	-25.154	-67.582	1.00100.78	MOL1 C
ATOM	3235	O	VAL B 205	74.244	-25.310	-67.998	1.00 99.79	MOL1 O
ATOM	3236	N	THR B 206	72.808	-25.153	-66.292	1.00 97.98	MOL1 N
ATOM	3237	CA	THR B 206	73.856	-25.337	-65.302	1.00 95.66	MOL1 C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3238	CB	THR	B	206	74.294	-23.992	-64.699	1.00	93.03	MOL1	C
ATOM	3239	OG1	THR	B	206	74.887	-23.186	-65.725	1.00	91.37	MOL1	O
ATOM	3240	CG2	THR	B	206	75.300	-24.209	-63.579	1.00	90.05	MOL1	C
ATOM	3241	C	THR	B	206	73.459	-26.281	-64.174	1.00	96.57	MOL1	C
ATOM	3242	O	THR	B	206	72.320	-26.311	-63.715	1.00	99.11	MOL1	O
ATOM	3243	N	CYS	B	207	74.432	-27.059	-63.739	1.00	94.81	MOL1	N
ATOM	3244	CA	CYS	B	207	74.249	-28.023	-62.679	1.00	94.38	MOL1	C
ATOM	3245	C	CYS	B	207	74.416	-27.283	-61.352	1.00	95.96	MOL1	C
ATOM	3246	O	CYS	B	207	75.268	-26.406	-61.237	1.00	100.43	MOL1	O
ATOM	3247	CB	CYS	B	207	75.324	-29.091	-62.840	1.00	92.91	MOL1	C
ATOM	3248	SG	CYS	B	207	75.218	-30.541	-61.758	1.00	94.39	MOL1	S
ATOM	3249	N	ASN	B	208	73.610	-27.619	-60.352	1.00	95.58	MOL1	N
ATOM	3250	CA	ASN	B	208	73.728	-26.957	-59.054	1.00	93.33	MOL1	C
ATOM	3251	CB	ASN	B	208	72.493	-26.112	-58.762	1.00	101.23	MOL1	C
ATOM	3252	CG	ASN	B	208	72.342	-24.967	-59.729	1.00	106.59	MOL1	C
ATOM	3253	OD1	ASN	B	208	73.171	-24.053	-59.763	1.00	108.28	MOL1	O
ATOM	3254	ND2	ASN	B	208	71.284	-25.010	-60.533	1.00	110.86	MOL1	N
ATOM	3255	C	ASN	B	208	73.920	-27.963	-57.946	1.00	89.80	MOL1	C
ATOM	3256	O	ASN	B	208	72.980	-28.305	-57.224	1.00	93.52	MOL1	O
ATOM	3257	N	VAL	B	209	75.152	-28.430	-57.804	1.00	82.22	MOL1	N
ATOM	3258	CA	VAL	B	209	75.461	-29.415	-56.781	1.00	75.59	MOL1	C
ATOM	3259	CB	VAL	B	209	76.679	-30.275	-57.181	1.00	69.13	MOL1	C
ATOM	3260	CG1	VAL	B	209	76.822	-31.430	-56.224	1.00	63.09	MOL1	C
ATOM	3261	CG2	VAL	B	209	76.521	-30.788	-58.604	1.00	61.88	MOL1	C
ATOM	3262	C	VAL	B	209	75.735	-28.747	-55.442	1.00	76.74	MOL1	C
ATOM	3263	O	VAL	B	209	76.397	-27.715	-55.377	1.00	77.01	MOL1	O
ATOM	3264	N	ALA	B	210	75.220	-29.340	-54.371	1.00	78.60	MOL1	N
ATOM	3265	CA	ALA	B	210	75.410	-28.787	-53.041	1.00	77.60	MOL1	C
ATOM	3266	CB	ALA	B	210	74.193	-27.986	-52.641	1.00	80.72	MOL1	C
ATOM	3267	C	ALA	B	210	75.682	-29.877	-52.020	1.00	80.42	MOL1	C
ATOM	3268	O	ALA	B	210	74.932	-30.850	-51.914	1.00	83.39	MOL1	O
ATOM	3269	N	HIS	B	211	76.757	-29.695	-51.262	1.00	83.26	MOL1	N
ATOM	3270	CA	HIS	B	211	77.180	-30.660	-50.249	1.00	89.17	MOL1	C
ATOM	3271	CB	HIS	B	211	78.591	-31.157	-50.612	1.00	80.09	MOL1	C
ATOM	3272	CG	HIS	B	211	79.044	-32.363	-49.847	1.00	74.52	MOL1	C
ATOM	3273	CD2	HIS	B	211	80.257	-32.694	-49.343	1.00	73.27	MOL1	C
ATOM	3274	ND1	HIS	B	211	78.215	-33.427	-49.565	1.00	71.41	MOL1	N
ATOM	3275	CE1	HIS	B	211	78.897	-34.357	-48.918	1.00	67.19	MOL1	C
ATOM	3276	NE2	HIS	B	211	80.139	-33.937	-48.771	1.00	62.80	MOL1	N
ATOM	3277	C	HIS	B	211	77.166	-30.039	-48.844	1.00	96.03	MOL1	C
ATOM	3278	O	HIS	B	211	78.145	-29.435	-48.408	1.00	93.90	MOL1	O
ATOM	3279	N	PRO	B	212	76.043	-30.179	-48.123	1.00	102.85	MOL1	N
ATOM	3280	CD	PRO	B	212	74.773	-30.777	-48.572	1.00	105.49	MOL1	C
ATOM	3281	CA	PRO	B	212	75.912	-29.629	-46.771	1.00	105.91	MOL1	C
ATOM	3282	CB	PRO	B	212	74.529	-30.117	-46.338	1.00	107.78	MOL1	C
ATOM	3283	CG	PRO	B	212	73.768	-30.131	-47.636	1.00	108.54	MOL1	C
ATOM	3284	C	PRO	B	212	77.021	-30.110	-45.837	1.00	106.85	MOL1	C
ATOM	3285	O	PRO	B	212	77.750	-29.304	-45.265	1.00	109.43	MOL1	O
ATOM	3286	N	ALA	B	213	77.143	-31.426	-45.691	1.00	106.07	MOL1	N
ATOM	3287	CA	ALA	B	213	78.155	-32.025	-44.822	1.00	104.23	MOL1	C
ATOM	3288	CB	ALA	B	213	78.274	-33.511	-45.109	1.00	104.88	MOL1	C
ATOM	3289	C	ALA	B	213	79.522	-31.376	-44.961	1.00	102.80	MOL1	C
ATOM	3290	O	ALA	B	213	80.322	-31.401	-44.029	1.00	105.87	MOL1	O
ATOM	3291	N	SER	B	214	79.790	-30.806	-46.129	1.00	100.89	MOL1	N
ATOM	3292	CA	SER	B	214	81.067	-30.154	-46.388	1.00	100.65	MOL1	C
ATOM	3293	CB	SER	B	214	81.787	-30.838	-47.545	1.00	97.12	MOL1	C
ATOM	3294	OG	SER	B	214	82.696	-29.959	-48.175	1.00	88.48	MOL1	O
ATOM	3295	C	SER	B	214	80.876	-28.689	-46.719	1.00	104.48	MOL1	C
ATOM	3296	O	SER	B	214	81.816	-28.009	-47.118	1.00	105.37	MOL1	O
ATOM	3297	N	SER	B	215	79.650	-28.208	-46.558	1.00	109.71	MOL1	N
ATOM	3298	CA	SER	B	215	79.318	-26.810	-46.837	1.00	113.22	MOL1	C
ATOM	3299	CB	SER	B	215	79.953	-25.881	-45.789	1.00	113.27	MOL1	C
ATOM	3300	OG	SER	B	215	81.366	-25.857	-45.892	1.00	110.37	MOL1	O
ATOM	3301	C	SER	B	215	79.751	-26.371	-48.235	1.00	112.71	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3302	O	SER	B	215	79.950	-25.181	-48.487	1.00110.22	MOL1	O
ATOM	3303	N	THR	B	216	79.895	-27.339	-49.135	1.00113.28	MOL1	N
ATOM	3304	CA	THR	B	216	80.289	-27.067	-50.515	1.00112.49	MOL1	C
ATOM	3305	CB	THR	B	216	80.989	-28.287	-51.163	1.00116.13	MOL1	C
ATOM	3306	OG1	THR	B	216	81.951	-28.842	-50.256	1.00116.88	MOL1	O
ATOM	3307	CG2	THR	B	216	81.684	-27.868	-52.452	1.00116.06	MOL1	C
ATOM	3308	C	THR	B	216	79.026	-26.791	-51.320	1.00109.89	MOL1	C
ATOM	3309	O	THR	B	216	77.954	-27.302	-50.988	1.00110.41	MOL1	O
ATOM	3310	N	LYS	B	217	79.150	-25.998	-52.377	1.00105.80	MOL1	N
ATOM	3311	CA	LYS	B	217	78.004	-25.675	-53.212	1.00109.45	MOL1	C
ATOM	3312	CB	LYS	B	217	77.182	-24.527	-52.599	1.00119.31	MOL1	C
ATOM	3313	CG	LYS	B	217	76.444	-24.889	-51.289	1.00129.29	MOL1	C
ATOM	3314	CD	LYS	B	217	75.516	-23.773	-50.775	1.00131.72	MOL1	C
ATOM	3315	CE	LYS	B	217	74.728	-24.222	-49.533	1.00133.19	MOL1	C
ATOM	3316	NZ	LYS	B	217	73.777	-23.188	-49.007	1.00131.75	MOL1	N
ATOM	3317	C	LYS	B	217	78.509	-25.271	-54.576	1.00107.36	MOL1	C
ATOM	3318	O	LYS	B	217	78.557	-24.085	-54.899	1.00110.84	MOL1	O
ATOM	3319	N	VAL	B	218	78.882	-26.265	-55.375	1.00103.91	MOL1	N
ATOM	3320	CA	VAL	B	218	79.402	-26.015	-56.715	1.00 99.65	MOL1	C
ATOM	3321	CB	VAL	B	218	80.450	-27.042	-57.108	1.00 97.19	MOL1	C
ATOM	3322	CG1	VAL	B	218	80.853	-26.820	-58.554	1.00 94.99	MOL1	C
ATOM	3323	CG2	VAL	B	218	81.647	-26.933	-56.186	1.00100.48	MOL1	C
ATOM	3324	C	VAL	B	218	78.379	-25.983	-57.839	1.00 98.84	MOL1	C
ATOM	3325	O	VAL	B	218	77.386	-26.710	-57.833	1.00 99.53	MOL1	O
ATOM	3326	N	ASP	B	219	78.637	-25.123	-58.812	1.00 98.56	MOL1	N
ATOM	3327	CA	ASP	B	219	77.765	-25.000	-59.961	1.00102.84	MOL1	C
ATOM	3328	CB	ASP	B	219	77.104	-23.613	-59.998	1.00112.70	MOL1	C
ATOM	3329	CG	ASP	B	219	78.114	-22.472	-60.101	1.00122.00	MOL1	C
ATOM	3330	OD1	ASP	B	219	79.026	-22.396	-59.245	1.00127.83	MOL1	O
ATOM	3331	OD2	ASP	B	219	77.989	-21.646	-61.036	1.00124.13	MOL1	O
ATOM	3332	C	ASP	B	219	78.643	-25.211	-61.180	1.00100.52	MOL1	C
ATOM	3333	O	ASP	B	219	79.737	-24.661	-61.264	1.00100.80	MOL1	O
ATOM	3334	N	LYS	B	220	78.181	-26.031	-62.114	1.00 99.48	MOL1	N
ATOM	3335	CA	LYS	B	220	78.959	-26.285	-63.318	1.00102.77	MOL1	C
ATOM	3336	CB	LYS	B	220	79.492	-27.723	-63.339	1.00105.07	MOL1	C
ATOM	3337	CG	LYS	B	220	80.752	-27.941	-64.205	1.00101.06	MOL1	C
ATOM	3338	CD	LYS	B	220	82.027	-27.800	-63.364	1.00 99.44	MOL1	C
ATOM	3339	CE	LYS	B	220	83.278	-28.285	-64.093	1.00 96.80	MOL1	C
ATOM	3340	NZ	LYS	B	220	84.404	-28.566	-63.141	1.00 91.69	MOL1	N
ATOM	3341	C	LYS	B	220	78.084	-26.056	-64.536	1.00103.79	MOL1	C
ATOM	3342	O	LYS	B	220	77.029	-26.668	-64.682	1.00105.73	MOL1	O
ATOM	3343	N	LYS	B	221	78.530	-25.161	-65.406	1.00104.74	MOL1	N
ATOM	3344	CA	LYS	B	221	77.801	-24.838	-66.625	1.00106.44	MOL1	C
ATOM	3345	CB	LYS	B	221	78.335	-23.527	-67.230	1.00115.48	MOL1	C
ATOM	3346	CG	LYS	B	221	78.279	-22.304	-66.294	1.00127.04	MOL1	C
ATOM	3347	CD	LYS	B	221	79.219	-21.154	-66.729	1.00131.38	MOL1	C
ATOM	3348	CE	LYS	B	221	78.824	-20.516	-68.064	1.00133.20	MOL1	C
ATOM	3349	NZ	LYS	B	221	79.750	-19.404	-68.453	1.00128.30	MOL1	N
ATOM	3350	C	LYS	B	221	78.032	-25.963	-67.617	1.00101.80	MOL1	C
ATOM	3351	O	LYS	B	221	79.152	-26.446	-67.745	1.00100.90	MOL1	O
ATOM	3352	N	ILE	B	222	76.984	-26.380	-68.319	1.00100.90	MOL1	N
ATOM	3353	CA	ILE	B	222	77.120	-27.442	-69.315	1.00 96.97	MOL1	C
ATOM	3354	CB	ILE	B	222	75.862	-28.299	-69.416	1.00 91.83	MOL1	C
ATOM	3355	CG2	ILE	B	222	76.044	-29.337	-70.493	1.00 89.24	MOL1	C
ATOM	3356	CG1	ILE	B	222	75.561	-28.943	-68.064	1.00 86.37	MOL1	C
ATOM	3357	CD1	ILE	B	222	76.703	-29.721	-67.504	1.00 85.83	MOL1	C
ATOM	3358	C	ILE	B	222	77.394	-26.851	-70.689	1.00 98.76	MOL1	C
ATOM	3359	O	ILE	B	222	76.498	-26.307	-71.341	1.00100.71	MOL1	O
ATOM	3360	N	VAL	B	223	78.641	-26.972	-71.122	1.00 99.19	MOL1	N
ATOM	3361	CA	VAL	B	223	79.078	-26.442	-72.405	1.00 98.35	MOL1	C
ATOM	3362	CB	VAL	B	223	80.310	-25.552	-72.218	1.00 97.77	MOL1	C
ATOM	3363	CG1	VAL	B	223	81.118	-26.030	-71.006	1.00 94.96	MOL1	C
ATOM	3364	CG2	VAL	B	223	81.173	-25.603	-73.474	1.00 97.02	MOL1	C
ATOM	3365	C	VAL	B	223	79.460	-27.558	-73.352	1.00 98.65	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3366	O	VAL	B	223	80.115	-28.516	-72.951	1.00	99.88	MOL1	O
ATOM	3367	N	PRO	B	224	79.073	-27.437	-74.629	1.00	98.92	MOL1	N
ATOM	3368	CD	PRO	B	224	78.286	-26.316	-75.161	1.00	94.90	MOL1	C
ATOM	3369	CA	PRO	B	224	79.354	-28.421	-75.683	1.00104.37		MOL1	C
ATOM	3370	CB	PRO	B	224	78.488	-27.942	-76.842	1.00	96.75	MOL1	C
ATOM	3371	CG	PRO	B	224	78.489	-26.467	-76.654	1.00	95.48	MOL1	C
ATOM	3372	C	PRO	B	224	80.832	-28.541	-76.067	1.00111.20		MOL1	C
ATOM	3373	O	PRO	B	224	81.690	-27.847	-75.519	1.00111.75		MOL1	O
ATOM	3374	N	ARG	B	225	81.114	-29.439	-77.007	1.00118.08		MOL1	N
ATOM	3375	CA	ARG	B	225	82.473	-29.677	-77.486	1.00124.84		MOL1	C
ATOM	3376	CB	ARG	B	225	82.742	-31.177	-77.550	1.00122.51		MOL1	C
ATOM	3377	CG	ARG	B	225	82.489	-31.912	-76.239	1.00119.75		MOL1	C
ATOM	3378	CD	ARG	B	225	82.337	-33.422	-76.457	1.00116.39		MOL1	C
ATOM	3379	NE	ARG	B	225	82.076	-34.124	-75.205	1.00111.70		MOL1	N
ATOM	3380	CZ	ARG	B	225	83.001	-34.393	-74.287	1.00112.50		MOL1	C
ATOM	3381	NH1	ARG	B	225	82.661	-35.029	-73.173	1.00114.12		MOL1	N
ATOM	3382	NH2	ARG	B	225	84.267	-34.045	-74.490	1.00109.27		MOL1	N
ATOM	3383	C	ARG	B	225	82.613	-29.069	-78.878	1.00133.06		MOL1	C
ATOM	3384	O	ARG	B	225	81.621	-28.913	-79.594	1.00135.73		MOL1	O
ATOM	3385	N	ASP	B	226	83.840	-28.738	-79.269	1.00140.52		MOL1	N
ATOM	3386	CA	ASP	B	226	84.067	-28.126	-80.575	1.00149.72		MOL1	C
ATOM	3387	CB	ASP	B	226	85.360	-27.296	-80.554	1.00145.64		MOL1	C
ATOM	3388	CG	ASP	B	226	85.149	-25.893	-79.984	1.00142.50		MOL1	C
ATOM	3389	OD1	ASP	B	226	86.143	-25.150	-79.854	1.00139.30		MOL1	O
ATOM	3390	OD2	ASP	B	226	83.992	-25.527	-79.671	1.00137.82		MOL1	O
ATOM	3391	C	ASP	B	226	84.065	-29.082	-81.776	1.00155.68		MOL1	C
ATOM	3392	O	ASP	B	226	82.997	-29.481	-82.250	1.00156.17		MOL1	O
ATOM	3393	N	CYS	B	227	85.248	-29.438	-82.274	1.00162.72		MOL1	N
ATOM	3394	CA	CYS	B	227	85.352	-30.325	-83.435	1.00168.19		MOL1	C
ATOM	3395	CB	CYS	B	227	86.735	-30.162	-84.109	1.00171.79		MOL1	C
ATOM	3396	SG	CYS	B	227	88.179	-31.014	-83.367	1.00175.58		MOL1	S
ATOM	3397	C	CYS	B	227	85.079	-31.797	-83.104	1.00169.02		MOL1	C
ATOM	3398	O	CYS	B	227	84.756	-32.089	-81.930	1.00168.83		MOL1	O
ATOM	3399	OXT	CYS	B	227	85.171	-32.640	-84.026	1.00169.12		MOL1	O
ATOM	3400	CB	GLU	F	15	22.974	-19.456	-42.886	1.00149.87		MOL1	C
ATOM	3401	CG	GLU	F	15	22.375	-19.287	-41.505	1.00144.07		MOL1	C
ATOM	3402	CD	GLU	F	15	21.496	-20.457	-41.117	1.00141.32		MOL1	C
ATOM	3403	OE1	GLU	F	15	22.037	-21.457	-40.599	1.00139.31		MOL1	O
ATOM	3404	OE2	GLU	F	15	20.271	-20.383	-41.342	1.00136.53		MOL1	O
ATOM	3405	C	GLU	F	15	21.960	-17.725	-44.377	1.00155.87		MOL1	C
ATOM	3406	O	GLU	F	15	22.161	-17.366	-45.539	1.00156.62		MOL1	O
ATOM	3407	N	GLU	F	15	22.347	-20.014	-45.220	1.00152.69		MOL1	N
ATOM	3408	CA	GLU	F	15	21.974	-19.212	-44.018	1.00153.60		MOL1	C
ATOM	3409	N	SER	F	16	21.731	-16.866	-43.384	1.00157.81		MOL1	N
ATOM	3410	CA	SER	F	16	21.685	-15.421	-43.619	1.00158.62		MOL1	C
ATOM	3411	CB	SER	F	16	20.704	-15.094	-44.752	1.00156.06		MOL1	C
ATOM	3412	OG	SER	F	16	19.358	-15.219	-44.325	1.00151.69		MOL1	O
ATOM	3413	C	SER	F	16	21.286	-14.614	-42.382	1.00161.17		MOL1	C
ATOM	3414	O	SER	F	16	21.486	-13.404	-42.334	1.00162.33		MOL1	O
ATOM	3415	N	CYS	F	17	20.720	-15.285	-41.386	1.00163.62		MOL1	N
ATOM	3416	CA	CYS	F	17	20.282	-14.628	-40.154	1.00164.31		MOL1	C
ATOM	3417	C	CYS	F	17	21.380	-13.767	-39.528	1.00165.32		MOL1	C
ATOM	3418	O	CYS	F	17	22.566	-13.976	-39.785	1.00164.46		MOL1	O
ATOM	3419	CB	CYS	F	17	19.846	-15.681	-39.140	1.00162.75		MOL1	C
ATOM	3420	SG	CYS	F	17	19.205	-17.206	-39.897	1.00160.53		MOL1	S
ATOM	3421	N	PRO	F	18	20.987	-12.782	-38.698	1.00166.83		MOL1	N
ATOM	3422	CD	PRO	F	18	19.585	-12.387	-38.472	1.00165.88		MOL1	C
ATOM	3423	CA	PRO	F	18	21.903	-11.865	-38.006	1.00167.58		MOL1	C
ATOM	3424	CB	PRO	F	18	20.957	-10.992	-37.185	1.00166.11		MOL1	C
ATOM	3425	CG	PRO	F	18	19.725	-10.947	-38.036	1.00166.04		MOL1	C
ATOM	3426	C	PRO	F	18	22.880	-12.636	-37.122	1.00169.16		MOL1	C
ATOM	3427	O	PRO	F	18	22.543	-13.037	-36.008	1.00167.54		MOL1	O
ATOM	3428	N	PRO	F	19	24.111	-12.837	-37.611	1.00172.45		MOL1	N
ATOM	3429	CD	PRO	F	19	24.580	-12.245	-38.878	1.00172.44		MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3430	CA	PRO	F	19	25.202	-13.555	-36.940	1.00175.08	MOL1	C
ATOM	3431	CB	PRO	F	19	26.425	-13.162	-37.769	1.00174.52	MOL1	C
ATOM	3432	CG	PRO	F	19	25.850	-13.024	-39.149	1.00173.92	MOL1	C
ATOM	3433	C	PRO	F	19	25.402	-13.286	-35.441	1.00176.12	MOL1	C
ATOM	3434	O	PRO	F	19	24.737	-12.436	-34.841	1.00174.47	MOL1	O
ATOM	3435	N	VAL	F	20	26.322	-14.041	-34.848	1.00177.57	MOL1	N
ATOM	3436	CA	VAL	F	20	26.659	-13.908	-33.437	1.00178.58	MOL1	C
ATOM	3437	CB	VAL	F	20	26.466	-15.253	-32.686	1.00178.29	MOL1	C
ATOM	3438	CG1	VAL	F	20	24.982	-15.571	-32.574	1.00176.76	MOL1	C
ATOM	3439	CG2	VAL	F	20	27.191	-16.378	-33.420	1.00176.99	MOL1	C
ATOM	3440	C	VAL	F	20	28.119	-13.451	-33.346	1.00180.71	MOL1	C
ATOM	3441	O	VAL	F	20	28.845	-13.480	-34.346	1.00181.31	MOL1	O
ATOM	3442	N	PRO	F	21	28.566	-13.008	-32.155	1.00182.04	MOL1	N
ATOM	3443	CD	PRO	F	21	27.795	-12.900	-30.899	1.00182.08	MOL1	C
ATOM	3444	CA	PRO	F	21	29.946	-12.545	-31.957	1.00181.92	MOL1	C
ATOM	3445	CB	PRO	F	21	30.098	-12.597	-30.440	1.00181.19	MOL1	C
ATOM	3446	CG	PRO	F	21	28.743	-12.119	-29.987	1.00180.80	MOL1	C
ATOM	3447	C	PRO	F	21	31.028	-13.345	-32.703	1.00181.93	MOL1	C
ATOM	3448	O	PRO	F	21	31.999	-12.769	-33.202	1.00180.80	MOL1	O
ATOM	3449	N	GLY	F	22	30.860	-14.663	-32.780	1.00182.34	MOL1	N
ATOM	3450	CA	GLY	F	22	31.831	-15.486	-33.484	1.00181.41	MOL1	C
ATOM	3451	C	GLY	F	22	32.213	-16.792	-32.806	1.00180.52	MOL1	C
ATOM	3452	O	GLY	F	22	32.647	-16.800	-31.651	1.00181.38	MOL1	O
ATOM	3453	N	GLY	F	23	32.055	-17.900	-33.530	1.00178.22	MOL1	N
ATOM	3454	CA	GLY	F	23	32.400	-19.208	-32.995	1.00174.34	MOL1	C
ATOM	3455	C	GLY	F	23	31.603	-19.638	-31.775	1.00171.67	MOL1	C
ATOM	3456	O	GLY	F	23	32.174	-19.920	-30.718	1.00170.67	MOL1	O
ATOM	3457	N	SER	F	24	30.281	-19.692	-31.920	1.00168.80	MOL1	N
ATOM	3458	CA	SER	F	24	29.402	-20.095	-30.825	1.00164.63	MOL1	C
ATOM	3459	CB	SER	F	24	29.323	-18.982	-29.772	1.00165.56	MOL1	C
ATOM	3460	OG	SER	F	24	28.530	-19.374	-28.662	1.00164.93	MOL1	O
ATOM	3461	C	SER	F	24	28.001	-20.419	-31.345	1.00160.92	MOL1	C
ATOM	3462	O	SER	F	24	27.533	-19.812	-32.314	1.00160.03	MOL1	O
ATOM	3463	N	MET	F	25	27.340	-21.378	-30.696	1.00155.68	MOL1	N
ATOM	3464	CA	MET	F	25	25.992	-21.790	-31.083	1.00148.46	MOL1	C
ATOM	3465	CB	MET	F	25	26.061	-23.054	-31.949	1.00148.69	MOL1	C
ATOM	3466	CG	MET	F	25	24.964	-23.169	-33.015	1.00149.35	MOL1	C
ATOM	3467	SD	MET	F	25	25.375	-22.436	-34.633	1.00149.53	MOL1	S
ATOM	3468	CE	MET	F	25	25.741	-23.915	-35.642	1.00145.96	MOL1	C
ATOM	3469	C	MET	F	25	25.141	-22.048	-29.829	1.00143.51	MOL1	C
ATOM	3470	O	MET	F	25	25.672	-22.140	-28.717	1.00140.73	MOL1	O
ATOM	3471	N	LYS	F	26	23.826	-22.158	-30.013	1.00138.19	MOL1	N
ATOM	3472	CA	LYS	F	26	22.907	-22.392	-28.897	1.00134.01	MOL1	C
ATOM	3473	CB	LYS	F	26	21.479	-21.964	-29.270	1.00133.72	MOL1	C
ATOM	3474	CG	LYS	F	26	21.216	-20.465	-29.159	1.00133.94	MOL1	C
ATOM	3475	CD	LYS	F	26	19.764	-20.106	-29.491	1.00134.50	MOL1	C
ATOM	3476	CE	LYS	F	26	18.769	-20.636	-28.457	1.00134.34	MOL1	C
ATOM	3477	NZ	LYS	F	26	18.842	-19.931	-27.142	1.00135.55	MOL1	N
ATOM	3478	C	LYS	F	26	22.879	-23.833	-28.398	1.00129.94	MOL1	C
ATOM	3479	O	LYS	F	26	22.459	-24.746	-29.111	1.00130.92	MOL1	O
ATOM	3480	N	LEU	F	27	23.316	-24.026	-27.158	1.00123.18	MOL1	N
ATOM	3481	CA	LEU	F	27	23.334	-25.345	-26.546	1.00117.71	MOL1	C
ATOM	3482	CB	LEU	F	27	24.752	-25.718	-26.127	1.00108.77	MOL1	C
ATOM	3483	CG	LEU	F	27	24.900	-27.123	-25.551	1.00102.45	MOL1	C
ATOM	3484	CD1	LEU	F	27	24.569	-28.130	-26.638	1.00 99.22	MOL1	C
ATOM	3485	CD2	LEU	F	27	26.310	-27.335	-25.032	1.00 95.52	MOL1	C
ATOM	3486	C	LEU	F	27	22.444	-25.344	-25.318	1.00118.97	MOL1	C
ATOM	3487	O	LEU	F	27	22.865	-24.923	-24.246	1.00119.24	MOL1	O
ATOM	3488	N	ASP	F	28	21.215	-25.821	-25.471	1.00122.32	MOL1	N
ATOM	3489	CA	ASP	F	28	20.278	-25.862	-24.358	1.00125.99	MOL1	C
ATOM	3490	CB	ASP	F	28	18.937	-26.448	-24.807	1.00129.38	MOL1	C
ATOM	3491	CG	ASP	F	28	18.465	-25.880	-26.135	1.00135.42	MOL1	C
ATOM	3492	OD1	ASP	F	28	18.844	-24.734	-26.458	1.00137.40	MOL1	O
ATOM	3493	OD2	ASP	F	28	17.707	-26.573	-26.852	1.00136.01	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	3494	C	ASP	F	28	20.820	-26.689	-23.201	1.00128.20	MOL1	C
ATOM	3495	O	ASP	F	28	21.489	-27.702	-23.401	1.00127.44	MOL1	O
ATOM	3496	N	ILE	F	29	20.532	-26.238	-21.985	1.00132.62	MOL1	N
ATOM	3497	CA	ILE	F	29	20.962	-26.933	-20.776	1.00133.08	MOL1	C
ATOM	3498	CB	ILE	F	29	20.752	-26.077	-19.507	1.00132.47	MOL1	C
ATOM	3499	CG2	ILE	F	29	21.747	-24.935	-19.472	1.00134.02	MOL1	C
ATOM	3500	CG1	ILE	F	29	19.305	-25.575	-19.461	1.00131.56	MOL1	C
ATOM	3501	CD1	ILE	F	29	19.011	-24.625	-18.323	1.00131.84	MOL1	C
ATOM	3502	C	ILE	F	29	20.094	-28.163	-20.625	1.00132.87	MOL1	C
ATOM	3503	O	ILE	F	29	19.048	-28.282	-21.271	1.00132.86	MOL1	O
ATOM	3504	N	GLY	F	30	20.520	-29.071	-19.757	1.00131.60	MOL1	N
ATOM	3505	CA	GLY	F	30	19.751	-30.278	-19.537	1.00129.89	MOL1	C
ATOM	3506	C	GLY	F	30	20.037	-31.345	-20.571	1.00126.50	MOL1	C
ATOM	3507	O	GLY	F	30	19.802	-31.158	-21.767	1.00128.12	MOL1	O
ATOM	3508	N	ILE	F	31	20.543	-32.475	-20.098	1.00121.94	MOL1	N
ATOM	3509	CA	ILE	F	31	20.871	-33.590	-20.964	1.00117.12	MOL1	C
ATOM	3510	CB	ILE	F	31	22.120	-34.327	-20.471	1.00115.73	MOL1	C
ATOM	3511	CG2	ILE	F	31	22.518	-35.373	-21.478	1.00114.88	MOL1	C
ATOM	3512	CG1	ILE	F	31	23.265	-33.339	-20.237	1.00116.43	MOL1	C
ATOM	3513	CD1	ILE	F	31	23.121	-32.490	-18.975	1.00120.44	MOL1	C
ATOM	3514	C	ILE	F	31	19.720	-34.582	-20.981	1.00116.73	MOL1	C
ATOM	3515	O	ILE	F	31	19.209	-34.967	-19.931	1.00116.15	MOL1	O
ATOM	3516	N	ILE	F	32	19.317	-34.994	-22.176	1.00118.68	MOL1	N
ATOM	3517	CA	ILE	F	32	18.226	-35.949	-22.329	1.00123.20	MOL1	C
ATOM	3518	CB	ILE	F	32	17.780	-36.044	-23.805	1.00123.36	MOL1	C
ATOM	3519	CG2	ILE	F	32	16.553	-36.940	-23.922	1.00122.71	MOL1	C
ATOM	3520	CG1	ILE	F	32	17.480	-34.644	-24.349	1.00122.75	MOL1	C
ATOM	3521	CD1	ILE	F	32	16.994	-34.637	-25.786	1.00123.21	MOL1	C
ATOM	3522	C	ILE	F	32	18.640	-37.346	-21.856	1.00127.61	MOL1	C
ATOM	3523	O	ILE	F	32	19.633	-37.899	-22.333	1.00129.87	MOL1	O
ATOM	3524	N	ASN	F	33	17.875	-37.904	-20.917	1.00132.09	MOL1	N
ATOM	3525	CA	ASN	F	33	18.128	-39.239	-20.362	1.00136.09	MOL1	C
ATOM	3526	CB	ASN	F	33	18.367	-40.248	-21.490	1.00137.26	MOL1	C
ATOM	3527	CG	ASN	F	33	17.174	-40.378	-22.422	1.00141.15	MOL1	C
ATOM	3528	OD1	ASN	F	33	16.113	-40.861	-22.025	1.00144.19	MOL1	O
ATOM	3529	ND2	ASN	F	33	17.340	-39.940	-23.657	1.00141.99	MOL1	N
ATOM	3530	C	ASN	F	33	19.297	-39.289	-19.379	1.00139.95	MOL1	C
ATOM	3531	O	ASN	F	33	19.952	-40.319	-19.241	1.00140.54	MOL1	O
ATOM	3532	N	GLU	F	34	19.550	-38.177	-18.694	1.00145.31	MOL1	N
ATOM	3533	CA	GLU	F	34	20.638	-38.089	-17.720	1.00150.17	MOL1	C
ATOM	3534	CB	GLU	F	34	20.604	-36.710	-17.049	1.00152.50	MOL1	C
ATOM	3535	CG	GLU	F	34	21.625	-36.504	-15.937	1.00155.37	MOL1	C
ATOM	3536	CD	GLU	F	34	21.432	-35.184	-15.207	1.00155.48	MOL1	C
ATOM	3537	OE1	GLU	F	34	21.490	-34.124	-15.868	1.00155.20	MOL1	O
ATOM	3538	OE2	GLU	F	34	21.224	-35.208	-13.972	1.00153.96	MOL1	O
ATOM	3539	C	GLU	F	34	20.514	-39.185	-16.659	1.00153.84	MOL1	C
ATOM	3540	O	GLU	F	34	21.434	-39.414	-15.871	1.00152.98	MOL1	O
ATOM	3541	N	ASN	F	35	19.368	-39.863	-16.660	1.00159.41	MOL1	N
ATOM	3542	CA	ASN	F	35	19.062	-40.925	-15.702	1.00165.02	MOL1	C
ATOM	3543	CB	ASN	F	35	17.544	-41.041	-15.518	1.00167.52	MOL1	C
ATOM	3544	CG	ASN	F	35	16.895	-39.730	-15.128	1.00169.43	MOL1	C
ATOM	3545	OD1	ASN	F	35	17.154	-39.189	-14.052	1.00171.02	MOL1	O
ATOM	3546	ND2	ASN	F	35	16.041	-39.213	-16.006	1.00168.39	MOL1	N
ATOM	3547	C	ASN	F	35	19.592	-42.311	-16.072	1.00167.21	MOL1	C
ATOM	3548	O	ASN	F	35	19.730	-43.169	-15.200	1.00168.76	MOL1	O
ATOM	3549	N	GLN	F	36	19.853	-42.546	-17.357	1.00169.24	MOL1	N
ATOM	3550	CA	GLN	F	36	20.358	-43.848	-17.798	1.00170.44	MOL1	C
ATOM	3551	CB	GLN	F	36	20.719	-43.814	-19.287	1.00170.00	MOL1	C
ATOM	3552	CG	GLN	F	36	19.540	-44.006	-20.228	1.00166.49	MOL1	C
ATOM	3553	CD	GLN	F	36	18.973	-45.412	-20.175	1.00164.75	MOL1	C
ATOM	3554	OE1	GLN	F	36	18.015	-45.732	-20.878	1.00163.00	MOL1	O
ATOM	3555	NE2	GLN	F	36	19.565	-46.261	-19.340	1.00165.04	MOL1	N
ATOM	3556	C	GLN	F	36	21.582	-44.240	-16.984	1.00173.14	MOL1	C
ATOM	3557	O	GLN	F	36	22.631	-43.591	-17.069	1.00171.50	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	3558	N	ARG	F	37	21.443	-45.308	-16.200	1.00176.82	MOL1	N
ATOM	3559	CA	ARG	F	37	22.527	-45.780	-15.342	1.00179.91	MOL1	C
ATOM	3560	CB	ARG	F	37	21.968	-46.662	-14.213	1.00179.87	MOL1	C
ATOM	3561	CG	ARG	F	37	20.898	-45.987	-13.352	1.00177.94	MOL1	C
ATOM	3562	CD	ARG	F	37	20.879	-46.550	-11.938	1.00175.90	MOL1	C
ATOM	3563	NE	ARG	F	37	22.089	-46.191	-11.204	1.00175.74	MOL1	N
ATOM	3564	CZ	ARG	F	37	22.415	-44.947	-10.859	1.00175.03	MOL1	C
ATOM	3565	NH1	ARG	F	37	21.618	-43.936	-11.177	1.00173.00	MOL1	N
ATOM	3566	NH2	ARG	F	37	23.541	-44.714	-10.199	1.00174.73	MOL1	N
ATOM	3567	C	ARG	F	37	23.633	-46.533	-16.079	1.00180.73	MOL1	C
ATOM	3568	O	ARG	F	37	23.379	-47.259	-17.047	1.00178.26	MOL1	O
ATOM	3569	N	VAL	F	38	24.861	-46.337	-15.597	1.00182.74	MOL1	N
ATOM	3570	CA	VAL	F	38	26.063	-46.966	-16.144	1.00183.52	MOL1	C
ATOM	3571	CB	VAL	F	38	27.300	-46.666	-15.240	1.00183.75	MOL1	C
ATOM	3572	CG1	VAL	F	38	28.542	-47.351	-15.794	1.00184.08	MOL1	C
ATOM	3573	CG2	VAL	F	38	27.521	-45.161	-15.132	1.00181.36	MOL1	C
ATOM	3574	C	VAL	F	38	25.878	-48.481	-16.224	1.00183.05	MOL1	C
ATOM	3575	O	VAL	F	38	26.288	-49.208	-15.313	1.00182.81	MOL1	O
ATOM	3576	N	SER	F	39	25.265	-48.955	-17.307	1.00180.94	MOL1	N
ATOM	3577	CA	SER	F	39	25.036	-50.387	-17.470	1.00178.69	MOL1	C
ATOM	3578	CB	SER	F	39	24.145	-50.659	-18.685	1.00178.07	MOL1	C
ATOM	3579	OG	SER	F	39	23.836	-52.041	-18.782	1.00174.85	MOL1	O
ATOM	3580	C	SER	F	39	26.357	-51.134	-17.619	1.00177.48	MOL1	C
ATOM	3581	O	SER	F	39	26.859	-51.330	-18.728	1.00176.69	MOL1	O
ATOM	3582	N	MET	F	40	26.912	-51.548	-16.483	1.00175.26	MOL1	N
ATOM	3583	CA	MET	F	40	28.174	-52.271	-16.457	1.00170.51	MOL1	C
ATOM	3584	CB	MET	F	40	29.294	-51.325	-16.004	1.00173.33	MOL1	C
ATOM	3585	CG	MET	F	40	30.706	-51.782	-16.345	1.00175.64	MOL1	C
ATOM	3586	SD	MET	F	40	31.936	-50.475	-16.064	1.00176.59	MOL1	S
ATOM	3587	CE	MET	F	40	31.861	-49.599	-17.635	1.00173.87	MOL1	C
ATOM	3588	C	MET	F	40	28.053	-53.455	-15.499	1.00165.12	MOL1	C
ATOM	3589	O	MET	F	40	28.501	-53.381	-14.354	1.00163.85	MOL1	O
ATOM	3590	N	SER	F	41	27.421	-54.532	-15.967	1.00158.82	MOL1	N
ATOM	3591	CA	SER	F	41	27.256	-55.735	-15.153	1.00152.76	MOL1	C
ATOM	3592	CB	SER	F	41	26.658	-56.879	-15.983	1.00150.88	MOL1	C
ATOM	3593	OG	SER	F	41	25.380	-56.542	-16.494	1.00146.30	MOL1	O
ATOM	3594	C	SER	F	41	28.652	-56.114	-14.680	1.00149.80	MOL1	C
ATOM	3595	O	SER	F	41	29.417	-56.745	-15.407	1.00149.13	MOL1	O
ATOM	3596	N	ARG	F	42	28.977	-55.714	-13.458	1.00145.39	MOL1	N
ATOM	3597	CA	ARG	F	42	30.292	-55.964	-12.890	1.00139.25	MOL1	C
ATOM	3598	CB	ARG	F	42	30.286	-55.570	-11.410	1.00141.33	MOL1	C
ATOM	3599	CG	ARG	F	42	29.468	-54.316	-11.126	1.00144.63	MOL1	C
ATOM	3600	CD	ARG	F	42	29.711	-53.788	-9.723	1.00150.26	MOL1	C
ATOM	3601	NE	ARG	F	42	30.999	-53.107	-9.610	1.00155.68	MOL1	N
ATOM	3602	CZ	ARG	F	42	31.301	-51.968	-10.229	1.00156.48	MOL1	C
ATOM	3603	NH1	ARG	F	42	30.404	-51.376	-11.009	1.00157.71	MOL1	N
ATOM	3604	NH2	ARG	F	42	32.498	-51.419	-10.068	1.00154.00	MOL1	N
ATOM	3605	C	ARG	F	42	30.813	-57.392	-13.050	1.00133.09	MOL1	C
ATOM	3606	O	ARG	F	42	30.045	-58.356	-13.162	1.00131.03	MOL1	O
ATOM	3607	N	ASN	F	43	32.139	-57.496	-13.089	1.00126.61	MOL1	N
ATOM	3608	CA	ASN	F	43	32.849	-58.769	-13.192	1.00119.43	MOL1	C
ATOM	3609	CB	ASN	F	43	32.486	-59.648	-11.990	1.00126.89	MOL1	C
ATOM	3610	CG	ASN	F	43	32.751	-58.959	-10.661	1.00132.70	MOL1	C
ATOM	3611	OD1	ASN	F	43	32.121	-57.947	-10.334	1.00134.91	MOL1	O
ATOM	3612	ND2	ASN	F	43	33.690	-59.503	-9.887	1.00135.04	MOL1	N
ATOM	3613	C	ASN	F	43	32.713	-59.604	-14.468	1.00109.71	MOL1	C
ATOM	3614	O	ASN	F	43	33.448	-60.582	-14.636	1.00105.52	MOL1	O
ATOM	3615	N	ILE	F	44	31.794	-59.256	-15.365	1.00 98.14	MOL1	N
ATOM	3616	CA	ILE	F	44	31.674	-60.060	-16.577	1.00 85.42	MOL1	C
ATOM	3617	CB	ILE	F	44	30.413	-59.714	-17.403	1.00 80.25	MOL1	C
ATOM	3618	CG2	ILE	F	44	29.295	-59.277	-16.470	1.00 87.58	MOL1	C
ATOM	3619	CG1	ILE	F	44	30.710	-58.630	-18.427	1.00 69.53	MOL1	C
ATOM	3620	CD1	ILE	F	44	29.600	-58.492	-19.430	1.00 52.02	MOL1	C
ATOM	3621	C	ILE	F	44	32.921	-59.860	-17.416	1.00 79.76	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3622	O	ILE	F	44	33.205	-60.630	-18.328	1.00	74.80	MOL1	O
ATOM	3623	N	GLU	F	45	33.672	-58.817	-17.089	1.00	76.85	MOL1	N
ATOM	3624	CA	GLU	F	45	34.911	-58.545	-17.784	1.00	75.75	MOL1	C
ATOM	3625	CB	GLU	F	45	35.521	-57.218	-17.323	1.00	77.64	MOL1	C
ATOM	3626	CG	GLU	F	45	35.481	-56.970	-15.822	1.00	79.53	MOL1	C
ATOM	3627	CD	GLU	F	45	34.225	-56.216	-15.392	1.00	86.18	MOL1	C
ATOM	3628	OE1	GLU	F	45	34.088	-55.899	-14.186	1.00	83.20	MOL1	O
ATOM	3629	OE2	GLU	F	45	33.373	-55.935	-16.268	1.00	88.06	MOL1	O
ATOM	3630	C	GLU	F	45	35.866	-59.674	-17.454	1.00	76.46	MOL1	C
ATOM	3631	O	GLU	F	45	36.896	-59.834	-18.098	1.00	78.53	MOL1	O
ATOM	3632	N	SER	F	46	35.515	-60.467	-16.448	1.00	78.34	MOL1	N
ATOM	3633	CA	SER	F	46	36.370	-61.572	-16.038	1.00	78.87	MOL1	C
ATOM	3634	CB	SER	F	46	36.734	-61.432	-14.561	1.00	85.43	MOL1	C
ATOM	3635	OG	SER	F	46	37.743	-62.365	-14.209	1.00	97.78	MOL1	O
ATOM	3636	C	SER	F	46	35.733	-62.932	-16.272	1.00	73.11	MOL1	C
ATOM	3637	O	SER	F	46	36.406	-63.957	-16.206	1.00	72.67	MOL1	O
ATOM	3638	N	ARG	F	47	34.433	-62.931	-16.537	1.00	69.60	MOL1	N
ATOM	3639	CA	ARG	F	47	33.690	-64.162	-16.795	1.00	66.40	MOL1	C
ATOM	3640	CB	ARG	F	47	32.225	-64.007	-16.371	1.00	71.81	MOL1	C
ATOM	3641	CG	ARG	F	47	31.872	-64.348	-14.933	1.00	71.12	MOL1	C
ATOM	3642	CD	ARG	F	47	30.491	-63.785	-14.607	1.00	70.56	MOL1	C
ATOM	3643	NE	ARG	F	47	29.442	-64.226	-15.532	1.00	66.40	MOL1	N
ATOM	3644	CZ	ARG	F	47	28.313	-63.551	-15.754	1.00	71.40	MOL1	C
ATOM	3645	NH1	ARG	F	47	28.080	-62.397	-15.128	1.00	69.35	MOL1	N
ATOM	3646	NH2	ARG	F	47	27.406	-64.028	-16.594	1.00	71.10	MOL1	N
ATOM	3647	C	ARG	F	47	33.703	-64.511	-18.278	1.00	62.46	MOL1	C
ATOM	3648	O	ARG	F	47	33.271	-65.587	-18.662	1.00	59.75	MOL1	O
ATOM	3649	N	SER	F	48	34.174	-63.594	-19.114	1.00	62.70	MOL1	N
ATOM	3650	CA	SER	F	48	34.206	-63.839	-20.555	1.00	60.28	MOL1	C
ATOM	3651	CB	SER	F	48	34.254	-62.517	-21.324	1.00	63.61	MOL1	C
ATOM	3652	OG	SER	F	48	34.348	-62.744	-22.724	1.00	61.71	MOL1	O
ATOM	3653	C	SER	F	48	35.374	-64.705	-20.997	1.00	57.89	MOL1	C
ATOM	3654	O	SER	F	48	36.443	-64.684	-20.393	1.00	60.33	MOL1	O
ATOM	3655	N	THR	F	49	35.161	-65.466	-22.063	1.00	54.42	MOL1	N
ATOM	3656	CA	THR	F	49	36.199	-66.328	-22.602	1.00	54.49	MOL1	C
ATOM	3657	CB	THR	F	49	35.648	-67.251	-23.713	1.00	54.48	MOL1	C
ATOM	3658	OG1	THR	F	49	35.141	-66.472	-24.805	1.00	56.11	MOL1	O
ATOM	3659	CG2	THR	F	49	34.542	-68.106	-23.165	1.00	56.64	MOL1	C
ATOM	3660	C	THR	F	49	37.314	-65.462	-23.177	1.00	56.33	MOL1	C
ATOM	3661	O	THR	F	49	38.375	-65.957	-23.549	1.00	61.42	MOL1	O
ATOM	3662	N	SER	F	50	37.055	-64.162	-23.246	1.00	54.40	MOL1	N
ATOM	3663	CA	SER	F	50	38.005	-63.187	-23.757	1.00	47.36	MOL1	C
ATOM	3664	CB	SER	F	50	37.578	-62.740	-25.154	1.00	46.06	MOL1	C
ATOM	3665	OG	SER	F	50	36.163	-62.674	-25.266	1.00	42.87	MOL1	O
ATOM	3666	C	SER	F	50	37.962	-62.028	-22.777	1.00	48.51	MOL1	C
ATOM	3667	O	SER	F	50	37.405	-60.978	-23.056	1.00	49.58	MOL1	O
ATOM	3668	N	PRO	F	51	38.544	-62.229	-21.594	1.00	50.16	MOL1	N
ATOM	3669	CD	PRO	F	51	39.284	-63.474	-21.372	1.00	45.51	MOL1	C
ATOM	3670	CA	PRO	F	51	38.675	-61.335	-20.435	1.00	50.86	MOL1	C
ATOM	3671	CB	PRO	F	51	39.525	-62.151	-19.476	1.00	50.48	MOL1	C
ATOM	3672	CG	PRO	F	51	39.255	-63.563	-19.899	1.00	53.81	MOL1	C
ATOM	3673	C	PRO	F	51	39.339	-60.004	-20.780	1.00	51.50	MOL1	C
ATOM	3674	O	PRO	F	51	40.097	-59.920	-21.738	1.00	54.86	MOL1	O
ATOM	3675	N	TRP	F	52	39.087	-58.978	-19.978	1.00	47.99	MOL1	N
ATOM	3676	CA	TRP	F	52	39.646	-57.673	-20.254	1.00	46.10	MOL1	C
ATOM	3677	CB	TRP	F	52	38.815	-57.031	-21.366	1.00	46.29	MOL1	C
ATOM	3678	CG	TRP	F	52	37.361	-56.685	-21.016	1.00	45.96	MOL1	C
ATOM	3679	CD2	TRP	F	52	36.166	-57.345	-21.485	1.00	42.76	MOL1	C
ATOM	3680	CE2	TRP	F	52	35.061	-56.624	-20.980	1.00	39.10	MOL1	C
ATOM	3681	CE3	TRP	F	52	35.924	-58.471	-22.281	1.00	46.96	MOL1	C
ATOM	3682	CD1	TRP	F	52	36.930	-55.626	-20.264	1.00	42.72	MOL1	C
ATOM	3683	NE1	TRP	F	52	35.555	-55.580	-20.245	1.00	37.06	MOL1	N
ATOM	3684	CZ2	TRP	F	52	33.731	-56.996	-21.243	1.00	40.09	MOL1	C
ATOM	3685	CZ3	TRP	F	52	34.581	-58.840	-22.545	1.00	44.34	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3686	CH2	TRP	F	52	33.514	-58.103	-22.024	1.00	34.21	MOL1	C
ATOM	3687	C	TRP	F	52	39.664	-56.789	-19.018	1.00	51.45	MOL1	C
ATOM	3688	O	TRP	F	52	38.757	-56.873	-18.198	1.00	59.40	MOL1	O
ATOM	3689	N	ASN	F	53	40.686	-55.949	-18.865	1.00	55.05	MOL1	N
ATOM	3690	CA	ASN	F	53	40.752	-55.066	-17.694	1.00	56.31	MOL1	C
ATOM	3691	CB	ASN	F	53	42.187	-54.834	-17.234	1.00	68.05	MOL1	C
ATOM	3692	CG	ASN	F	53	42.996	-56.104	-17.177	1.00	79.60	MOL1	C
ATOM	3693	OD1	ASN	F	53	44.233	-56.063	-17.167	1.00	89.95	MOL1	O
ATOM	3694	ND2	ASN	F	53	42.314	-57.242	-17.134	1.00	83.06	MOL1	N
ATOM	3695	C	ASN	F	53	40.164	-53.729	-18.077	1.00	55.76	MOL1	C
ATOM	3696	O	ASN	F	53	39.946	-53.450	-19.257	1.00	56.63	MOL1	O
ATOM	3697	N	TYR	F	54	39.903	-52.907	-17.072	1.00	55.17	MOL1	N
ATOM	3698	CA	TYR	F	54	39.351	-51.581	-17.291	1.00	59.25	MOL1	C
ATOM	3699	CB	TYR	F	54	38.046	-51.413	-16.515	1.00	61.17	MOL1	C
ATOM	3700	CG	TYR	F	54	36.839	-52.002	-17.210	1.00	65.10	MOL1	C
ATOM	3701	CD1	TYR	F	54	35.766	-52.515	-16.483	1.00	67.34	MOL1	C
ATOM	3702	CE1	TYR	F	54	34.649	-53.049	-17.125	1.00	68.18	MOL1	C
ATOM	3703	CD2	TYR	F	54	36.764	-52.035	-18.590	1.00	68.03	MOL1	C
ATOM	3704	CE2	TYR	F	54	35.654	-52.564	-19.239	1.00	72.89	MOL1	C
ATOM	3705	CZ	TYR	F	54	34.601	-53.071	-18.507	1.00	68.10	MOL1	C
ATOM	3706	OH	TYR	F	54	33.513	-53.596	-19.173	1.00	62.91	MOL1	O
ATOM	3707	C	TYR	F	54	40.386	-50.582	-16.812	1.00	64.47	MOL1	C
ATOM	3708	O	TYR	F	54	41.284	-50.928	-16.046	1.00	72.28	MOL1	O
ATOM	3709	N	THR	F	55	40.268	-49.346	-17.269	1.00	67.47	MOL1	N
ATOM	3710	CA	THR	F	55	41.212	-48.304	-16.897	1.00	70.95	MOL1	C
ATOM	3711	CB	THR	F	55	42.319	-48.181	-17.946	1.00	76.93	MOL1	C
ATOM	3712	OG1	THR	F	55	42.509	-49.447	-18.591	1.00	81.50	MOL1	O
ATOM	3713	CG2	THR	F	55	43.618	-47.754	-17.291	1.00	85.52	MOL1	C
ATOM	3714	C	THR	F	55	40.409	-47.033	-16.931	1.00	69.92	MOL1	C
ATOM	3715	O	THR	F	55	39.929	-46.649	-17.996	1.00	73.31	MOL1	O
ATOM	3716	N	VAL	F	56	40.256	-46.370	-15.794	1.00	67.42	MOL1	N
ATOM	3717	CA	VAL	F	56	39.453	-45.160	-15.799	1.00	71.36	MOL1	C
ATOM	3718	CB	VAL	F	56	38.452	-45.142	-14.632	1.00	73.26	MOL1	C
ATOM	3719	CG1	VAL	F	56	37.261	-44.256	-14.991	1.00	73.49	MOL1	C
ATOM	3720	CG2	VAL	F	56	38.005	-46.558	-14.303	1.00	76.29	MOL1	C
ATOM	3721	C	VAL	F	56	40.269	-43.888	-15.750	1.00	71.95	MOL1	C
ATOM	3722	O	VAL	F	56	41.329	-43.832	-15.135	1.00	78.43	MOL1	O
ATOM	3723	N	THR	F	57	39.760	-42.863	-16.409	1.00	69.02	MOL1	N
ATOM	3724	CA	THR	F	57	40.433	-41.587	-16.437	1.00	72.75	MOL1	C
ATOM	3725	CB	THR	F	57	40.886	-41.263	-17.872	1.00	78.64	MOL1	C
ATOM	3726	OG1	THR	F	57	39.783	-40.762	-18.640	1.00	77.06	MOL1	O
ATOM	3727	CG2	THR	F	57	41.392	-42.536	-18.539	1.00	79.68	MOL1	C
ATOM	3728	C	THR	F	57	39.395	-40.585	-15.977	1.00	72.29	MOL1	C
ATOM	3729	O	THR	F	57	38.227	-40.685	-16.358	1.00	71.48	MOL1	O
ATOM	3730	N	TRP	F	58	39.797	-39.632	-15.147	1.00	68.75	MOL1	N
ATOM	3731	CA	TRP	F	58	38.842	-38.646	-14.685	1.00	67.42	MOL1	C
ATOM	3732	CB	TRP	F	58	38.601	-38.810	-13.178	1.00	76.07	MOL1	C
ATOM	3733	CG	TRP	F	58	37.579	-37.852	-12.651	1.00	87.01	MOL1	C
ATOM	3734	CD2	TRP	F	58	37.832	-36.661	-11.892	1.00	92.81	MOL1	C
ATOM	3735	CE2	TRP	F	58	36.597	-35.995	-11.735	1.00	94.18	MOL1	C
ATOM	3736	CE3	TRP	F	58	38.984	-36.090	-11.334	1.00	90.84	MOL1	C
ATOM	3737	CD1	TRP	F	58	36.236	-37.866	-12.903	1.00	86.10	MOL1	C
ATOM	3738	NE1	TRP	F	58	35.640	-36.751	-12.360	1.00	92.26	MOL1	N
ATOM	3739	CZ2	TRP	F	58	36.482	-34.788	-11.048	1.00	95.08	MOL1	C
ATOM	3740	CZ3	TRP	F	58	38.867	-34.894	-10.654	1.00	91.61	MOL1	C
ATOM	3741	CH2	TRP	F	58	37.626	-34.254	-10.517	1.00	95.27	MOL1	C
ATOM	3742	C	TRP	F	58	39.304	-37.233	-15.006	1.00	62.54	MOL1	C
ATOM	3743	O	TRP	F	58	40.418	-36.851	-14.682	1.00	66.07	MOL1	O
ATOM	3744	N	ASP	F	59	38.447	-36.468	-15.666	1.00	62.09	MOL1	N
ATOM	3745	CA	ASP	F	59	38.758	-35.088	-16.018	1.00	68.68	MOL1	C
ATOM	3746	CB	ASP	F	59	38.986	-34.921	-17.517	1.00	71.70	MOL1	C
ATOM	3747	CG	ASP	F	59	39.302	-33.480	-17.896	1.00	73.25	MOL1	C
ATOM	3748	OD1	ASP	F	59	38.726	-32.549	-17.286	1.00	64.92	MOL1	O
ATOM	3749	OD2	ASP	F	59	40.125	-33.281	-18.815	1.00	80.05	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	3750	C	ASP	F	59	37.580	-34.221	-15.648	1.00	74.69	MOL1	C
ATOM	3751	O	ASP	F	59	36.504	-34.332	-16.247	1.00	74.80	MOL1	O
ATOM	3752	N	PRO	F	60	37.768	-33.335	-14.664	1.00	78.98	MOL1	N
ATOM	3753	CD	PRO	F	60	38.998	-33.204	-13.869	1.00	79.46	MOL1	C
ATOM	3754	CA	PRO	F	60	36.738	-32.415	-14.178	1.00	80.65	MOL1	C
ATOM	3755	CB	PRO	F	60	37.440	-31.694	-13.026	1.00	80.21	MOL1	C
ATOM	3756	CG	PRO	F	60	38.886	-31.799	-13.381	1.00	80.21	MOL1	C
ATOM	3757	C	PRO	F	60	36.164	-31.457	-15.233	1.00	81.09	MOL1	C
ATOM	3758	O	PRO	F	60	35.046	-30.951	-15.067	1.00	83.18	MOL1	O
ATOM	3759	N	ASN	F	61	36.912	-31.217	-16.309	1.00	76.42	MOL1	N
ATOM	3760	CA	ASN	F	61	36.438	-30.336	-17.372	1.00	78.59	MOL1	C
ATOM	3761	CB	ASN	F	61	37.543	-29.386	-17.828	1.00	90.58	MOL1	C
ATOM	3762	CG	ASN	F	61	37.940	-28.403	-16.750	1.00	103.85	MOL1	C
ATOM	3763	OD1	ASN	F	61	37.083	-27.799	-16.097	1.00	106.74	MOL1	O
ATOM	3764	ND2	ASN	F	61	39.246	-28.226	-16.559	1.00	111.58	MOL1	N
ATOM	3765	C	ASN	F	61	35.966	-31.145	-18.558	1.00	74.54	MOL1	C
ATOM	3766	O	ASN	F	61	36.094	-30.719	-19.705	1.00	73.22	MOL1	O
ATOM	3767	N	ARG	F	62	35.410	-32.313	-18.275	1.00	72.69	MOL1	N
ATOM	3768	CA	ARG	F	62	34.933	-33.189	-19.328	1.00	72.28	MOL1	C
ATOM	3769	CB	ARG	F	62	36.011	-34.227	-19.647	1.00	71.86	MOL1	C
ATOM	3770	CG	ARG	F	62	35.657	-35.181	-20.775	1.00	73.66	MOL1	C
ATOM	3771	CD	ARG	F	62	36.784	-36.174	-21.045	1.00	70.50	MOL1	C
ATOM	3772	NE	ARG	F	62	37.021	-37.058	-19.909	1.00	63.47	MOL1	N
ATOM	3773	CZ	ARG	F	62	37.876	-38.076	-19.922	1.00	62.97	MOL1	C
ATOM	3774	NH1	ARG	F	62	38.580	-38.337	-21.017	1.00	67.00	MOL1	N
ATOM	3775	NH2	ARG	F	62	38.017	-38.843	-18.849	1.00	58.63	MOL1	N
ATOM	3776	C	ARG	F	62	33.653	-33.897	-18.917	1.00	72.52	MOL1	C
ATOM	3777	O	ARG	F	62	33.569	-34.453	-17.820	1.00	74.93	MOL1	O
ATOM	3778	N	TYR	F	63	32.648	-33.868	-19.785	1.00	68.99	MOL1	N
ATOM	3779	CA	TYR	F	63	31.416	-34.567	-19.477	1.00	66.19	MOL1	C
ATOM	3780	CB	TYR	F	63	30.227	-33.630	-19.378	1.00	74.78	MOL1	C
ATOM	3781	CG	TYR	F	63	28.946	-34.400	-19.155	1.00	81.35	MOL1	C
ATOM	3782	CD1	TYR	F	63	27.948	-34.430	-20.117	1.00	83.49	MOL1	C
ATOM	3783	CE1	TYR	F	63	26.796	-35.179	-19.930	1.00	88.75	MOL1	C
ATOM	3784	CD2	TYR	F	63	28.759	-35.137	-17.994	1.00	87.18	MOL1	C
ATOM	3785	CE2	TYR	F	63	27.614	-35.889	-17.795	1.00	92.81	MOL1	C
ATOM	3786	CZ	TYR	F	63	26.636	-35.908	-18.766	1.00	92.83	MOL1	C
ATOM	3787	OH	TYR	F	63	25.506	-36.673	-18.569	1.00	96.03	MOL1	O
ATOM	3788	C	TYR	F	63	31.130	-35.575	-20.552	1.00	63.85	MOL1	C
ATOM	3789	O	TYR	F	63	31.003	-35.223	-21.725	1.00	67.96	MOL1	O
ATOM	3790	N	PRO	F	64	31.055	-36.853	-20.171	1.00	58.19	MOL1	N
ATOM	3791	CD	PRO	F	64	30.733	-37.996	-21.039	1.00	62.74	MOL1	C
ATOM	3792	CA	PRO	F	64	31.237	-37.303	-18.798	1.00	57.91	MOL1	C
ATOM	3793	CB	PRO	F	64	30.807	-38.758	-18.859	1.00	66.16	MOL1	C
ATOM	3794	CG	PRO	F	64	31.243	-39.160	-20.219	1.00	63.83	MOL1	C
ATOM	3795	C	PRO	F	64	32.668	-37.167	-18.319	1.00	60.20	MOL1	C
ATOM	3796	O	PRO	F	64	33.603	-37.219	-19.107	1.00	55.01	MOL1	O
ATOM	3797	N	SER	F	65	32.817	-37.015	-17.008	1.00	66.64	MOL1	N
ATOM	3798	CA	SER	F	65	34.111	-36.862	-16.349	1.00	66.34	MOL1	C
ATOM	3799	CB	SER	F	65	33.875	-36.451	-14.907	1.00	75.37	MOL1	C
ATOM	3800	OG	SER	F	65	32.951	-37.347	-14.296	1.00	92.37	MOL1	O
ATOM	3801	C	SER	F	65	34.950	-38.137	-16.375	1.00	63.39	MOL1	C
ATOM	3802	O	SER	F	65	36.153	-38.086	-16.623	1.00	65.34	MOL1	O
ATOM	3803	N	GLU	F	66	34.324	-39.276	-16.090	1.00	58.70	MOL1	N
ATOM	3804	CA	GLU	F	66	35.033	-40.551	-16.106	1.00	60.70	MOL1	C
ATOM	3805	CB	GLU	F	66	34.458	-41.543	-15.073	1.00	69.86	MOL1	C
ATOM	3806	CG	GLU	F	66	34.838	-41.313	-13.593	1.00	97.36	MOL1	C
ATOM	3807	CD	GLU	F	66	33.864	-40.401	-12.812	1.00	111.30	MOL1	C
ATOM	3808	OE1	GLU	F	66	34.168	-40.083	-11.635	1.00	113.19	MOL1	O
ATOM	3809	OE2	GLU	F	66	32.802	-40.008	-13.357	1.00	118.22	MOL1	O
ATOM	3810	C	GLU	F	66	34.898	-41.177	-17.486	1.00	61.75	MOL1	C
ATOM	3811	O	GLU	F	66	33.811	-41.182	-18.070	1.00	65.70	MOL1	O
ATOM	3812	N	VAL	F	67	36.005	-41.684	-18.020	1.00	59.43	MOL1	N
ATOM	3813	CA	VAL	F	67	35.980	-42.357	-19.313	1.00	54.35	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3814	CB	VAL	F	67	36.684	-41.569	-20.407	1.00	47.87	MOL1	C
ATOM	3815	CG1	VAL	F	67	36.666	-42.369	-21.679	1.00	45.44	MOL1	C
ATOM	3816	CG2	VAL	F	67	35.985	-40.265	-20.640	1.00	49.36	MOL1	C
ATOM	3817	C	VAL	F	67	36.725	-43.654	-19.122	1.00	56.91	MOL1	C
ATOM	3818	O	VAL	F	67	37.925	-43.648	-18.848	1.00	59.77	MOL1	O
ATOM	3819	N	VAL	F	68	36.010	-44.762	-19.266	1.00	54.74	MOL1	N
ATOM	3820	CA	VAL	F	68	36.603	-46.067	-19.074	1.00	53.09	MOL1	C
ATOM	3821	CB	VAL	F	68	35.673	-46.929	-18.297	1.00	55.87	MOL1	C
ATOM	3822	CG1	VAL	F	68	36.351	-48.230	-17.923	1.00	58.77	MOL1	C
ATOM	3823	CG2	VAL	F	68	35.217	-46.170	-17.103	1.00	65.85	MOL1	C
ATOM	3824	C	VAL	F	68	36.941	-46.794	-20.358	1.00	54.55	MOL1	C
ATOM	3825	O	VAL	F	68	36.078	-46.982	-21.232	1.00	52.08	MOL1	O
ATOM	3826	N	GLN	F	69	38.199	-47.227	-20.438	1.00	51.16	MOL1	N
ATOM	3827	CA	GLN	F	69	38.722	-47.943	-21.590	1.00	49.53	MOL1	C
ATOM	3828	CB	GLN	F	69	39.974	-47.243	-22.097	1.00	50.63	MOL1	C
ATOM	3829	CG	GLN	F	69	39.772	-45.810	-22.539	1.00	45.74	MOL1	C
ATOM	3830	CD	GLN	F	69	39.337	-45.726	-23.977	1.00	48.55	MOL1	C
ATOM	3831	OE1	GLN	F	69	39.230	-46.743	-24.672	1.00	52.21	MOL1	O
ATOM	3832	NE2	GLN	F	69	39.092	-44.512	-24.441	1.00	40.51	MOL1	N
ATOM	3833	C	GLN	F	69	39.081	-49.352	-21.170	1.00	50.82	MOL1	C
ATOM	3834	O	GLN	F	69	39.650	-49.548	-20.096	1.00	51.37	MOL1	O
ATOM	3835	N	ALA	F	70	38.758	-50.321	-22.024	1.00	52.64	MOL1	N
ATOM	3836	CA	ALA	F	70	39.037	-51.736	-21.767	1.00	57.49	MOL1	C
ATOM	3837	CB	ALA	F	70	37.879	-52.577	-22.266	1.00	55.06	MOL1	C
ATOM	3838	C	ALA	F	70	40.321	-52.181	-22.460	1.00	57.95	MOL1	C
ATOM	3839	O	ALA	F	70	40.815	-51.489	-23.341	1.00	66.12	MOL1	O
ATOM	3840	N	GLN	F	71	40.850	-53.339	-22.077	1.00	55.45	MOL1	N
ATOM	3841	CA	GLN	F	71	42.067	-53.859	-22.690	1.00	51.57	MOL1	C
ATOM	3842	CB	GLN	F	71	43.286	-53.410	-21.893	1.00	57.65	MOL1	C
ATOM	3843	CG	GLN	F	71	43.255	-51.991	-21.378	1.00	73.00	MOL1	C
ATOM	3844	CD	GLN	F	71	44.614	-51.574	-20.838	1.00	89.88	MOL1	C
ATOM	3845	OE1	GLN	F	71	45.539	-51.263	-21.603	1.00	87.49	MOL1	O
ATOM	3846	NE2	GLN	F	71	44.751	-51.590	-19.512	1.00	98.59	MOL1	N
ATOM	3847	C	GLN	F	71	42.030	-55.376	-22.649	1.00	45.36	MOL1	C
ATOM	3848	O	GLN	F	71	42.037	-55.923	-21.563	1.00	49.02	MOL1	O
ATOM	3849	N	CYS	F	72	42.007	-56.067	-23.787	1.00	40.81	MOL1	N
ATOM	3850	CA	CYS	F	72	41.987	-57.536	-23.735	1.00	46.47	MOL1	C
ATOM	3851	C	CYS	F	72	43.147	-58.100	-22.906	1.00	50.35	MOL1	C
ATOM	3852	O	CYS	F	72	44.312	-57.779	-23.134	1.00	49.99	MOL1	O
ATOM	3853	CB	CYS	F	72	42.036	-58.167	-25.130	1.00	49.20	MOL1	C
ATOM	3854	SG	CYS	F	72	40.821	-57.505	-26.309	1.00	63.66	MOL1	S
ATOM	3855	N	ARG	F	73	42.808	-58.960	-21.951	1.00	58.42	MOL1	N
ATOM	3856	CA	ARG	F	73	43.772	-59.571	-21.043	1.00	60.73	MOL1	C
ATOM	3857	CB	ARG	F	73	43.019	-60.283	-19.910	1.00	66.85	MOL1	C
ATOM	3858	CG	ARG	F	73	43.140	-59.651	-18.519	1.00	75.53	MOL1	C
ATOM	3859	CD	ARG	F	73	42.787	-60.677	-17.422	1.00	86.65	MOL1	C
ATOM	3860	NE	ARG	F	73	43.657	-61.858	-17.489	1.00	99.91	MOL1	N
ATOM	3861	CZ	ARG	F	73	43.302	-63.086	-17.111	1.00	102.54	MOL1	C
ATOM	3862	NH1	ARG	F	73	42.085	-63.302	-16.631	1.00	103.80	MOL1	N
ATOM	3863	NH2	ARG	F	73	44.153	-64.103	-17.235	1.00	99.72	MOL1	N
ATOM	3864	C	ARG	F	73	44.750	-60.554	-21.685	1.00	61.26	MOL1	C
ATOM	3865	O	ARG	F	73	45.881	-60.682	-21.226	1.00	62.79	MOL1	O
ATOM	3866	N	ASN	F	74	44.325	-61.251	-22.732	1.00	60.98	MOL1	N
ATOM	3867	CA	ASN	F	74	45.201	-62.223	-23.374	1.00	64.24	MOL1	C
ATOM	3868	CB	ASN	F	74	44.846	-63.619	-22.878	1.00	75.85	MOL1	C
ATOM	3869	CG	ASN	F	74	45.008	-63.752	-21.367	1.00	86.27	MOL1	C
ATOM	3870	OD1	ASN	F	74	44.398	-64.618	-20.733	1.00	96.59	MOL1	O
ATOM	3871	ND2	ASN	F	74	45.845	-62.900	-20.786	1.00	87.18	MOL1	N
ATOM	3872	C	ASN	F	74	45.093	-62.147	-24.882	1.00	61.52	MOL1	C
ATOM	3873	O	ASN	F	74	44.317	-61.362	-25.396	1.00	65.30	MOL1	O
ATOM	3874	N	LEU	F	75	45.880	-62.940	-25.596	1.00	59.68	MOL1	N
ATOM	3875	CA	LEU	F	75	45.820	-62.906	-27.049	1.00	57.37	MOL1	C
ATOM	3876	CB	LEU	F	75	47.182	-63.191	-27.668	1.00	53.74	MOL1	C
ATOM	3877	CG	LEU	F	75	48.268	-62.124	-27.616	1.00	53.32	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	3878	CD1	LEU	F	75	49.181	-62.346	-28.811	1.00	45.91	MOL1	C
ATOM	3879	CD2	LEU	F	75	47.671	-60.728	-27.665	1.00	48.65	MOL1	C
ATOM	3880	C	LEU	F	75	44.831	-63.920	-27.570	1.00	62.93	MOL1	C
ATOM	3881	O	LEU	F	75	44.110	-63.657	-28.525	1.00	64.55	MOL1	O
ATOM	3882	N	GLY	F	76	44.816	-65.096	-26.956	1.00	71.53	MOL1	N
ATOM	3883	CA	GLY	F	76	43.887	-66.131	-27.379	1.00	78.22	MOL1	C
ATOM	3884	C	GLY	F	76	42.646	-66.040	-26.519	1.00	82.80	MOL1	C
ATOM	3885	O	GLY	F	76	42.425	-65.013	-25.862	1.00	85.29	MOL1	O
ATOM	3886	N	CYS	F	77	41.836	-67.095	-26.517	1.00	81.74	MOL1	N
ATOM	3887	CA	CYS	F	77	40.624	-67.120	-25.707	1.00	84.88	MOL1	C
ATOM	3888	C	CYS	F	77	40.850	-68.125	-24.597	1.00	85.30	MOL1	C
ATOM	3889	O	CYS	F	77	41.829	-68.859	-24.622	1.00	90.02	MOL1	O
ATOM	3890	CB	CYS	F	77	39.437	-67.525	-26.568	1.00	84.73	MOL1	C
ATOM	3891	SG	CYS	F	77	39.328	-66.515	-28.080	1.00	95.89	MOL1	S
ATOM	3892	N	ILE	F	78	39.944	-68.165	-23.634	1.00	87.14	MOL1	N
ATOM	3893	CA	ILE	F	78	40.065	-69.061	-22.500	1.00	95.81	MOL1	C
ATOM	3894	CB	ILE	F	78	39.979	-68.213	-21.219	1.00	94.33	MOL1	C
ATOM	3895	CG2	ILE	F	78	39.306	-68.996	-20.107	1.00	97.42	MOL1	C
ATOM	3896	CG1	ILE	F	78	41.372	-67.662	-20.891	1.00	94.21	MOL1	C
ATOM	3897	CD1	ILE	F	78	41.471	-66.931	-19.555	1.00	94.35	MOL1	C
ATOM	3898	C	ILE	F	78	39.002	-70.175	-22.483	1.00	103.80	MOL1	C
ATOM	3899	O	ILE	F	78	37.848	-69.926	-22.812	1.00	106.45	MOL1	O
ATOM	3900	N	ASN	F	79	39.395	-71.394	-22.106	1.00	112.68	MOL1	N
ATOM	3901	CA	ASN	F	79	38.471	-72.535	-22.043	1.00	122.59	MOL1	C
ATOM	3902	CB	ASN	F	79	39.182	-73.837	-22.434	1.00	129.08	MOL1	C
ATOM	3903	CG	ASN	F	79	39.563	-73.893	-23.900	1.00	139.42	MOL1	C
ATOM	3904	OD1	ASN	F	79	38.707	-73.800	-24.788	1.00	144.42	MOL1	O
ATOM	3905	ND2	ASN	F	79	40.857	-74.059	-24.165	1.00	143.29	MOL1	N
ATOM	3906	C	ASN	F	79	37.907	-72.729	-20.637	1.00	126.34	MOL1	C
ATOM	3907	O	ASN	F	79	37.789	-71.778	-19.861	1.00	124.78	MOL1	O
ATOM	3908	N	ALA	F	80	37.566	-73.981	-20.326	1.00	130.91	MOL1	N
ATOM	3909	CA	ALA	F	80	37.036	-74.346	-19.014	1.00	133.29	MOL1	C
ATOM	3910	CB	ALA	F	80	36.611	-75.812	-19.003	1.00	131.58	MOL1	C
ATOM	3911	C	ALA	F	80	38.132	-74.114	-17.987	1.00	135.12	MOL1	C
ATOM	3912	O	ALA	F	80	38.652	-75.064	-17.396	1.00	132.96	MOL1	O
ATOM	3913	N	GLN	F	81	38.484	-72.844	-17.796	1.00	139.60	MOL1	N
ATOM	3914	CA	GLN	F	81	39.526	-72.455	-16.852	1.00	142.21	MOL1	C
ATOM	3915	CB	GLN	F	81	39.186	-73.013	-15.463	1.00	144.86	MOL1	C
ATOM	3916	CG	GLN	F	81	40.143	-72.625	-14.348	1.00	147.70	MOL1	C
ATOM	3917	CD	GLN	F	81	39.934	-73.457	-13.094	1.00	151.40	MOL1	C
ATOM	3918	OE1	GLN	F	81	40.540	-73.195	-12.054	1.00	154.30	MOL1	O
ATOM	3919	NE2	GLN	F	81	39.077	-74.470	-13.190	1.00	150.41	MOL1	N
ATOM	3920	C	GLN	F	81	40.860	-73.028	-17.330	1.00	140.95	MOL1	C
ATOM	3921	O	GLN	F	81	41.834	-73.066	-16.579	1.00	143.16	MOL1	O
ATOM	3922	N	GLY	F	82	40.899	-73.459	-18.589	1.00	137.86	MOL1	N
ATOM	3923	CA	GLY	F	82	42.101	-74.066	-19.130	1.00	132.06	MOL1	C
ATOM	3924	C	GLY	F	82	43.000	-73.207	-19.990	1.00	126.42	MOL1	C
ATOM	3925	O	GLY	F	82	43.433	-73.635	-21.055	1.00	124.30	MOL1	O
ATOM	3926	N	LYS	F	83	43.282	-71.997	-19.527	1.00	123.62	MOL1	N
ATOM	3927	CA	LYS	F	83	44.169	-71.077	-20.237	1.00	121.91	MOL1	C
ATOM	3928	CB	LYS	F	83	45.638	-71.440	-19.938	1.00	128.60	MOL1	C
ATOM	3929	CG	LYS	F	83	46.659	-70.323	-20.198	1.00	130.49	MOL1	C
ATOM	3930	CD	LYS	F	83	48.091	-70.760	-19.873	1.00	133.53	MOL1	C
ATOM	3931	CE	LYS	F	83	48.585	-71.854	-20.823	1.00	134.47	MOL1	C
ATOM	3932	NZ	LYS	F	83	50.000	-72.257	-20.552	1.00	131.10	MOL1	N
ATOM	3933	C	LYS	F	83	43.965	-70.982	-21.756	1.00	115.06	MOL1	C
ATOM	3934	O	LYS	F	83	43.163	-71.708	-22.353	1.00	110.32	MOL1	O
ATOM	3935	N	GLU	F	84	44.729	-70.073	-22.358	1.00	109.95	MOL1	N
ATOM	3936	CA	GLU	F	84	44.687	-69.776	-23.786	1.00	102.67	MOL1	C
ATOM	3937	CB	GLU	F	84	45.936	-68.982	-24.206	1.00	106.26	MOL1	C
ATOM	3938	CG	GLU	F	84	45.882	-67.490	-23.901	1.00	110.45	MOL1	C
ATOM	3939	CD	GLU	F	84	47.099	-66.735	-24.414	1.00	114.20	MOL1	C
ATOM	3940	OE1	GLU	F	84	47.116	-65.489	-24.292	1.00	116.18	MOL1	O
ATOM	3941	OE2	GLU	F	84	48.037	-67.383	-24.935	1.00	116.06	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	3942	C	GLU	F	84	44.511	-70.921	-24.758	1.00	93.83	MOL1	C
ATOM	3943	O	GLU	F	84	44.848	-72.067	-24.482	1.00	91.06	MOL1	O
ATOM	3944	N	ASP	F	85	43.956	-70.567	-25.909	1.00	87.09	MOL1	N
ATOM	3945	CA	ASP	F	85	43.753	-71.489	-27.007	1.00	84.02	MOL1	C
ATOM	3946	CB	ASP	F	85	42.350	-72.054	-27.032	1.00	79.98	MOL1	C
ATOM	3947	CG	ASP	F	85	42.134	-72.933	-28.234	1.00	81.68	MOL1	C
ATOM	3948	OD1	ASP	F	85	42.464	-74.132	-28.154	1.00	92.83	MOL1	O
ATOM	3949	OD2	ASP	F	85	41.674	-72.420	-29.272	1.00	73.58	MOL1	O
ATOM	3950	C	ASP	F	85	43.964	-70.688	-28.283	1.00	80.46	MOL1	C
ATOM	3951	O	ASP	F	85	43.022	-70.425	-29.023	1.00	83.23	MOL1	O
ATOM	3952	N	ILE	F	86	45.210	-70.305	-28.528	1.00	73.01	MOL1	N
ATOM	3953	CA	ILE	F	86	45.587	-69.511	-29.685	1.00	66.86	MOL1	C
ATOM	3954	CB	ILE	F	86	47.086	-69.616	-29.916	1.00	62.51	MOL1	C
ATOM	3955	CG2	ILE	F	86	47.517	-68.659	-31.001	1.00	65.24	MOL1	C
ATOM	3956	CG1	ILE	F	86	47.819	-69.275	-28.627	1.00	63.85	MOL1	C
ATOM	3957	CD1	ILE	F	86	47.574	-67.867	-28.164	1.00	67.54	MOL1	C
ATOM	3958	C	ILE	F	86	44.878	-69.862	-30.990	1.00	68.99	MOL1	C
ATOM	3959	O	ILE	F	86	44.976	-69.131	-31.968	1.00	68.04	MOL1	O
ATOM	3960	N	SER	F	87	44.180	-70.986	-31.019	1.00	71.82	MOL1	N
ATOM	3961	CA	SER	F	87	43.469	-71.387	-32.221	1.00	74.84	MOL1	C
ATOM	3962	CB	SER	F	87	42.552	-72.576	-31.903	1.00	82.77	MOL1	C
ATOM	3963	OG	SER	F	87	41.886	-73.074	-33.056	1.00	95.03	MOL1	O
ATOM	3964	C	SER	F	87	42.646	-70.187	-32.667	1.00	72.74	MOL1	C
ATOM	3965	O	SER	F	87	42.545	-69.884	-33.857	1.00	76.14	MOL1	O
ATOM	3966	N	MET	F	88	42.063	-69.508	-31.686	1.00	66.96	MOL1	N
ATOM	3967	CA	MET	F	88	41.255	-68.327	-31.930	1.00	63.80	MOL1	C
ATOM	3968	CB	MET	F	88	39.776	-68.664	-31.766	1.00	69.38	MOL1	C
ATOM	3969	CG	MET	F	88	39.454	-69.527	-30.563	1.00	66.78	MOL1	C
ATOM	3970	SD	MET	F	88	37.930	-70.420	-30.863	1.00	82.70	MOL1	S
ATOM	3971	CE	MET	F	88	37.841	-70.294	-32.706	1.00	63.90	MOL1	C
ATOM	3972	C	MET	F	88	41.698	-67.259	-30.946	1.00	59.78	MOL1	C
ATOM	3973	O	MET	F	88	42.161	-67.568	-29.852	1.00	59.48	MOL1	O
ATOM	3974	N	ASN	F	89	41.576	-65.998	-31.329	1.00	55.69	MOL1	N
ATOM	3975	CA	ASN	F	89	42.027	-64.939	-30.444	1.00	53.75	MOL1	C
ATOM	3976	CB	ASN	F	89	43.081	-64.070	-31.142	1.00	52.35	MOL1	C
ATOM	3977	CG	ASN	F	89	43.344	-64.504	-32.578	1.00	64.68	MOL1	C
ATOM	3978	OD1	ASN	F	89	42.488	-64.364	-33.479	1.00	58.98	MOL1	O
ATOM	3979	ND2	ASN	F	89	44.542	-65.039	-32.803	1.00	63.95	MOL1	N
ATOM	3980	C	ASN	F	89	40.906	-64.057	-29.958	1.00	49.73	MOL1	C
ATOM	3981	O	ASN	F	89	39.824	-64.029	-30.535	1.00	44.83	MOL1	O
ATOM	3982	N	SER	F	90	41.187	-63.339	-28.882	1.00	47.88	MOL1	N
ATOM	3983	CA	SER	F	90	40.236	-62.421	-28.309	1.00	46.14	MOL1	C
ATOM	3984	CB	SER	F	90	40.332	-62.444	-26.788	1.00	50.49	MOL1	C
ATOM	3985	OG	SER	F	90	41.550	-61.893	-26.350	1.00	54.17	MOL1	O
ATOM	3986	C	SER	F	90	40.602	-61.044	-28.842	1.00	45.32	MOL1	C
ATOM	3987	O	SER	F	90	41.759	-60.661	-28.846	1.00	44.68	MOL1	O
ATOM	3988	N	VAL	F	91	39.606	-60.299	-29.296	1.00	49.75	MOL1	N
ATOM	3989	CA	VAL	F	91	39.835	-58.975	-29.855	1.00	43.00	MOL1	C
ATOM	3990	CB	VAL	F	91	39.562	-58.996	-31.353	1.00	44.58	MOL1	C
ATOM	3991	CG1	VAL	F	91	40.346	-60.112	-32.007	1.00	39.33	MOL1	C
ATOM	3992	CG2	VAL	F	91	38.088	-59.190	-31.590	1.00	43.86	MOL1	C
ATOM	3993	C	VAL	F	91	38.951	-57.901	-29.225	1.00	40.23	MOL1	C
ATOM	3994	O	VAL	F	91	37.839	-58.165	-28.784	1.00	41.96	MOL1	O
ATOM	3995	N	PRO	F	92	39.438	-56.664	-29.196	1.00	38.69	MOL1	N
ATOM	3996	CD	PRO	F	92	40.726	-56.207	-29.746	1.00	35.80	MOL1	C
ATOM	3997	CA	PRO	F	92	38.702	-55.543	-28.622	1.00	36.62	MOL1	C
ATOM	3998	CB	PRO	F	92	39.752	-54.448	-28.580	1.00	36.65	MOL1	C
ATOM	3999	CG	PRO	F	92	40.517	-54.706	-29.835	1.00	30.67	MOL1	C
ATOM	4000	C	PRO	F	92	37.536	-55.119	-29.479	1.00	40.66	MOL1	C
ATOM	4001	O	PRO	F	92	37.569	-55.269	-30.707	1.00	34.89	MOL1	O
ATOM	4002	N	ILE	F	93	36.510	-54.586	-28.817	1.00	47.41	MOL1	N
ATOM	4003	CA	ILE	F	93	35.332	-54.039	-29.486	1.00	50.35	MOL1	C
ATOM	4004	CB	ILE	F	93	34.036	-54.655	-28.992	1.00	45.89	MOL1	C
ATOM	4005	CG2	ILE	F	93	32.872	-53.861	-29.482	1.00	41.56	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4006	CG1	ILE	F	93	33.907	-56.042	-29.582	1.00	52.55	MOL1	C
ATOM	4007	CD1	ILE	F	93	34.323	-56.053	-31.053	1.00	54.32	MOL1	C
ATOM	4008	C	ILE	F	93	35.358	-52.563	-29.143	1.00	52.88	MOL1	C
ATOM	4009	O	ILE	F	93	35.367	-52.186	-27.965	1.00	53.96	MOL1	O
ATOM	4010	N	GLN	F	94	35.390	-51.726	-30.169	1.00	54.61	MOL1	N
ATOM	4011	CA	GLN	F	94	35.480	-50.299	-29.932	1.00	61.83	MOL1	C
ATOM	4012	CB	GLN	F	94	36.777	-49.786	-30.567	1.00	65.47	MOL1	C
ATOM	4013	CG	GLN	F	94	37.895	-50.835	-30.493	1.00	73.25	MOL1	C
ATOM	4014	CD	GLN	F	94	39.256	-50.339	-30.958	1.00	80.32	MOL1	C
ATOM	4015	OE1	GLN	F	94	39.385	-49.742	-32.025	1.00	85.68	MOL1	O
ATOM	4016	NE2	GLN	F	94	40.285	-50.606	-30.159	1.00	82.71	MOL1	N
ATOM	4017	C	GLN	F	94	34.270	-49.526	-30.436	1.00	62.17	MOL1	C
ATOM	4018	O	GLN	F	94	33.593	-49.945	-31.369	1.00	61.53	MOL1	O
ATOM	4019	N	GLN	F	95	33.980	-48.411	-29.784	1.00	64.37	MOL1	N
ATOM	4020	CA	GLN	F	95	32.865	-47.585	-30.193	1.00	69.61	MOL1	C
ATOM	4021	CB	GLN	F	95	31.633	-47.854	-29.324	1.00	76.42	MOL1	C
ATOM	4022	CG	GLN	F	95	30.368	-47.159	-29.829	1.00	90.85	MOL1	C
ATOM	4023	CD	GLN	F	95	29.994	-47.569	-31.257	1.00	99.98	MOL1	C
ATOM	4024	OE1	GLN	F	95	30.834	-47.553	-32.165	1.00	101.86	MOL1	O
ATOM	4025	NE2	GLN	F	95	28.725	-47.925	-31.461	1.00	101.41	MOL1	N
ATOM	4026	C	GLN	F	95	33.286	-46.126	-30.092	1.00	72.26	MOL1	C
ATOM	4027	O	GLN	F	95	33.953	-45.722	-29.137	1.00	74.42	MOL1	O
ATOM	4028	N	GLU	F	96	32.925	-45.342	-31.100	1.00	72.04	MOL1	N
ATOM	4029	CA	GLU	F	96	33.260	-43.926	-31.106	1.00	73.98	MOL1	C
ATOM	4030	CB	GLU	F	96	33.285	-43.385	-32.533	1.00	89.18	MOL1	C
ATOM	4031	CG	GLU	F	96	33.479	-44.450	-33.609	1.00	111.90	MOL1	C
ATOM	4032	CD	GLU	F	96	32.691	-44.149	-34.886	1.00	123.07	MOL1	C
ATOM	4033	OE1	GLU	F	96	32.906	-43.070	-35.490	1.00	128.72	MOL1	O
ATOM	4034	OE2	GLU	F	96	31.853	-44.996	-35.283	1.00	126.28	MOL1	O
ATOM	4035	C	GLU	F	96	32.164	-43.214	-30.327	1.00	69.11	MOL1	C
ATOM	4036	O	GLU	F	96	30.976	-43.450	-30.547	1.00	65.22	MOL1	O
ATOM	4037	N	THR	F	97	32.553	-42.346	-29.409	1.00	66.72	MOL1	N
ATOM	4038	CA	THR	F	97	31.563	-41.626	-28.639	1.00	65.32	MOL1	C
ATOM	4039	CB	THR	F	97	31.453	-42.179	-27.217	1.00	70.87	MOL1	C
ATOM	4040	OG1	THR	F	97	30.424	-41.476	-26.502	1.00	77.01	MOL1	O
ATOM	4041	CG2	THR	F	97	32.777	-42.012	-26.490	1.00	74.82	MOL1	C
ATOM	4042	C	THR	F	97	31.919	-40.157	-28.572	1.00	63.86	MOL1	C
ATOM	4043	O	THR	F	97	33.015	-39.749	-28.959	1.00	62.62	MOL1	O
ATOM	4044	N	LEU	F	98	30.972	-39.367	-28.083	1.00	62.38	MOL1	N
ATOM	4045	CA	LEU	F	98	31.149	-37.931	-27.943	1.00	55.68	MOL1	C
ATOM	4046	CB	LEU	F	98	29.928	-37.211	-28.489	1.00	46.64	MOL1	C
ATOM	4047	CG	LEU	F	98	30.174	-36.317	-29.694	1.00	53.13	MOL1	C
ATOM	4048	CD1	LEU	F	98	31.477	-36.689	-30.361	1.00	50.09	MOL1	C
ATOM	4049	CD2	LEU	F	98	28.999	-36.448	-30.655	1.00	50.02	MOL1	C
ATOM	4050	C	LEU	F	98	31.317	-37.557	-26.483	1.00	56.71	MOL1	C
ATOM	4051	O	LEU	F	98	30.759	-38.205	-25.593	1.00	61.16	MOL1	O
ATOM	4052	N	VAL	F	99	32.104	-36.521	-26.236	1.00	55.74	MOL1	N
ATOM	4053	CA	VAL	F	99	32.297	-36.019	-24.879	1.00	59.04	MOL1	C
ATOM	4054	CB	VAL	F	99	33.607	-36.506	-24.238	1.00	58.49	MOL1	C
ATOM	4055	CG1	VAL	F	99	33.606	-38.022	-24.126	1.00	57.95	MOL1	C
ATOM	4056	CG2	VAL	F	99	34.780	-36.021	-25.046	1.00	61.88	MOL1	C
ATOM	4057	C	VAL	F	99	32.349	-34.513	-25.011	1.00	59.25	MOL1	C
ATOM	4058	O	VAL	F	99	32.518	-33.992	-26.107	1.00	61.46	MOL1	O
ATOM	4059	N	VAL	F	100	32.190	-33.800	-23.911	1.00	60.54	MOL1	N
ATOM	4060	CA	VAL	F	100	32.228	-32.354	-24.000	1.00	66.71	MOL1	C
ATOM	4061	CB	VAL	F	100	30.931	-31.750	-23.498	1.00	65.97	MOL1	C
ATOM	4062	CG1	VAL	F	100	29.859	-31.863	-24.556	1.00	67.66	MOL1	C
ATOM	4063	CG2	VAL	F	100	30.506	-32.480	-22.247	1.00	64.33	MOL1	C
ATOM	4064	C	VAL	F	100	33.362	-31.793	-23.178	1.00	73.23	MOL1	C
ATOM	4065	O	VAL	F	100	33.632	-32.274	-22.070	1.00	74.60	MOL1	O
ATOM	4066	N	ARG	F	101	34.032	-30.783	-23.727	1.00	76.93	MOL1	N
ATOM	4067	CA	ARG	F	101	35.127	-30.142	-23.024	1.00	83.86	MOL1	C
ATOM	4068	CB	ARG	F	101	36.377	-30.089	-23.896	1.00	85.11	MOL1	C
ATOM	4069	CG	ARG	F	101	37.053	-31.438	-23.963	1.00	92.87	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4070	CD	ARG	F	101	38.536	-31.369	-24.259	1.00	97.30	MOL1	C
ATOM	4071	NE	ARG	F	101	39.193	-32.540	-23.689	1.00	100.67	MOL1	N
ATOM	4072	CZ	ARG	F	101	39.300	-32.762	-22.383	1.00	102.06	MOL1	C
ATOM	4073	NH1	ARG	F	101	38.803	-31.884	-21.521	1.00	100.04	MOL1	N
ATOM	4074	NH2	ARG	F	101	39.881	-33.870	-21.936	1.00	104.84	MOL1	N
ATOM	4075	C	ARG	F	101	34.721	-28.753	-22.585	1.00	89.71	MOL1	C
ATOM	4076	O	ARG	F	101	34.097	-28.005	-23.340	1.00	89.09	MOL1	O
ATOM	4077	N	ARG	F	102	35.054	-28.430	-21.341	1.00	97.16	MOL1	N
ATOM	4078	CA	ARG	F	102	34.730	-27.135	-20.767	1.00	107.35	MOL1	C
ATOM	4079	CB	ARG	F	102	34.273	-27.316	-19.312	1.00	110.28	MOL1	C
ATOM	4080	CG	ARG	F	102	33.813	-26.036	-18.622	1.00	116.90	MOL1	C
ATOM	4081	CD	ARG	F	102	33.005	-26.322	-17.350	1.00	118.91	MOL1	C
ATOM	4082	NE	ARG	F	102	33.782	-26.977	-16.298	1.00	119.03	MOL1	N
ATOM	4083	CZ	ARG	F	102	33.271	-27.386	-15.140	1.00	119.45	MOL1	C
ATOM	4084	NH1	ARG	F	102	31.980	-27.207	-14.885	1.00	119.89	MOL1	N
ATOM	4085	NH2	ARG	F	102	34.046	-27.974	-14.237	1.00	117.70	MOL1	N
ATOM	4086	C	ARG	F	102	35.983	-26.276	-20.837	1.00	113.63	MOL1	C
ATOM	4087	O	ARG	F	102	36.818	-26.307	-19.931	1.00	116.27	MOL1	O
ATOM	4088	N	LYS	F	103	36.121	-25.518	-21.922	1.00	120.15	MOL1	N
ATOM	4089	CA	LYS	F	103	37.293	-24.658	-22.103	1.00	128.06	MOL1	C
ATOM	4090	CB	LYS	F	103	37.552	-24.419	-23.600	1.00	129.18	MOL1	C
ATOM	4091	CG	LYS	F	103	38.204	-25.604	-24.315	1.00	133.24	MOL1	C
ATOM	4092	CD	LYS	F	103	38.661	-25.262	-25.732	1.00	137.99	MOL1	C
ATOM	4093	CE	LYS	F	103	39.419	-26.434	-26.373	1.00	140.56	MOL1	C
ATOM	4094	NZ	LYS	F	103	39.910	-26.140	-27.757	1.00	139.88	MOL1	N
ATOM	4095	C	LYS	F	103	37.224	-23.342	-21.350	1.00	133.17	MOL1	C
ATOM	4096	O	LYS	F	103	36.158	-22.726	-21.244	1.00	134.08	MOL1	O
ATOM	4097	N	HIS	F	104	38.373	-22.927	-20.814	1.00	137.83	MOL1	N
ATOM	4098	CA	HIS	F	104	38.500	-21.675	-20.074	1.00	144.47	MOL1	C
ATOM	4099	CB	HIS	F	104	37.925	-20.528	-20.916	1.00	150.75	MOL1	C
ATOM	4100	CG	HIS	F	104	38.359	-20.554	-22.353	1.00	158.24	MOL1	C
ATOM	4101	CD2	HIS	F	104	39.416	-21.150	-22.957	1.00	161.11	MOL1	C
ATOM	4102	ND1	HIS	F	104	37.660	-19.911	-23.354	1.00	160.78	MOL1	N
ATOM	4103	CE1	HIS	F	104	38.266	-20.111	-24.512	1.00	162.24	MOL1	C
ATOM	4104	NE2	HIS	F	104	39.334	-20.860	-24.299	1.00	162.96	MOL1	N
ATOM	4105	C	HIS	F	104	37.800	-21.739	-18.707	1.00	147.30	MOL1	C
ATOM	4106	O	HIS	F	104	37.140	-22.730	-18.378	1.00	145.39	MOL1	O
ATOM	4107	N	GLN	F	105	37.956	-20.683	-17.909	1.00	150.81	MOL1	N
ATOM	4108	CA	GLN	F	105	37.335	-20.621	-16.586	1.00	150.93	MOL1	C
ATOM	4109	CB	GLN	F	105	38.403	-20.763	-15.478	1.00	153.40	MOL1	C
ATOM	4110	CG	GLN	F	105	39.723	-20.006	-15.700	1.00	154.82	MOL1	C
ATOM	4111	CD	GLN	F	105	39.681	-18.548	-15.257	1.00	155.99	MOL1	C
ATOM	4112	OE1	GLN	F	105	40.679	-17.829	-15.362	1.00	154.70	MOL1	O
ATOM	4113	NE2	GLN	F	105	38.531	-18.108	-14.755	1.00	155.92	MOL1	N
ATOM	4114	C	GLN	F	105	36.496	-19.357	-16.366	1.00	149.14	MOL1	C
ATOM	4115	O	GLN	F	105	36.445	-18.464	-17.221	1.00	145.42	MOL1	O
ATOM	4116	N	GLY	F	106	35.819	-19.305	-15.223	1.00	147.74	MOL1	N
ATOM	4117	CA	GLY	F	106	34.997	-18.154	-14.897	1.00	147.34	MOL1	C
ATOM	4118	C	GLY	F	106	33.842	-17.884	-15.843	1.00	147.13	MOL1	C
ATOM	4119	O	GLY	F	106	33.125	-18.801	-16.246	1.00	145.82	MOL1	O
ATOM	4120	N	CYS	F	107	33.654	-16.617	-16.200	1.00	147.53	MOL1	N
ATOM	4121	CA	CYS	F	107	32.558	-16.255	-17.086	1.00	148.41	MOL1	C
ATOM	4122	C	CYS	F	107	32.903	-16.477	-18.554	1.00	145.11	MOL1	C
ATOM	4123	O	CYS	F	107	32.017	-16.507	-19.409	1.00	142.60	MOL1	O
ATOM	4124	CB	CYS	F	107	32.123	-14.801	-16.851	1.00	155.97	MOL1	C
ATOM	4125	SG	CYS	F	107	31.605	-14.369	-15.144	1.00	165.92	MOL1	S
ATOM	4126	N	SER	F	108	34.191	-16.651	-18.836	1.00	143.69	MOL1	N
ATOM	4127	CA	SER	F	108	34.660	-16.887	-20.201	1.00	144.58	MOL1	C
ATOM	4128	CB	SER	F	108	36.080	-16.327	-20.360	1.00	145.52	MOL1	C
ATOM	4129	OG	SER	F	108	36.549	-16.458	-21.693	1.00	144.26	MOL1	O
ATOM	4130	C	SER	F	108	34.646	-18.389	-20.532	1.00	143.38	MOL1	C
ATOM	4131	O	SER	F	108	35.564	-18.902	-21.182	1.00	143.38	MOL1	O
ATOM	4132	N	VAL	F	109	33.591	-19.078	-20.090	1.00	139.43	MOL1	N
ATOM	4133	CA	VAL	F	109	33.429	-20.521	-20.303	1.00	131.17	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4134	CB	VAL	F	109	32.716	-21.171	-19.084	1.00129.56	MOL1	C
ATOM	4135	CG1	VAL	F	109	31.765	-22.265	-19.543	1.00127.20	MOL1	C
ATOM	4136	CG2	VAL	F	109	33.757	-21.745	-18.128	1.00127.59	MOL1	C
ATOM	4137	C	VAL	F	109	32.691	-20.929	-21.587	1.00126.27	MOL1	C
ATOM	4138	O	VAL	F	109	31.581	-20.465	-21.874	1.00120.54	MOL1	O
ATOM	4139	N	SER	F	110	33.334	-21.813	-22.344	1.00121.64	MOL1	N
ATOM	4140	CA	SER	F	110	32.800	-22.328	-23.595	1.00117.57	MOL1	C
ATOM	4141	CB	SER	F	110	33.668	-21.847	-24.759	1.00118.18	MOL1	C
ATOM	4142	OG	SER	F	110	35.003	-22.314	-24.627	1.00114.40	MOL1	O
ATOM	4143	C	SER	F	110	32.812	-23.859	-23.534	1.00115.99	MOL1	C
ATOM	4144	O	SER	F	110	33.538	-24.449	-22.724	1.00113.41	MOL1	O
ATOM	4145	N	PHE	F	111	32.013	-24.493	-24.393	1.00111.00	MOL1	N
ATOM	4146	CA	PHE	F	111	31.906	-25.952	-24.451	1.00100.84	MOL1	C
ATOM	4147	CB	PHE	F	111	30.495	-26.371	-24.048	1.00102.04	MOL1	C
ATOM	4148	CG	PHE	F	111	30.207	-26.211	-22.584	1.00102.79	MOL1	C
ATOM	4149	CD1	PHE	F	111	28.910	-26.274	-22.112	1.00102.51	MOL1	C
ATOM	4150	CD2	PHE	F	111	31.236	-26.050	-21.675	1.00105.75	MOL1	C
ATOM	4151	CE1	PHE	F	111	28.643	-26.185	-20.763	1.00104.73	MOL1	C
ATOM	4152	CE2	PHE	F	111	30.975	-25.960	-20.322	1.00107.04	MOL1	C
ATOM	4153	CZ	PHE	F	111	29.678	-26.028	-19.866	1.00107.03	MOL1	C
ATOM	4154	C	PHE	F	111	32.192	-26.461	-25.861	1.00 96.24	MOL1	C
ATOM	4155	O	PHE	F	111	31.634	-25.944	-26.825	1.00 97.45	MOL1	O
ATOM	4156	N	GLN	F	112	33.046	-27.474	-25.984	1.00 90.96	MOL1	N
ATOM	4157	CA	GLN	F	112	33.377	-28.027	-27.302	1.00 88.10	MOL1	C
ATOM	4158	CB	GLN	F	112	34.839	-27.707	-27.658	1.00 89.11	MOL1	C
ATOM	4159	CG	GLN	F	112	35.134	-27.663	-29.163	1.00 92.05	MOL1	C
ATOM	4160	CD	GLN	F	112	36.621	-27.503	-29.502	1.00 92.21	MOL1	C
ATOM	4161	OE1	GLN	F	112	36.976	-27.271	-30.659	1.00 96.55	MOL1	O
ATOM	4162	NE2	GLN	F	112	37.488	-27.638	-28.502	1.00 85.91	MOL1	N
ATOM	4163	C	GLN	F	112	33.155	-29.546	-27.334	1.00 85.52	MOL1	C
ATOM	4164	O	GLN	F	112	33.425	-30.241	-26.351	1.00 89.03	MOL1	O
ATOM	4165	N	LEU	F	113	32.665	-30.054	-28.463	1.00 76.08	MOL1	N
ATOM	4166	CA	LEU	F	113	32.401	-31.481	-28.616	1.00 74.73	MOL1	C
ATOM	4167	CB	LEU	F	113	31.296	-31.709	-29.646	1.00 75.29	MOL1	C
ATOM	4168	CG	LEU	F	113	29.823	-31.586	-29.268	1.00 72.94	MOL1	C
ATOM	4169	CD1	LEU	F	113	28.966	-32.072	-30.428	1.00 66.97	MOL1	C
ATOM	4170	CD2	LEU	F	113	29.547	-32.422	-28.041	1.00 74.24	MOL1	C
ATOM	4171	C	LEU	F	113	33.609	-32.289	-29.063	1.00 76.76	MOL1	C
ATOM	4172	O	LEU	F	113	34.010	-32.193	-30.214	1.00 82.45	MOL1	O
ATOM	4173	N	GLU	F	114	34.174	-33.102	-28.174	1.00 78.11	MOL1	N
ATOM	4174	CA	GLU	F	114	35.327	-33.938	-28.523	1.00 76.38	MOL1	C
ATOM	4175	CB	GLU	F	114	36.298	-34.020	-27.346	1.00 83.54	MOL1	C
ATOM	4176	CG	GLU	F	114	37.616	-34.715	-27.646	1.00 94.24	MOL1	C
ATOM	4177	CD	GLU	F	114	38.585	-34.679	-26.460	1.00102.03	MOL1	C
ATOM	4178	OE1	GLU	F	114	39.778	-35.005	-26.660	1.00108.49	MOL1	O
ATOM	4179	OE2	GLU	F	114	38.159	-34.334	-25.331	1.00 97.17	MOL1	O
ATOM	4180	C	GLU	F	114	34.834	-35.336	-28.891	1.00 73.99	MOL1	C
ATOM	4181	O	GLU	F	114	33.780	-35.776	-28.422	1.00 77.13	MOL1	O
ATOM	4182	N	LYS	F	115	35.600	-36.028	-29.728	1.00 67.97	MOL1	N
ATOM	4183	CA	LYS	F	115	35.245	-37.370	-30.191	1.00 64.48	MOL1	C
ATOM	4184	CB	LYS	F	115	35.253	-37.370	-31.715	1.00 58.29	MOL1	C
ATOM	4185	CG	LYS	F	115	34.541	-38.513	-32.383	1.00 67.40	MOL1	C
ATOM	4186	CD	LYS	F	115	34.404	-38.195	-33.871	1.00 76.87	MOL1	C
ATOM	4187	CE	LYS	F	115	33.755	-39.311	-34.670	1.00 82.63	MOL1	C
ATOM	4188	NZ	LYS	F	115	33.840	-39.010	-36.129	1.00 86.82	MOL1	N
ATOM	4189	C	LYS	F	115	36.253	-38.381	-29.647	1.00 62.95	MOL1	C
ATOM	4190	O	LYS	F	115	37.446	-38.279	-29.911	1.00 70.29	MOL1	O
ATOM	4191	N	VAL	F	116	35.781	-39.359	-28.886	1.00 60.57	MOL1	N
ATOM	4192	CA	VAL	F	116	36.677	-40.346	-28.291	1.00 60.31	MOL1	C
ATOM	4193	CB	VAL	F	116	36.570	-40.317	-26.760	1.00 57.13	MOL1	C
ATOM	4194	CG1	VAL	F	116	37.397	-41.430	-26.164	1.00 56.19	MOL1	C
ATOM	4195	CG2	VAL	F	116	37.027	-38.977	-26.232	1.00 57.63	MOL1	C
ATOM	4196	C	VAL	F	116	36.378	-41.767	-28.724	1.00 60.44	MOL1	C
ATOM	4197	O	VAL	F	116	35.221	-42.163	-28.767	1.00 64.04	MOL1	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	4198	N	LEU	F	117	37.420	-42.536	-29.027	1.00	58.45	MOL1	N
ATOM	4199	CA	LEU	F	117	37.247	-43.922	-29.437	1.00	55.47	MOL1	C
ATOM	4200	CB	LEU	F	117	38.244	-44.267	-30.549	1.00	63.12	MOL1	C
ATOM	4201	CG	LEU	F	117	38.288	-45.628	-31.284	1.00	67.28	MOL1	C
ATOM	4202	CD1	LEU	F	117	39.302	-46.566	-30.620	1.00	61.33	MOL1	C
ATOM	4203	CD2	LEU	F	117	36.883	-46.240	-31.360	1.00	69.08	MOL1	C
ATOM	4204	C	LEU	F	117	37.515	-44.764	-28.210	1.00	53.29	MOL1	C
ATOM	4205	O	LEU	F	117	38.617	-44.725	-27.660	1.00	51.96	MOL1	O
ATOM	4206	N	VAL	F	118	36.515	-45.523	-27.776	1.00	49.31	MOL1	N
ATOM	4207	CA	VAL	F	118	36.689	-46.345	-26.589	1.00	48.83	MOL1	C
ATOM	4208	CB	VAL	F	118	35.680	-45.968	-25.488	1.00	46.37	MOL1	C
ATOM	4209	CG1	VAL	F	118	34.759	-44.865	-25.976	1.00	45.08	MOL1	C
ATOM	4210	CG2	VAL	F	118	34.881	-47.190	-25.089	1.00	50.73	MOL1	C
ATOM	4211	C	VAL	F	118	36.582	-47.835	-26.819	1.00	45.57	MOL1	C
ATOM	4212	O	VAL	F	118	35.818	-48.309	-27.644	1.00	44.70	MOL1	O
ATOM	4213	N	THR	F	119	37.374	-48.572	-26.068	1.00	48.59	MOL1	N
ATOM	4214	CA	THR	F	119	37.362	-50.014	-26.154	1.00	52.88	MOL1	C
ATOM	4215	CB	THR	F	119	38.759	-50.590	-25.885	1.00	59.66	MOL1	C
ATOM	4216	OG1	THR	F	119	39.762	-49.777	-26.527	1.00	56.23	MOL1	O
ATOM	4217	CG2	THR	F	119	38.832	-52.001	-26.410	1.00	59.86	MOL1	C
ATOM	4218	C	THR	F	119	36.394	-50.483	-25.072	1.00	52.98	MOL1	C
ATOM	4219	O	THR	F	119	36.707	-50.477	-23.874	1.00	58.84	MOL1	O
ATOM	4220	N	VAL	F	120	35.207	-50.875	-25.500	1.00	48.92	MOL1	N
ATOM	4221	CA	VAL	F	120	34.176	-51.315	-24.582	1.00	50.01	MOL1	C
ATOM	4222	CB	VAL	F	120	32.853	-51.393	-25.294	1.00	51.62	MOL1	C
ATOM	4223	CG1	VAL	F	120	31.758	-51.556	-24.287	1.00	63.24	MOL1	C
ATOM	4224	CG2	VAL	F	120	32.640	-50.145	-26.107	1.00	59.91	MOL1	C
ATOM	4225	C	VAL	F	120	34.444	-52.670	-23.950	1.00	50.12	MOL1	C
ATOM	4226	O	VAL	F	120	34.011	-52.946	-22.827	1.00	52.69	MOL1	O
ATOM	4227	N	GLY	F	121	35.146	-53.523	-24.681	1.00	51.02	MOL1	N
ATOM	4228	CA	GLY	F	121	35.458	-54.845	-24.170	1.00	48.28	MOL1	C
ATOM	4229	C	GLY	F	121	35.996	-55.766	-25.247	1.00	46.24	MOL1	C
ATOM	4230	O	GLY	F	121	36.242	-55.352	-26.375	1.00	48.77	MOL1	O
ATOM	4231	N	CYS	F	122	36.170	-57.033	-24.918	1.00	41.90	MOL1	N
ATOM	4232	CA	CYS	F	122	36.701	-57.955	-25.898	1.00	42.96	MOL1	C
ATOM	4233	C	CYS	F	122	35.763	-59.099	-26.193	1.00	38.05	MOL1	C
ATOM	4234	O	CYS	F	122	34.935	-59.456	-25.377	1.00	42.43	MOL1	O
ATOM	4235	CB	CYS	F	122	38.060	-58.460	-25.421	1.00	49.93	MOL1	C
ATOM	4236	SG	CYS	F	122	39.197	-57.060	-25.173	1.00	57.69	MOL1	S
ATOM	4237	N	THR	F	123	35.890	-59.653	-27.386	1.00	37.65	MOL1	N
ATOM	4238	CA	THR	F	123	35.057	-60.762	-27.828	1.00	46.81	MOL1	C
ATOM	4239	CB	THR	F	123	34.071	-60.318	-28.953	1.00	46.83	MOL1	C
ATOM	4240	OG1	THR	F	123	33.219	-61.409	-29.343	1.00	42.75	MOL1	O
ATOM	4241	CG2	THR	F	123	34.846	-59.884	-30.167	1.00	44.62	MOL1	C
ATOM	4242	C	THR	F	123	35.998	-61.802	-28.416	1.00	49.43	MOL1	C
ATOM	4243	O	THR	F	123	36.977	-61.451	-29.054	1.00	44.66	MOL1	O
ATOM	4244	N	CYS	F	124	35.708	-63.081	-28.215	1.00	56.46	MOL1	N
ATOM	4245	CA	CYS	F	124	36.570	-64.114	-28.772	1.00	62.94	MOL1	C
ATOM	4246	C	CYS	F	124	36.189	-64.448	-30.209	1.00	63.67	MOL1	C
ATOM	4247	O	CYS	F	124	35.094	-64.939	-30.473	1.00	65.06	MOL1	O
ATOM	4248	CB	CYS	F	124	36.513	-65.393	-27.938	1.00	73.40	MOL1	C
ATOM	4249	SG	CYS	F	124	37.416	-66.770	-28.722	1.00	83.45	MOL1	S
ATOM	4250	N	VAL	F	125	37.103	-64.194	-31.139	1.00	64.45	MOL1	N
ATOM	4251	CA	VAL	F	125	36.833	-64.470	-32.544	1.00	61.66	MOL1	C
ATOM	4252	CB	VAL	F	125	36.962	-63.201	-33.401	1.00	63.16	MOL1	C
ATOM	4253	CG1	VAL	F	125	36.531	-61.994	-32.605	1.00	62.70	MOL1	C
ATOM	4254	CG2	VAL	F	125	38.389	-63.041	-33.878	1.00	68.18	MOL1	C
ATOM	4255	C	VAL	F	125	37.775	-65.508	-33.130	1.00	60.75	MOL1	C
ATOM	4256	O	VAL	F	125	38.869	-65.755	-32.609	1.00	58.76	MOL1	O
ATOM	4257	N	THR	F	126	37.336	-66.107	-34.229	1.00	58.58	MOL1	N
ATOM	4258	CA	THR	F	126	38.119	-67.110	-34.924	1.00	63.13	MOL1	C
ATOM	4259	CB	THR	F	126	37.274	-68.320	-35.334	1.00	67.09	MOL1	C
ATOM	4260	OG1	THR	F	126	38.052	-69.165	-36.192	1.00	78.72	MOL1	O
ATOM	4261	CG2	THR	F	126	36.022	-67.878	-36.679	1.00	67.81	MOL1	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4262	C	THR	F	126	38.666	-66.472	-36.181	1.00	62.28	MOL1	C
ATOM	4263	O	THR	F	126	37.917	-65.950	-36.991	1.00	62.89	MOL1	O
ATOM	4264	N	PRO	F	127	39.989	-66.507	-36.362	1.00	64.71	MOL1	N
ATOM	4265	CD	PRO	F	127	40.989	-67.318	-35.652	1.00	69.31	MOL1	C
ATOM	4266	CA	PRO	F	127	40.578	-65.904	-37.551	1.00	65.15	MOL1	C
ATOM	4267	CB	PRO	F	127	42.042	-66.317	-37.461	1.00	64.98	MOL1	C
ATOM	4268	CG	PRO	F	127	41.971	-67.618	-36.755	1.00	68.75	MOL1	C
ATOM	4269	C	PRO	F	127	39.916	-66.437	-38.785	1.00	66.45	MOL1	C
ATOM	4270	O	PRO	F	127	39.351	-67.526	-38.764	1.00	66.09	MOL1	O
ATOM	4271	N	VAL	F	128	39.969	-65.651	-39.850	1.00	70.08	MOL1	N
ATOM	4272	CA	VAL	F	128	39.386	-66.046	-41.115	1.00	80.54	MOL1	C
ATOM	4273	CB	VAL	F	128	39.215	-64.804	-42.016	1.00	78.41	MOL1	C
ATOM	4274	CG1	VAL	F	128	40.414	-63.935	-41.878	1.00	82.53	MOL1	C
ATOM	4275	CG2	VAL	F	128	39.024	-65.195	-43.470	1.00	78.29	MOL1	C
ATOM	4276	C	VAL	F	128	40.340	-67.060	-41.740	1.00	89.03	MOL1	C
ATOM	4277	O	VAL	F	128	41.331	-66.690	-42.361	1.00	95.20	MOL1	O
ATOM	4278	N	ILE	F	129	40.056	-68.345	-41.553	1.00	98.16	MOL1	N
ATOM	4279	CA	ILE	F	129	40.912	-69.395	-42.102	1.00	107.61	MOL1	C
ATOM	4280	CB	ILE	F	129	40.760	-70.716	-41.310	1.00	112.00	MOL1	C
ATOM	4281	CG2	ILE	F	129	41.726	-71.764	-41.847	1.00	107.86	MOL1	C
ATOM	4282	CG1	ILE	F	129	41.038	-70.468	-39.822	1.00	121.08	MOL1	C
ATOM	4283	CD1	ILE	F	129	40.925	-71.714	-38.933	1.00	126.52	MOL1	C
ATOM	4284	C	ILE	F	129	40.580	-69.666	-43.567	1.00	112.94	MOL1	C
ATOM	4285	O	ILE	F	129	41.411	-70.172	-44.314	1.00	113.20	MOL1	O
ATOM	4286	N	HIS	F	130	39.356	-69.328	-43.961	1.00	121.19	MOL1	N
ATOM	4287	CA	HIS	F	130	38.863	-69.516	-45.329	1.00	127.35	MOL1	C
ATOM	4288	CB	HIS	F	130	37.560	-68.713	-45.485	1.00	130.61	MOL1	C
ATOM	4289	CG	HIS	F	130	36.861	-68.454	-44.181	1.00	134.06	MOL1	C
ATOM	4290	CD2	HIS	F	130	36.356	-67.315	-43.648	1.00	135.37	MOL1	C
ATOM	4291	ND1	HIS	F	130	36.673	-69.435	-43.229	1.00	135.79	MOL1	N
ATOM	4292	CE1	HIS	F	130	36.090	-68.911	-42.165	1.00	135.80	MOL1	C
ATOM	4293	NE2	HIS	F	130	35.888	-67.625	-42.392	1.00	135.87	MOL1	N
ATOM	4294	C	HIS	F	130	39.913	-69.107	-46.383	1.00	128.31	MOL1	C
ATOM	4295	O	HIS	F	130	39.855	-68.006	-46.948	1.00	121.52	MOL1	O
ATOM	4296	N	HIS	F	131	40.850	-70.030	-46.629	1.00	133.20	MOL1	N
ATOM	4297	CA	HIS	F	131	41.987	-69.884	-47.554	1.00	140.61	MOL1	C
ATOM	4298	CB	HIS	F	131	41.730	-70.652	-48.864	1.00	144.36	MOL1	C
ATOM	4299	CG	HIS	F	131	42.975	-70.917	-49.663	1.00	147.92	MOL1	C
ATOM	4300	CD2	HIS	F	131	43.462	-72.061	-50.203	1.00	148.07	MOL1	C
ATOM	4301	ND1	HIS	F	131	43.881	-69.929	-49.987	1.00	148.71	MOL1	N
ATOM	4302	CE1	HIS	F	131	44.871	-70.451	-50.689	1.00	148.41	MOL1	C
ATOM	4303	NE2	HIS	F	131	44.641	-71.744	-50.835	1.00	147.74	MOL1	N
ATOM	4304	C	HIS	F	131	42.393	-68.440	-47.879	1.00	141.82	MOL1	C
ATOM	4305	O	HIS	F	131	43.448	-67.961	-47.439	1.00	140.46	MOL1	O
ATOM	4306	N	VAL	F	132	41.557	-67.770	-48.668	1.00	141.67	MOL1	N
ATOM	4307	CA	VAL	F	132	41.771	-66.384	-49.077	1.00	139.40	MOL1	C
ATOM	4308	CB	VAL	F	132	42.654	-66.291	-50.359	1.00	137.24	MOL1	C
ATOM	4309	CG1	VAL	F	132	42.877	-64.827	-50.736	1.00	135.57	MOL1	C
ATOM	4310	CG2	VAL	F	132	43.990	-66.999	-50.140	1.00	131.43	MOL1	C
ATOM	4311	C	VAL	F	132	40.387	-65.818	-49.391	1.00	140.29	MOL1	C
ATOM	4312	O	VAL	F	132	39.658	-65.379	-48.497	1.00	137.38	MOL1	O
ATOM	4313	N	GLN	F	133	40.035	-65.856	-50.673	1.00	142.86	MOL1	N
ATOM	4314	CA	GLN	F	133	38.746	-65.377	-51.162	1.00	143.14	MOL1	C
ATOM	4315	CB	GLN	F	133	38.770	-63.848	-51.309	1.00	143.32	MOL1	C
ATOM	4316	CG	GLN	F	133	37.404	-63.157	-51.215	1.00	142.55	MOL1	C
ATOM	4317	CD	GLN	F	133	36.460	-63.506	-52.361	1.00	143.56	MOL1	C
ATOM	4318	OE1	GLN	F	133	36.766	-63.274	-53.536	1.00	141.91	MOL1	O
ATOM	4319	NE2	GLN	F	133	35.299	-64.059	-52.019	1.00	141.58	MOL1	N
ATOM	4320	C	GLN	F	133	38.518	-66.045	-52.525	1.00	143.02	MOL1	C
ATOM	4321	O	GLN	F	133	37.554	-66.833	-52.645	1.00	141.78	MOL1	O
ATOM	4322	OXT	GLN	F	133	39.323	-65.789	-53.451	1.00	142.78	MOL1	O
ATOM	4323	CB	ALA	C	1	-4.305	-58.626	-73.057	1.00	101.99	MOL2	C
ATOM	4324	C	ALA	C	1	-3.330	-57.854	-70.875	1.00	96.91	MOL2	C
ATOM	4325	O	ALA	C	1	-3.606	-57.740	-69.680	1.00	100.25	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	4326	N	ALA	C	1	-4.184	-56.198	-72.502	1.00100.33	MOL2	N
ATOM	4327	CA	ALA	C	1	-4.380	-57.566	-71.940	1.00 99.91	MOL2	C
ATOM	4328	N	ILE	C	2	-2.129	-58.220	-71.315	1.00 89.04	MOL2	N
ATOM	4329	CA	ILE	C	2	-1.038	-58.535	-70.405	1.00 80.58	MOL2	C
ATOM	4330	CB	ILE	C	2	0.301	-58.522	-71.130	1.00 81.06	MOL2	C
ATOM	4331	CG2	ILE	C	2	1.248	-59.482	-70.461	1.00 83.33	MOL2	C
ATOM	4332	CG1	ILE	C	2	0.122	-58.988	-72.569	1.00 84.56	MOL2	C
ATOM	4333	CD1	ILE	C	2	-0.287	-60.430	-72.679	1.00 91.18	MOL2	C
ATOM	4334	C	ILE	C	2	-0.999	-57.491	-69.307	1.00 77.29	MOL2	C
ATOM	4335	O	ILE	C	2	-0.803	-56.316	-69.581	1.00 73.54	MOL2	O
ATOM	4336	N	GLN	C	3	-1.181	-57.929	-68.066	1.00 76.96	MOL2	N
ATOM	4337	CA	GLN	C	3	-1.199	-57.039	-66.911	1.00 79.39	MOL2	C
ATOM	4338	CB	GLN	C	3	-2.445	-57.357	-66.071	1.00 86.34	MOL2	C
ATOM	4339	CG	GLN	C	3	-2.691	-56.471	-64.849	1.00 99.34	MOL2	C
ATOM	4340	CD	GLN	C	3	-3.626	-55.296	-65.133	1.00110.28	MOL2	C
ATOM	4341	OE1	GLN	C	3	-4.048	-54.590	-64.210	1.00112.13	MOL2	O
ATOM	4342	NE2	GLN	C	3	-3.953	-55.083	-66.411	1.00111.21	MOL2	N
ATOM	4343	C	GLN	C	3	0.067	-57.203	-66.063	1.00 78.09	MOL2	C
ATOM	4344	O	GLN	C	3	0.296	-58.261	-65.481	1.00 79.09	MOL2	O
ATOM	4345	N	LEU	C	4	0.882	-56.155	-65.991	1.00 75.88	MOL2	N
ATOM	4346	CA	LEU	C	4	2.117	-56.200	-65.216	1.00 72.85	MOL2	C
ATOM	4347	CB	LEU	C	4	3.166	-55.282	-65.836	1.00 74.18	MOL2	C
ATOM	4348	CG	LEU	C	4	3.469	-55.485	-67.321	1.00 78.14	MOL2	C
ATOM	4349	CD1	LEU	C	4	4.755	-54.744	-67.666	1.00 82.52	MOL2	C
ATOM	4350	CD2	LEU	C	4	3.609	-56.960	-67.633	1.00 71.94	MOL2	C
ATOM	4351	C	LEU	C	4	1.864	-55.772	-63.780	1.00 71.99	MOL2	C
ATOM	4352	O	LEU	C	4	1.257	-54.734	-63.532	1.00 71.82	MOL2	O
ATOM	4353	N	THR	C	5	2.358	-56.563	-62.835	1.00 71.36	MOL2	N
ATOM	4354	CA	THR	C	5	2.151	-56.267	-61.429	1.00 71.70	MOL2	C
ATOM	4355	CB	THR	C	5	1.342	-57.383	-60.759	1.00 79.04	MOL2	C
ATOM	4356	OG1	THR	C	5	0.251	-57.766	-61.612	1.00 80.97	MOL2	O
ATOM	4357	CG2	THR	C	5	0.810	-56.912	-59.406	1.00 77.86	MOL2	C
ATOM	4358	C	THR	C	5	3.452	-56.113	-60.662	1.00 70.09	MOL2	C
ATOM	4359	O	THR	C	5	4.030	-57.097	-60.187	1.00 70.80	MOL2	O
ATOM	4360	N	GLN	C	6	3.912	-54.876	-60.536	1.00 67.35	MOL2	N
ATOM	4361	CA	GLN	C	6	5.143	-54.610	-59.807	1.00 67.62	MOL2	C
ATOM	4362	CB	GLN	C	6	5.601	-53.173	-60.032	1.00 65.55	MOL2	C
ATOM	4363	CG	GLN	C	6	6.368	-52.978	-61.323	1.00 67.75	MOL2	C
ATOM	4364	CD	GLN	C	6	6.728	-51.530	-61.577	1.00 66.51	MOL2	C
ATOM	4365	OE1	GLN	C	6	7.145	-50.820	-60.667	1.00 62.41	MOL2	O
ATOM	4366	NE2	GLN	C	6	6.583	-51.089	-62.823	1.00 64.70	MOL2	N
ATOM	4367	C	GLN	C	6	4.902	-54.839	-58.333	1.00 69.96	MOL2	C
ATOM	4368	O	GLN	C	6	3.760	-54.857	-57.889	1.00 74.54	MOL2	O
ATOM	4369	N	SER	C	7	5.980	-54.999	-57.573	1.00 71.78	MOL2	N
ATOM	4370	CA	SER	C	7	5.879	-55.249	-56.137	1.00 72.15	MOL2	C
ATOM	4371	CB	SER	C	7	5.253	-56.625	-55.895	1.00 80.15	MOL2	C
ATOM	4372	OG	SER	C	7	5.884	-57.629	-56.687	1.00 87.70	MOL2	O
ATOM	4373	C	SER	C	7	7.253	-55.205	-55.491	1.00 68.10	MOL2	C
ATOM	4374	O	SER	C	7	8.187	-55.837	-55.963	1.00 72.62	MOL2	O
ATOM	4375	N	PRO	C	8	7.395	-54.462	-54.393	1.00 65.56	MOL2	N
ATOM	4376	CD	PRO	C	8	8.704	-54.188	-53.788	1.00 66.95	MOL2	C
ATOM	4377	CA	PRO	C	8	6.363	-53.673	-53.728	1.00 69.73	MOL2	C
ATOM	4378	CB	PRO	C	8	7.080	-53.162	-52.494	1.00 67.77	MOL2	C
ATOM	4379	CG	PRO	C	8	8.434	-52.910	-53.015	1.00 63.16	MOL2	C
ATOM	4380	C	PRO	C	8	5.917	-52.528	-54.606	1.00 71.09	MOL2	C
ATOM	4381	O	PRO	C	8	6.499	-52.286	-55.653	1.00 76.45	MOL2	O
ATOM	4382	N	SER	C	9	4.887	-51.821	-54.171	1.00 70.48	MOL2	N
ATOM	4383	CA	SER	C	9	4.393	-50.692	-54.924	1.00 66.56	MOL2	C
ATOM	4384	CB	SER	C	9	2.900	-50.513	-54.663	1.00 68.50	MOL2	C
ATOM	4385	OG	SER	C	9	2.302	-49.695	-55.649	1.00 74.33	MOL2	O
ATOM	4386	C	SER	C	9	5.187	-49.507	-54.396	1.00 65.19	MOL2	C
ATOM	4387	O	SER	C	9	5.474	-48.552	-55.107	1.00 66.87	MOL2	O
ATOM	4388	N	SER	C	10	5.548	-49.584	-53.127	1.00 63.71	MOL2	N
ATOM	4389	CA	SER	C	10	6.332	-48.532	-52.511	1.00 63.51	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4390	CB	SER	C	10	5.446	-47.646	-51.635	1.00	65.35	MOL2	C
ATOM	4391	OG	SER	C	10	6.177	-46.533	-51.147	1.00	70.90	MOL2	O
ATOM	4392	C	SER	C	10	7.383	-49.243	-51.671	1.00	61.83	MOL2	C
ATOM	4393	O	SER	C	10	7.347	-50.469	-51.541	1.00	66.16	MOL2	O
ATOM	4394	N	LEU	C	11	8.326	-48.495	-51.113	1.00	52.84	MOL2	N
ATOM	4395	CA	LEU	C	11	9.349	-49.124	-50.298	1.00	51.69	MOL2	C
ATOM	4396	CB	LEU	C	11	10.048	-50.220	-51.099	1.00	39.27	MOL2	C
ATOM	4397	CG	LEU	C	11	11.390	-49.797	-51.673	1.00	40.68	MOL2	C
ATOM	4398	CD1	LEU	C	11	12.440	-49.932	-50.588	1.00	43.91	MOL2	C
ATOM	4399	CD2	LEU	C	11	11.747	-50.648	-52.865	1.00	31.09	MOL2	C
ATOM	4400	C	LEU	C	11	10.358	-48.085	-49.854	1.00	54.60	MOL2	C
ATOM	4401	O	LEU	C	11	10.791	-47.266	-50.656	1.00	52.95	MOL2	O
ATOM	4402	N	SER	C	12	10.726	-48.112	-48.576	1.00	62.06	MOL2	N
ATOM	4403	CA	SER	C	12	11.705	-47.153	-48.056	1.00	67.26	MOL2	C
ATOM	4404	CB	SER	C	12	11.246	-46.553	-46.718	1.00	73.13	MOL2	C
ATOM	4405	OG	SER	C	12	11.103	-47.546	-45.707	1.00	91.16	MOL2	O
ATOM	4406	C	SER	C	12	13.040	-47.856	-47.879	1.00	64.64	MOL2	C
ATOM	4407	O	SER	C	12	13.093	-49.007	-47.428	1.00	73.92	MOL2	O
ATOM	4408	N	ALA	C	13	14.112	-47.160	-48.239	1.00	52.40	MOL2	N
ATOM	4409	CA	ALA	C	13	15.445	-47.715	-48.157	1.00	48.17	MOL2	C
ATOM	4410	CB	ALA	C	13	15.804	-48.349	-49.452	1.00	46.27	MOL2	C
ATOM	4411	C	ALA	C	13	16.430	-46.623	-47.855	1.00	53.29	MOL2	C
ATOM	4412	O	ALA	C	13	16.083	-45.442	-47.903	1.00	51.42	MOL2	O
ATOM	4413	N	SER	C	14	17.666	-47.023	-47.549	1.00	59.92	MOL2	N
ATOM	4414	CA	SER	C	14	18.748	-46.082	-47.236	1.00	62.56	MOL2	C
ATOM	4415	CB	SER	C	14	19.305	-46.332	-45.835	1.00	65.99	MOL2	C
ATOM	4416	OG	SER	C	14	18.563	-45.634	-44.850	1.00	77.69	MOL2	O
ATOM	4417	C	SER	C	14	19.879	-46.222	-48.229	1.00	60.39	MOL2	C
ATOM	4418	O	SER	C	14	20.060	-47.286	-48.822	1.00	64.34	MOL2	O
ATOM	4419	N	VAL	C	15	20.645	-45.154	-48.410	1.00	56.47	MOL2	N
ATOM	4420	CA	VAL	C	15	21.752	-45.215	-49.346	1.00	55.09	MOL2	C
ATOM	4421	CB	VAL	C	15	22.651	-44.006	-49.225	1.00	55.42	MOL2	C
ATOM	4422	CG1	VAL	C	15	23.957	-44.274	-49.958	1.00	52.75	MOL2	C
ATOM	4423	CG2	VAL	C	15	21.951	-42.794	-49.795	1.00	50.64	MOL2	C
ATOM	4424	C	VAL	C	15	22.595	-46.456	-49.099	1.00	56.26	MOL2	C
ATOM	4425	O	VAL	C	15	22.945	-46.773	-47.959	1.00	60.65	MOL2	O
ATOM	4426	N	GLY	C	16	22.911	-47.165	-50.172	1.00	51.10	MOL2	N
ATOM	4427	CA	GLY	C	16	23.709	-48.361	-50.034	1.00	52.45	MOL2	C
ATOM	4428	C	GLY	C	16	22.879	-49.619	-50.137	1.00	54.77	MOL2	C
ATOM	4429	O	GLY	C	16	23.300	-50.604	-50.759	1.00	58.98	MOL2	O
ATOM	4430	N	ASP	C	17	21.696	-49.598	-49.537	1.00	52.74	MOL2	N
ATOM	4431	CA	ASP	C	17	20.826	-50.772	-49.574	1.00	60.34	MOL2	C
ATOM	4432	CB	ASP	C	17	19.399	-50.404	-49.122	1.00	67.58	MOL2	C
ATOM	4433	CG	ASP	C	17	19.315	-50.057	-47.638	1.00	74.44	MOL2	C
ATOM	4434	OD1	ASP	C	17	18.195	-49.783	-47.153	1.00	76.43	MOL2	O
ATOM	4435	OD2	ASP	C	17	20.364	-50.056	-46.954	1.00	83.78	MOL2	O
ATOM	4436	C	ASP	C	17	20.779	-51.431	-50.962	1.00	52.46	MOL2	C
ATOM	4437	O	ASP	C	17	21.097	-50.817	-51.965	1.00	49.08	MOL2	O
ATOM	4438	N	ARG	C	18	20.392	-52.694	-51.000	1.00	50.22	MOL2	N
ATOM	4439	CA	ARG	C	18	20.294	-53.411	-52.251	1.00	56.08	MOL2	C
ATOM	4440	CB	ARG	C	18	21.000	-54.765	-52.127	1.00	66.53	MOL2	C
ATOM	4441	CG	ARG	C	18	21.162	-55.544	-53.416	1.00	69.54	MOL2	C
ATOM	4442	CD	ARG	C	18	22.473	-56.333	-53.410	1.00	76.41	MOL2	C
ATOM	4443	NE	ARG	C	18	22.607	-57.130	-54.621	1.00	83.22	MOL2	N
ATOM	4444	CZ	ARG	C	18	21.768	-58.106	-54.964	1.00	90.00	MOL2	C
ATOM	4445	NH1	ARG	C	18	20.736	-58.411	-54.178	1.00	91.48	MOL2	N
ATOM	4446	NH2	ARG	C	18	21.947	-58.762	-56.105	1.00	88.15	MOL2	N
ATOM	4447	C	ARG	C	18	18.809	-53.590	-52.541	1.00	59.14	MOL2	C
ATOM	4448	O	ARG	C	18	18.207	-54.619	-52.216	1.00	66.55	MOL2	O
ATOM	4449	N	VAL	C	19	18.227	-52.560	-53.143	1.00	53.91	MOL2	N
ATOM	4450	CA	VAL	C	19	16.814	-52.531	-53.500	1.00	48.82	MOL2	C
ATOM	4451	CB	VAL	C	19	16.430	-51.116	-54.008	1.00	49.90	MOL2	C
ATOM	4452	CG1	VAL	C	19	14.942	-50.897	-53.896	1.00	55.27	MOL2	C
ATOM	4453	CG2	VAL	C	19	17.165	-50.067	-53.220	1.00	44.57	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4454	C	VAL	C	19	16.490	-53.548	-54.599	1.00	46.40	MOL2	C
ATOM	4455	O	VAL	C	19	17.300	-53.790	-55.485	1.00	41.70	MOL2	O
ATOM	4456	N	THR	C	20	15.303	-54.138	-54.548	1.00	48.52	MOL2	N
ATOM	4457	CA	THR	C	20	14.909	-55.111	-55.560	1.00	52.40	MOL2	C
ATOM	4458	CB	THR	C	20	15.237	-56.558	-55.100	1.00	56.67	MOL2	C
ATOM	4459	OG1	THR	C	20	16.636	-56.668	-54.828	1.00	62.88	MOL2	O
ATOM	4460	CG2	THR	C	20	14.882	-57.565	-56.176	1.00	59.26	MOL2	C
ATOM	4461	C	THR	C	20	13.411	-54.992	-55.855	1.00	55.76	MOL2	C
ATOM	4462	O	THR	C	20	12.566	-55.195	-54.969	1.00	60.73	MOL2	O
ATOM	4463	N	ILE	C	21	13.102	-54.667	-57.109	1.00	49.17	MOL2	N
ATOM	4464	CA	ILE	C	21	11.736	-54.490	-57.585	1.00	44.82	MOL2	C
ATOM	4465	CB	ILE	C	21	11.641	-53.267	-58.516	1.00	42.78	MOL2	C
ATOM	4466	CG2	ILE	C	21	10.197	-52.894	-58.750	1.00	42.89	MOL2	C
ATOM	4467	CG1	ILE	C	21	12.416	-52.086	-57.923	1.00	40.47	MOL2	C
ATOM	4468	CD1	ILE	C	21	11.928	-51.621	-56.613	1.00	29.96	MOL2	C
ATOM	4469	C	ILE	C	21	11.384	-55.704	-58.414	1.00	46.51	MOL2	C
ATOM	4470	O	ILE	C	21	12.241	-56.245	-59.086	1.00	49.54	MOL2	O
ATOM	4471	N	THR	C	22	10.128	-56.121	-58.389	1.00	52.70	MOL2	N
ATOM	4472	CA	THR	C	22	9.705	-57.276	-59.164	1.00	56.36	MOL2	C
ATOM	4473	CB	THR	C	22	9.221	-58.386	-58.250	1.00	57.04	MOL2	C
ATOM	4474	OG1	THR	C	22	10.014	-58.400	-57.054	1.00	57.35	MOL2	O
ATOM	4475	CG2	THR	C	22	9.335	-59.722	-58.962	1.00	61.74	MOL2	C
ATOM	4476	C	THR	C	22	8.558	-56.868	-60.070	1.00	62.56	MOL2	C
ATOM	4477	O	THR	C	22	7.879	-55.877	-59.806	1.00	67.37	MOL2	O
ATOM	4478	N	CYS	C	23	8.324	-57.632	-61.129	1.00	64.49	MOL2	N
ATOM	4479	CA	CYS	C	23	7.249	-57.295	-62.046	1.00	69.63	MOL2	C
ATOM	4480	C	CYS	C	23	6.683	-58.549	-62.694	1.00	74.35	MOL2	C
ATOM	4481	O	CYS	C	23	7.028	-58.879	-63.825	1.00	79.68	MOL2	O
ATOM	4482	CB	CYS	C	23	7.790	-56.321	-63.097	1.00	66.66	MOL2	C
ATOM	4483	SG	CYS	C	23	6.755	-55.921	-64.548	1.00	76.32	MOL2	S
ATOM	4484	N	ARG	C	24	5.818	-59.252	-61.965	1.00	78.76	MOL2	N
ATOM	4485	CA	ARG	C	24	5.189	-60.471	-62.476	1.00	84.17	MOL2	C
ATOM	4486	CB	ARG	C	24	4.489	-61.236	-61.345	1.00	94.07	MOL2	C
ATOM	4487	CG	ARG	C	24	5.418	-62.065	-60.462	1.00	108.22	MOL2	C
ATOM	4488	CD	ARG	C	24	4.643	-62.860	-59.410	1.00	120.10	MOL2	C
ATOM	4489	NE	ARG	C	24	3.463	-63.534	-59.964	1.00	130.87	MOL2	N
ATOM	4490	CZ	ARG	C	24	2.741	-64.452	-59.318	1.00	135.36	MOL2	C
ATOM	4491	NH1	ARG	C	24	3.071	-64.828	-58.086	1.00	135.50	MOL2	N
ATOM	4492	NH2	ARG	C	24	1.673	-64.987	-59.900	1.00	136.70	MOL2	N
ATOM	4493	C	ARG	C	24	4.162	-60.075	-63.520	1.00	82.37	MOL2	C
ATOM	4494	O	ARG	C	24	3.525	-59.035	-63.382	1.00	84.85	MOL2	O
ATOM	4495	N	ALA	C	25	3.984	-60.894	-64.554	1.00	80.09	MOL2	N
ATOM	4496	CA	ALA	C	25	3.022	-60.558	-65.597	1.00	81.28	MOL2	C
ATOM	4497	CB	ALA	C	25	3.750	-60.042	-66.804	1.00	74.63	MOL2	C
ATOM	4498	C	ALA	C	25	2.054	-61.652	-66.029	1.00	85.27	MOL2	C
ATOM	4499	O	ALA	C	25	2.420	-62.815	-66.178	1.00	84.26	MOL2	O
ATOM	4500	N	ASP	C	26	0.809	-61.232	-66.234	1.00	93.13	MOL2	N
ATOM	4501	CA	ASP	C	26	-0.307	-62.065	-66.688	1.00	98.83	MOL2	C
ATOM	4502	CB	ASP	C	26	-1.270	-61.153	-67.466	1.00	106.45	MOL2	C
ATOM	4503	CG	ASP	C	26	-2.373	-61.908	-68.180	1.00	115.95	MOL2	C
ATOM	4504	OD1	ASP	C	26	-2.074	-62.825	-68.981	1.00	117.86	MOL2	O
ATOM	4505	OD2	ASP	C	26	-3.552	-61.559	-67.950	1.00	122.70	MOL2	O
ATOM	4506	C	ASP	C	26	0.130	-63.258	-67.555	1.00	98.49	MOL2	C
ATOM	4507	O	ASP	C	26	0.131	-64.404	-67.099	1.00	93.41	MOL2	O
ATOM	4508	N	GLU	C	27	0.478	-62.975	-68.810	1.00	100.98	MOL2	N
ATOM	4509	CA	GLU	C	27	0.932	-63.998	-69.754	1.00	102.53	MOL2	C
ATOM	4510	CB	GLU	C	27	0.396	-63.738	-71.170	1.00	109.48	MOL2	C
ATOM	4511	CG	GLU	C	27	-1.094	-63.983	-71.392	1.00	119.13	MOL2	C
ATOM	4512	CD	GLU	C	27	-1.483	-63.922	-72.876	1.00	125.04	MOL2	C
ATOM	4513	OE1	GLU	C	27	-2.697	-63.949	-73.180	1.00	127.79	MOL2	O
ATOM	4514	OE2	GLU	C	27	-0.575	-63.855	-73.739	1.00	124.79	MOL2	O
ATOM	4515	C	GLU	C	27	2.459	-64.012	-69.822	1.00	99.74	MOL2	C
ATOM	4516	O	GLU	C	27	3.138	-63.575	-68.893	1.00	98.01	MOL2	O
ATOM	4517	N	SER	C	28	2.989	-64.510	-70.935	1.00	98.17	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	4518	CA	SER	C	28	4.435	-64.589	-71.142	1.00	96.89	MOL2	C
ATOM	4519	CB	SER	C	28	4.820	-65.977	-71.685	1.00	101.41	MOL2	C
ATOM	4520	OG	SER	C	28	6.224	-66.108	-71.880	1.00	99.08	MOL2	O
ATOM	4521	C	SER	C	28	4.905	-63.509	-72.114	1.00	92.54	MOL2	C
ATOM	4522	O	SER	C	28	4.276	-63.285	-73.147	1.00	94.50	MOL2	O
ATOM	4523	N	VAL	C	29	6.017	-62.853	-71.787	1.00	85.57	MOL2	N
ATOM	4524	CA	VAL	C	29	6.566	-61.793	-72.633	1.00	78.41	MOL2	C
ATOM	4525	CB	VAL	C	29	6.654	-60.478	-71.864	1.00	74.78	MOL2	C
ATOM	4526	CG1	VAL	C	29	5.342	-59.741	-71.938	1.00	74.79	MOL2	C
ATOM	4527	CG2	VAL	C	29	6.994	-60.764	-70.423	1.00	74.97	MOL2	C
ATOM	4528	C	VAL	C	29	7.947	-62.083	-73.208	1.00	74.63	MOL2	C
ATOM	4529	O	VAL	C	29	8.374	-61.415	-74.144	1.00	74.56	MOL2	O
ATOM	4530	N	THR	C	30	8.638	-63.066	-72.640	1.00	69.19	MOL2	N
ATOM	4531	CA	THR	C	30	9.972	-63.457	-73.093	1.00	65.75	MOL2	C
ATOM	4532	CB	THR	C	30	9.957	-64.420	-74.307	1.00	66.75	MOL2	C
ATOM	4533	OG1	THR	C	30	9.099	-63.893	-75.332	1.00	50.46	MOL2	O
ATOM	4534	CG2	THR	C	30	9.543	-65.835	-73.885	1.00	73.47	MOL2	C
ATOM	4535	C	THR	C	30	10.876	-62.338	-73.525	1.00	64.89	MOL2	C
ATOM	4536	O	THR	C	30	10.728	-61.798	-74.614	1.00	71.06	MOL2	O
ATOM	4537	N	THR	C	31	11.831	-62.005	-72.681	1.00	59.01	MOL2	N
ATOM	4538	CA	THR	C	31	12.806	-60.981	-73.012	1.00	56.53	MOL2	C
ATOM	4539	CB	THR	C	31	13.746	-61.468	-74.127	1.00	53.95	MOL2	C
ATOM	4540	OG1	THR	C	31	13.024	-61.599	-75.354	1.00	46.97	MOL2	O
ATOM	4541	CG2	THR	C	31	14.329	-62.811	-73.768	1.00	62.15	MOL2	C
ATOM	4542	C	THR	C	31	12.302	-59.604	-73.407	1.00	55.57	MOL2	C
ATOM	4543	O	THR	C	31	13.057	-58.634	-73.336	1.00	60.99	MOL2	O
ATOM	4544	N	LEU	C	32	11.048	-59.491	-73.824	1.00	50.80	MOL2	N
ATOM	4545	CA	LEU	C	32	10.557	-58.186	-74.212	1.00	49.27	MOL2	C
ATOM	4546	CB	LEU	C	32	9.485	-58.314	-75.279	1.00	53.74	MOL2	C
ATOM	4547	CG	LEU	C	32	10.003	-58.972	-76.558	1.00	61.51	MOL2	C
ATOM	4548	CD1	LEU	C	32	9.155	-58.525	-77.738	1.00	67.47	MOL2	C
ATOM	4549	CD2	LEU	C	32	11.444	-58.577	-76.788	1.00	63.08	MOL2	C
ATOM	4550	C	LEU	C	32	10.040	-57.369	-73.044	1.00	49.73	MOL2	C
ATOM	4551	O	LEU	C	32	8.990	-56.741	-73.140	1.00	53.91	MOL2	O
ATOM	4552	N	MET	C	33	10.778	-57.389	-71.936	1.00	48.21	MOL2	N
ATOM	4553	CA	MET	C	33	10.417	-56.605	-70.753	1.00	50.67	MOL2	C
ATOM	4554	CB	MET	C	33	10.471	-57.448	-69.475	1.00	53.72	MOL2	C
ATOM	4555	CG	MET	C	33	10.063	-56.693	-68.203	1.00	63.35	MOL2	C
ATOM	4556	SD	MET	C	33	8.298	-56.232	-68.136	1.00	80.08	MOL2	S
ATOM	4557	CE	MET	C	33	7.649	-57.505	-67.077	1.00	69.12	MOL2	C
ATOM	4558	C	MET	C	33	11.442	-55.471	-70.682	1.00	47.74	MOL2	C
ATOM	4559	O	MET	C	33	12.608	-55.670	-71.009	1.00	47.46	MOL2	O
ATOM	4560	N	HIS	C	34	11.011	-54.288	-70.260	1.00	40.67	MOL2	N
ATOM	4561	CA	HIS	C	34	11.898	-53.144	-70.218	1.00	40.47	MOL2	C
ATOM	4562	CB	HIS	C	34	11.587	-52.252	-71.406	1.00	42.10	MOL2	C
ATOM	4563	CG	HIS	C	34	11.337	-53.010	-72.672	1.00	43.49	MOL2	C
ATOM	4564	CD2	HIS	C	34	10.320	-52.950	-73.561	1.00	46.48	MOL2	C
ATOM	4565	ND1	HIS	C	34	12.214	-53.955	-73.158	1.00	47.32	MOL2	N
ATOM	4566	CE1	HIS	C	34	11.751	-54.440	-74.295	1.00	48.54	MOL2	C
ATOM	4567	NE2	HIS	C	34	10.603	-53.846	-74.563	1.00	48.33	MOL2	N
ATOM	4568	C	HIS	C	34	11.686	-52.378	-68.943	1.00	42.71	MOL2	C
ATOM	4569	O	HIS	C	34	10.658	-52.557	-68.311	1.00	55.61	MOL2	O
ATOM	4570	N	TRP	C	35	12.638	-51.525	-68.563	1.00	36.83	MOL2	N
ATOM	4571	CA	TRP	C	35	12.502	-50.747	-67.333	1.00	39.88	MOL2	C
ATOM	4572	CB	TRP	C	35	13.483	-51.223	-66.255	1.00	40.79	MOL2	C
ATOM	4573	CG	TRP	C	35	13.136	-52.538	-65.657	1.00	43.11	MOL2	C
ATOM	4574	CD2	TRP	C	35	12.300	-52.765	-64.523	1.00	40.24	MOL2	C
ATOM	4575	CE2	TRP	C	35	12.155	-54.154	-64.383	1.00	42.15	MOL2	C
ATOM	4576	CE3	TRP	C	35	11.659	-51.928	-63.617	1.00	43.55	MOL2	C
ATOM	4577	CD1	TRP	C	35	13.463	-53.769	-66.141	1.00	46.19	MOL2	C
ATOM	4578	NE1	TRP	C	35	12.877	-54.746	-65.384	1.00	47.19	MOL2	N
ATOM	4579	CZ2	TRP	C	35	11.395	-54.724	-63.376	1.00	38.68	MOL2	C
ATOM	4580	CZ3	TRP	C	35	10.909	-52.496	-62.618	1.00	46.45	MOL2	C
ATOM	4581	CH2	TRP	C	35	10.782	-53.881	-62.505	1.00	42.43	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4582	C	TRP	C	35	12.753	-49.277	-67.559	1.00	39.85	MOL2	C
ATOM	4583	O	TRP	C	35	13.663	-48.920	-68.283	1.00	42.09	MOL2	O
ATOM	4584	N	TYR	C	36	11.950	-48.426	-66.928	1.00	37.19	MOL2	N
ATOM	4585	CA	TYR	C	36	12.119	-46.983	-67.037	1.00	27.89	MOL2	C
ATOM	4586	CB	TYR	C	36	10.974	-46.322	-67.781	1.00	21.99	MOL2	C
ATOM	4587	CG	TYR	C	36	10.741	-46.813	-69.173	1.00	24.18	MOL2	C
ATOM	4588	CD1	TYR	C	36	11.354	-46.196	-70.255	1.00	24.27	MOL2	C
ATOM	4589	CE1	TYR	C	36	11.139	-46.651	-71.552	1.00	32.32	MOL2	C
ATOM	4590	CD2	TYR	C	36	9.903	-47.901	-69.412	1.00	23.69	MOL2	C
ATOM	4591	CE2	TYR	C	36	9.682	-48.366	-70.693	1.00	29.24	MOL2	C
ATOM	4592	CZ	TYR	C	36	10.303	-47.739	-71.763	1.00	38.05	MOL2	C
ATOM	4593	OH	TYR	C	36	10.100	-48.207	-73.047	1.00	47.12	MOL2	O
ATOM	4594	C	TYR	C	36	12.129	-46.424	-65.636	1.00	32.00	MOL2	C
ATOM	4595	O	TYR	C	36	11.612	-47.035	-64.692	1.00	37.85	MOL2	O
ATOM	4596	N	GLN	C	37	12.693	-45.236	-65.517	1.00	30.14	MOL2	N
ATOM	4597	CA	GLN	C	37	12.802	-44.566	-64.242	1.00	33.69	MOL2	C
ATOM	4598	CB	GLN	C	37	14.281	-44.370	-63.910	1.00	25.67	MOL2	C
ATOM	4599	CG	GLN	C	37	14.536	-43.723	-62.571	1.00	29.66	MOL2	C
ATOM	4600	CD	GLN	C	37	15.789	-42.877	-62.577	1.00	36.17	MOL2	C
ATOM	4601	OE1	GLN	C	37	16.014	-42.092	-63.498	1.00	42.76	MOL2	O
ATOM	4602	NE2	GLN	C	37	16.609	-43.021	-61.545	1.00	34.38	MOL2	N
ATOM	4603	C	GLN	C	37	12.146	-43.214	-64.399	1.00	38.79	MOL2	C
ATOM	4604	O	GLN	C	37	12.240	-42.619	-65.457	1.00	45.43	MOL2	O
ATOM	4605	N	GLN	C	38	11.476	-42.722	-63.364	1.00	43.55	MOL2	N
ATOM	4606	CA	GLN	C	38	10.872	-41.403	-63.458	1.00	43.76	MOL2	C
ATOM	4607	CB	GLN	C	38	9.425	-41.507	-63.883	1.00	42.79	MOL2	C
ATOM	4608	CG	GLN	C	38	8.736	-40.175	-63.802	1.00	46.09	MOL2	C
ATOM	4609	CD	GLN	C	38	7.317	-40.260	-64.245	1.00	51.40	MOL2	C
ATOM	4610	OE1	GLN	C	38	7.016	-40.096	-65.424	1.00	49.67	MOL2	O
ATOM	4611	NE2	GLN	C	38	6.421	-40.544	-63.300	1.00	57.58	MOL2	N
ATOM	4612	C	GLN	C	38	10.949	-40.638	-62.151	1.00	44.98	MOL2	C
ATOM	4613	O	GLN	C	38	10.431	-41.092	-61.135	1.00	51.29	MOL2	O
ATOM	4614	N	LYS	C	39	11.607	-39.484	-62.173	1.00	43.36	MOL2	N
ATOM	4615	CA	LYS	C	39	11.731	-38.667	-60.976	1.00	46.56	MOL2	C
ATOM	4616	CB	LYS	C	39	12.956	-37.760	-61.063	1.00	45.39	MOL2	C
ATOM	4617	CG	LYS	C	39	14.272	-38.457	-61.390	1.00	52.65	MOL2	C
ATOM	4618	CD	LYS	C	39	15.021	-38.933	-60.154	1.00	57.23	MOL2	C
ATOM	4619	CE	LYS	C	39	16.433	-39.450	-60.494	1.00	62.86	MOL2	C
ATOM	4620	NZ	LYS	C	39	17.409	-38.418	-61.000	1.00	63.36	MOL2	N
ATOM	4621	C	LYS	C	39	10.479	-37.811	-60.953	1.00	56.54	MOL2	C
ATOM	4622	O	LYS	C	39	9.767	-37.725	-61.948	1.00	60.11	MOL2	O
ATOM	4623	N	PRO	C	40	10.193	-37.159	-59.822	1.00	64.58	MOL2	N
ATOM	4624	CD	PRO	C	40	10.918	-37.199	-58.542	1.00	67.05	MOL2	C
ATOM	4625	CA	PRO	C	40	8.999	-36.314	-59.725	1.00	65.12	MOL2	C
ATOM	4626	CB	PRO	C	40	8.982	-35.905	-58.253	1.00	65.24	MOL2	C
ATOM	4627	CG	PRO	C	40	9.807	-36.975	-57.570	1.00	71.18	MOL2	C
ATOM	4628	C	PRO	C	40	9.117	-35.100	-60.637	1.00	66.71	MOL2	C
ATOM	4629	O	PRO	C	40	10.122	-34.373	-60.581	1.00	63.72	MOL2	O
ATOM	4630	N	GLY	C	41	8.107	-34.893	-61.482	1.00	65.67	MOL2	N
ATOM	4631	CA	GLY	C	41	8.118	-33.736	-62.357	1.00	69.19	MOL2	C
ATOM	4632	C	GLY	C	41	8.714	-33.932	-63.732	1.00	68.06	MOL2	C
ATOM	4633	O	GLY	C	41	8.240	-33.348	-64.704	1.00	74.22	MOL2	O
ATOM	4634	N	LYS	C	42	9.762	-34.735	-63.823	1.00	64.19	MOL2	N
ATOM	4635	CA	LYS	C	42	10.391	-34.989	-65.105	1.00	61.08	MOL2	C
ATOM	4636	CB	LYS	C	42	11.882	-35.254	-64.882	1.00	69.82	MOL2	C
ATOM	4637	CG	LYS	C	42	12.633	-34.071	-64.233	1.00	79.68	MOL2	C
ATOM	4638	CD	LYS	C	42	13.192	-33.060	-65.260	1.00	98.35	MOL2	C
ATOM	4639	CE	LYS	C	42	14.349	-33.664	-66.104	1.00	110.67	MOL2	C
ATOM	4640	NZ	LYS	C	42	14.865	-32.795	-67.225	1.00	109.90	MOL2	N
ATOM	4641	C	LYS	C	42	9.688	-36.164	-65.814	1.00	56.57	MOL2	C
ATOM	4642	O	LYS	C	42	8.760	-36.766	-65.262	1.00	54.63	MOL2	O
ATOM	4643	N	ALA	C	43	10.112	-36.483	-67.033	1.00	51.70	MOL2	N
ATOM	4644	CA	ALA	C	43	9.483	-37.561	-67.800	1.00	49.89	MOL2	C
ATOM	4645	CB	ALA	C	43	9.429	-37.170	-69.249	1.00	52.86	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4646	C	ALA	C	43	10.219	-38.879	-67.655	1.00	46.72	MOL2	C
ATOM	4647	O	ALA	C	43	11.384	-38.896	-67.281	1.00	47.15	MOL2	O
ATOM	4648	N	PRO	C	44	9.558	-40.001	-67.978	1.00	44.39	MOL2	N
ATOM	4649	CD	PRO	C	44	8.268	-40.126	-68.664	1.00	45.41	MOL2	C
ATOM	4650	CA	PRO	C	44	10.202	-41.314	-67.862	1.00	44.83	MOL2	C
ATOM	4651	CB	PRO	C	44	9.251	-42.245	-68.598	1.00	45.87	MOL2	C
ATOM	4652	CG	PRO	C	44	7.938	-41.584	-68.419	1.00	52.20	MOL2	C
ATOM	4653	C	PRO	C	44	11.546	-41.275	-68.537	1.00	45.42	MOL2	C
ATOM	4654	O	PRO	C	44	11.802	-40.387	-69.348	1.00	52.33	MOL2	O
ATOM	4655	N	LYS	C	45	12.405	-42.226	-68.192	1.00	45.13	MOL2	N
ATOM	4656	CA	LYS	C	45	13.742	-42.345	-68.786	1.00	41.81	MOL2	C
ATOM	4657	CB	LYS	C	45	14.806	-41.625	-67.964	1.00	39.22	MOL2	C
ATOM	4658	CG	LYS	C	45	16.236	-42.071	-68.266	1.00	54.90	MOL2	C
ATOM	4659	CD	LYS	C	45	17.180	-41.630	-67.110	1.00	72.09	MOL2	C
ATOM	4660	CE	LYS	C	45	18.593	-42.278	-67.122	1.00	70.55	MOL2	C
ATOM	4661	NZ	LYS	C	45	19.291	-42.128	-65.784	1.00	65.65	MOL2	N
ATOM	4662	C	LYS	C	45	14.052	-43.822	-68.837	1.00	38.66	MOL2	C
ATOM	4663	O	LYS	C	45	13.894	-44.542	-67.854	1.00	45.87	MOL2	O
ATOM	4664	N	LEU	C	46	14.476	-44.286	-69.995	1.00	36.14	MOL2	N
ATOM	4665	CA	LEU	C	46	14.766	-45.698	-70.150	1.00	34.95	MOL2	C
ATOM	4666	CB	LEU	C	46	15.023	-46.025	-71.621	1.00	28.39	MOL2	C
ATOM	4667	CG	LEU	C	46	15.497	-47.425	-71.985	1.00	23.94	MOL2	C
ATOM	4668	CD1	LEU	C	46	14.636	-48.437	-71.328	1.00	28.01	MOL2	C
ATOM	4669	CD2	LEU	C	46	15.437	-47.614	-73.474	1.00	23.58	MOL2	C
ATOM	4670	C	LEU	C	46	15.960	-46.108	-69.322	1.00	39.09	MOL2	C
ATOM	4671	O	LEU	C	46	16.989	-45.429	-69.321	1.00	43.63	MOL2	O
ATOM	4672	N	LEU	C	47	15.807	-47.213	-68.598	1.00	40.04	MOL2	N
ATOM	4673	CA	LEU	C	47	16.880	-47.746	-67.773	1.00	36.49	MOL2	C
ATOM	4674	CB	LEU	C	47	16.400	-48.074	-66.364	1.00	35.32	MOL2	C
ATOM	4675	CG	LEU	C	47	16.526	-46.945	-65.348	1.00	45.46	MOL2	C
ATOM	4676	CD1	LEU	C	47	16.039	-47.403	-64.004	1.00	49.22	MOL2	C
ATOM	4677	CD2	LEU	C	47	17.964	-46.526	-65.240	1.00	52.10	MOL2	C
ATOM	4678	C	LEU	C	47	17.418	-49.009	-68.390	1.00	37.87	MOL2	C
ATOM	4679	O	LEU	C	47	18.606	-49.117	-68.623	1.00	44.63	MOL2	O
ATOM	4680	N	ILE	C	48	16.537	-49.958	-68.679	1.00	36.23	MOL2	N
ATOM	4681	CA	ILE	C	48	16.961	-51.235	-69.225	1.00	32.84	MOL2	C
ATOM	4682	CB	ILE	C	48	17.074	-52.258	-68.070	1.00	34.34	MOL2	C
ATOM	4683	CG2	ILE	C	48	17.200	-53.672	-68.586	1.00	25.98	MOL2	C
ATOM	4684	CG1	ILE	C	48	18.268	-51.897	-67.194	1.00	36.96	MOL2	C
ATOM	4685	CD1	ILE	C	48	18.229	-52.512	-65.823	1.00	36.19	MOL2	C
ATOM	4686	C	ILE	C	48	16.022	-51.786	-70.281	1.00	35.44	MOL2	C
ATOM	4687	O	ILE	C	48	14.815	-51.818	-70.072	1.00	39.59	MOL2	O
ATOM	4688	N	TYR	C	49	16.581	-52.215	-71.413	1.00	36.31	MOL2	N
ATOM	4689	CA	TYR	C	49	15.797	-52.813	-72.493	1.00	37.52	MOL2	C
ATOM	4690	CB	TYR	C	49	16.081	-52.165	-73.852	1.00	37.22	MOL2	C
ATOM	4691	CG	TYR	C	49	17.514	-52.236	-74.361	1.00	38.82	MOL2	C
ATOM	4692	CD1	TYR	C	49	18.494	-51.433	-73.811	1.00	43.57	MOL2	C
ATOM	4693	CE1	TYR	C	49	19.759	-51.371	-74.352	1.00	36.43	MOL2	C
ATOM	4694	CD2	TYR	C	49	17.855	-53.005	-75.477	1.00	37.22	MOL2	C
ATOM	4695	CE2	TYR	C	49	19.127	-52.949	-76.032	1.00	24.31	MOL2	C
ATOM	4696	CZ	TYR	C	49	20.066	-52.122	-75.456	1.00	35.68	MOL2	C
ATOM	4697	OH	TYR	C	49	21.329	-51.997	-75.967	1.00	46.18	MOL2	O
ATOM	4698	C	TYR	C	49	16.075	-54.302	-72.619	1.00	42.30	MOL2	C
ATOM	4699	O	TYR	C	49	17.075	-54.808	-72.109	1.00	45.94	MOL2	O
ATOM	4700	N	LEU	C	50	15.197	-54.999	-73.332	1.00	41.35	MOL2	N
ATOM	4701	CA	LEU	C	50	15.333	-56.434	-73.504	1.00	37.64	MOL2	C
ATOM	4702	CB	LEU	C	50	16.309	-56.760	-74.619	1.00	41.43	MOL2	C
ATOM	4703	CG	LEU	C	50	15.801	-56.897	-76.060	1.00	49.42	MOL2	C
ATOM	4704	CD1	LEU	C	50	14.353	-57.366	-76.092	1.00	43.83	MOL2	C
ATOM	4705	CD2	LEU	C	50	15.953	-55.576	-76.752	1.00	49.87	MOL2	C
ATOM	4706	C	LEU	C	50	15.803	-57.131	-72.232	1.00	38.81	MOL2	C
ATOM	4707	O	LEU	C	50	16.858	-57.741	-72.204	1.00	39.05	MOL2	O
ATOM	4708	N	VAL	C	51	15.011	-57.008	-71.179	1.00	39.86	MOL2	N
ATOM	4709	CA	VAL	C	51	15.264	-57.635	-69.890	1.00	41.18	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4710	CB	VAL	C	51	15.333	-59.142	-69.983	1.00	40.58	MOL2	C
ATOM	4711	CG1	VAL	C	51	15.210	-59.724	-68.598	1.00	38.71	MOL2	C
ATOM	4712	CG2	VAL	C	51	14.249	-59.650	-70.861	1.00	40.41	MOL2	C
ATOM	4713	C	VAL	C	51	16.455	-57.249	-69.062	1.00	44.87	MOL2	C
ATOM	4714	O	VAL	C	51	16.310	-57.004	-67.863	1.00	52.89	MOL2	O
ATOM	4715	N	SER	C	52	17.642	-57.226	-69.643	1.00	42.94	MOL2	N
ATOM	4716	CA	SER	C	52	18.771	-56.866	-68.802	1.00	46.98	MOL2	C
ATOM	4717	CB	SER	C	52	19.354	-58.118	-68.139	1.00	42.72	MOL2	C
ATOM	4718	OG	SER	C	52	19.474	-59.178	-69.066	1.00	55.45	MOL2	O
ATOM	4719	C	SER	C	52	19.877	-56.021	-69.407	1.00	44.33	MOL2	C
ATOM	4720	O	SER	C	52	20.949	-55.910	-68.838	1.00	50.11	MOL2	O
ATOM	4721	N	ASN	C	53	19.610	-55.395	-70.540	1.00	42.65	MOL2	N
ATOM	4722	CA	ASN	C	53	20.604	-54.541	-71.167	1.00	41.62	MOL2	C
ATOM	4723	CB	ASN	C	53	20.452	-54.611	-72.673	1.00	42.75	MOL2	C
ATOM	4724	CG	ASN	C	53	20.612	-55.998	-73.197	1.00	47.39	MOL2	C
ATOM	4725	OD1	ASN	C	53	19.685	-56.801	-73.166	1.00	52.81	MOL2	O
ATOM	4726	ND2	ASN	C	53	21.808	-56.304	-73.673	1.00	56.43	MOL2	N
ATOM	4727	C	ASN	C	53	20.395	-53.103	-70.717	1.00	44.00	MOL2	C
ATOM	4728	O	ASN	C	53	19.272	-52.606	-70.749	1.00	48.58	MOL2	O
ATOM	4729	N	ARG	C	54	21.450	-52.407	-70.315	1.00	42.36	MOL2	N
ATOM	4730	CA	ARG	C	54	21.223	-51.036	-69.888	1.00	46.77	MOL2	C
ATOM	4731	CB	ARG	C	54	21.966	-50.745	-68.565	1.00	54.04	MOL2	C
ATOM	4732	CG	ARG	C	54	23.437	-50.361	-68.636	1.00	62.65	MOL2	C
ATOM	4733	CD	ARG	C	54	23.970	-50.206	-67.220	1.00	53.90	MOL2	C
ATOM	4734	NE	ARG	C	54	23.905	-51.481	-66.516	1.00	64.24	MOL2	N
ATOM	4735	CZ	ARG	C	54	24.889	-52.375	-66.504	1.00	71.05	MOL2	C
ATOM	4736	NH1	ARG	C	54	26.019	-52.120	-67.153	1.00	76.78	MOL2	N
ATOM	4737	NH2	ARG	C	54	24.740	-53.531	-65.866	1.00	71.08	MOL2	N
ATOM	4738	C	ARG	C	54	21.524	-49.998	-70.965	1.00	44.55	MOL2	C
ATOM	4739	O	ARG	C	54	22.327	-50.238	-71.857	1.00	42.06	MOL2	O
ATOM	4740	N	GLU	C	55	20.830	-48.861	-70.908	1.00	49.25	MOL2	N
ATOM	4741	CA	GLU	C	55	21.039	-47.799	-71.892	1.00	52.24	MOL2	C
ATOM	4742	CB	GLU	C	55	20.008	-46.681	-71.769	1.00	55.16	MOL2	C
ATOM	4743	CG	GLU	C	55	18.911	-46.718	-72.816	1.00	64.00	MOL2	C
ATOM	4744	CD	GLU	C	55	19.397	-46.306	-74.186	1.00	66.72	MOL2	C
ATOM	4745	OE1	GLU	C	55	20.377	-46.908	-74.668	1.00	73.90	MOL2	O
ATOM	4746	OE2	GLU	C	55	18.798	-45.381	-74.778	1.00	64.41	MOL2	O
ATOM	4747	C	GLU	C	55	22.396	-47.231	-71.632	1.00	54.17	MOL2	C
ATOM	4748	O	GLU	C	55	22.987	-47.496	-70.586	1.00	52.51	MOL2	O
ATOM	4749	N	SER	C	56	22.880	-46.432	-72.573	1.00	56.90	MOL2	N
ATOM	4750	CA	SER	C	56	24.205	-45.836	-72.467	1.00	60.81	MOL2	C
ATOM	4751	CB	SER	C	56	24.390	-44.785	-73.554	1.00	59.03	MOL2	C
ATOM	4752	OG	SER	C	56	24.195	-45.359	-74.842	1.00	66.73	MOL2	O
ATOM	4753	C	SER	C	56	24.523	-45.225	-71.106	1.00	65.30	MOL2	C
ATOM	4754	O	SER	C	56	25.388	-45.709	-70.372	1.00	71.47	MOL2	O
ATOM	4755	N	GLY	C	57	23.827	-44.161	-70.753	1.00	65.57	MOL2	N
ATOM	4756	CA	GLY	C	57	24.110	-43.535	-69.473	1.00	62.49	MOL2	C
ATOM	4757	C	GLY	C	57	23.886	-44.364	-68.219	1.00	55.75	MOL2	C
ATOM	4758	O	GLY	C	57	24.646	-44.243	-67.272	1.00	57.46	MOL2	O
ATOM	4759	N	VAL	C	58	22.852	-45.201	-68.214	1.00	51.16	MOL2	N
ATOM	4760	CA	VAL	C	58	22.507	-46.016	-67.057	1.00	45.06	MOL2	C
ATOM	4761	CB	VAL	C	58	21.632	-47.208	-67.461	1.00	43.86	MOL2	C
ATOM	4762	CG1	VAL	C	58	20.912	-47.749	-66.253	1.00	45.32	MOL2	C
ATOM	4763	CG2	VAL	C	58	20.642	-46.801	-68.498	1.00	39.41	MOL2	C
ATOM	4764	C	VAL	C	58	23.735	-46.551	-66.334	1.00	48.33	MOL2	C
ATOM	4765	O	VAL	C	58	24.558	-47.247	-66.931	1.00	45.45	MOL2	O
ATOM	4766	N	PRO	C	59	23.867	-46.231	-65.032	1.00	48.70	MOL2	N
ATOM	4767	CD	PRO	C	59	23.066	-45.215	-64.334	1.00	59.59	MOL2	C
ATOM	4768	CA	PRO	C	59	24.972	-46.646	-64.181	1.00	45.60	MOL2	C
ATOM	4769	CB	PRO	C	59	24.665	-45.977	-62.858	1.00	47.98	MOL2	C
ATOM	4770	CG	PRO	C	59	24.041	-44.724	-63.272	1.00	56.22	MOL2	C
ATOM	4771	C	PRO	C	59	25.117	-48.125	-64.043	1.00	51.02	MOL2	C
ATOM	4772	O	PRO	C	59	24.229	-48.900	-64.364	1.00	53.55	MOL2	O
ATOM	4773	N	SER	C	60	26.273	-48.498	-63.523	1.00	63.15	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	4774	CA	SER	C	60	26.636	-49.887	-63.343	1.00	64.70	MOL2	C
ATOM	4775	CB	SER	C	60	28.107	-49.966	-62.869	1.00	76.08	MOL2	C
ATOM	4776	OG	SER	C	60	28.963	-49.038	-63.554	1.00	76.30	MOL2	O
ATOM	4777	C	SER	C	60	25.705	-50.637	-62.374	1.00	60.32	MOL2	C
ATOM	4778	O	SER	C	60	25.409	-51.807	-62.610	1.00	61.45	MOL2	O
ATOM	4779	N	ARG	C	61	25.238	-49.969	-61.310	1.00	49.31	MOL2	N
ATOM	4780	CA	ARG	C	61	24.365	-50.590	-60.305	1.00	43.23	MOL2	C
ATOM	4781	CB	ARG	C	61	24.115	-49.612	-59.147	1.00	35.46	MOL2	C
ATOM	4782	CG	ARG	C	61	24.043	-48.138	-59.542	1.00	42.58	MOL2	C
ATOM	4783	CD	ARG	C	61	23.830	-47.195	-58.337	1.00	37.38	MOL2	C
ATOM	4784	NE	ARG	C	61	23.442	-45.821	-58.702	1.00	36.31	MOL2	N
ATOM	4785	CZ	ARG	C	61	24.218	-44.943	-59.338	1.00	43.03	MOL2	C
ATOM	4786	NH1	ARG	C	61	25.449	-45.269	-59.703	1.00	54.77	MOL2	N
ATOM	4787	NH2	ARG	C	61	23.772	-43.724	-59.606	1.00	45.96	MOL2	N
ATOM	4788	C	ARG	C	61	23.027	-51.186	-60.763	1.00	44.64	MOL2	C
ATOM	4789	O	ARG	C	61	22.603	-52.226	-60.266	1.00	49.46	MOL2	O
ATOM	4790	N	PHE	C	62	22.362	-50.552	-61.715	1.00	42.85	MOL2	N
ATOM	4791	CA	PHE	C	62	21.078	-51.060	-62.185	1.00	41.55	MOL2	C
ATOM	4792	CB	PHE	C	62	20.400	-50.000	-63.034	1.00	32.24	MOL2	C
ATOM	4793	CG	PHE	C	62	20.092	-48.753	-62.282	1.00	33.23	MOL2	C
ATOM	4794	CD1	PHE	C	62	18.952	-48.661	-61.510	1.00	30.43	MOL2	C
ATOM	4795	CD2	PHE	C	62	20.975	-47.691	-62.291	1.00	34.55	MOL2	C
ATOM	4796	CE1	PHE	C	62	18.697	-47.539	-60.760	1.00	31.63	MOL2	C
ATOM	4797	CE2	PHE	C	62	20.723	-46.566	-61.541	1.00	35.40	MOL2	C
ATOM	4798	CZ	PHE	C	62	19.578	-46.493	-60.771	1.00	35.12	MOL2	C
ATOM	4799	C	PHE	C	62	21.214	-52.333	-62.997	1.00	46.01	MOL2	C
ATOM	4800	O	PHE	C	62	21.980	-52.367	-63.942	1.00	54.58	MOL2	O
ATOM	4801	N	SER	C	63	20.464	-53.376	-62.652	1.00	48.82	MOL2	N
ATOM	4802	CA	SER	C	63	20.531	-54.624	-63.407	1.00	47.97	MOL2	C
ATOM	4803	CB	SER	C	63	21.560	-55.551	-62.776	1.00	55.17	MOL2	C
ATOM	4804	OG	SER	C	63	21.678	-55.300	-61.382	1.00	63.54	MOL2	O
ATOM	4805	C	SER	C	63	19.182	-55.322	-63.505	1.00	49.62	MOL2	C
ATOM	4806	O	SER	C	63	18.454	-55.438	-62.520	1.00	51.38	MOL2	O
ATOM	4807	N	GLY	C	64	18.848	-55.781	-64.704	1.00	52.59	MOL2	N
ATOM	4808	CA	GLY	C	64	17.582	-56.462	-64.913	1.00	56.43	MOL2	C
ATOM	4809	C	GLY	C	64	17.784	-57.957	-64.878	1.00	58.12	MOL2	C
ATOM	4810	O	GLY	C	64	18.905	-58.405	-64.691	1.00	61.31	MOL2	O
ATOM	4811	N	SER	C	65	16.712	-58.727	-65.044	1.00	61.30	MOL2	N
ATOM	4812	CA	SER	C	65	16.789	-60.191	-65.035	1.00	63.04	MOL2	C
ATOM	4813	CB	SER	C	65	17.555	-60.696	-63.808	1.00	60.37	MOL2	C
ATOM	4814	OG	SER	C	65	17.103	-60.090	-62.615	1.00	64.71	MOL2	O
ATOM	4815	C	SER	C	65	15.413	-60.829	-65.063	1.00	65.22	MOL2	C
ATOM	4816	O	SER	C	65	14.523	-60.420	-64.321	1.00	69.55	MOL2	O
ATOM	4817	N	GLY	C	66	15.230	-61.834	-65.914	1.00	65.22	MOL2	N
ATOM	4818	CA	GLY	C	66	13.926	-62.458	-65.973	1.00	73.68	MOL2	C
ATOM	4819	C	GLY	C	66	13.676	-63.480	-67.062	1.00	81.66	MOL2	C
ATOM	4820	O	GLY	C	66	14.391	-63.551	-68.069	1.00	79.94	MOL2	O
ATOM	4821	N	SER	C	67	12.627	-64.272	-66.844	1.00	89.51	MOL2	N
ATOM	4822	CA	SER	C	67	12.224	-65.331	-67.764	1.00	93.54	MOL2	C
ATOM	4823	CB	SER	C	67	11.482	-66.435	-67.005	1.00	93.70	MOL2	C
ATOM	4824	OG	SER	C	67	10.333	-65.914	-66.356	1.00	92.11	MOL2	O
ATOM	4825	C	SER	C	67	11.321	-64.782	-68.845	1.00	94.61	MOL2	C
ATOM	4826	O	SER	C	67	11.796	-64.237	-69.844	1.00	95.58	MOL2	O
ATOM	4827	N	GLY	C	68	10.016	-64.937	-68.628	1.00	95.23	MOL2	N
ATOM	4828	CA	GLY	C	68	9.020	-64.463	-69.574	1.00	96.12	MOL2	C
ATOM	4829	C	GLY	C	68	7.683	-64.269	-68.886	1.00	96.00	MOL2	C
ATOM	4830	O	GLY	C	68	6.660	-64.056	-69.537	1.00	96.37	MOL2	O
ATOM	4831	N	THR	C	69	7.704	-64.344	-67.557	1.00	95.68	MOL2	N
ATOM	4832	CA	THR	C	69	6.507	-64.179	-66.737	1.00	91.12	MOL2	C
ATOM	4833	CB	THR	C	69	5.919	-65.537	-66.335	1.00	90.68	MOL2	C
ATOM	4834	OG1	THR	C	69	4.901	-65.339	-65.349	1.00	89.39	MOL2	O
ATOM	4835	CG2	THR	C	69	7.010	-66.443	-65.770	1.00	93.08	MOL2	C
ATOM	4836	C	THR	C	69	6.844	-63.395	-65.472	1.00	88.46	MOL2	C
ATOM	4837	O	THR	C	69	6.030	-62.616	-64.979	1.00	85.81	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	4838	N	ASP	C	70	8.046	-63.612	-64.946	1.00	88.12	MOL2	N
ATOM	4839	CA	ASP	C	70	8.500	-62.905	-63.752	1.00	85.65	MOL2	C
ATOM	4840	CB	ASP	C	70	8.708	-63.866	-62.572	1.00	90.05	MOL2	C
ATOM	4841	CG	ASP	C	70	7.424	-64.558	-62.132	1.00	95.17	MOL2	C
ATOM	4842	OD1	ASP	C	70	7.429	-65.157	-61.035	1.00	99.07	MOL2	O
ATOM	4843	OD2	ASP	C	70	6.419	-64.519	-62.873	1.00	96.71	MOL2	O
ATOM	4844	C	ASP	C	70	9.819	-62.199	-64.056	1.00	79.36	MOL2	C
ATOM	4845	O	ASP	C	70	10.718	-62.769	-64.676	1.00	81.13	MOL2	O
ATOM	4846	N	PHE	C	71	9.923	-60.947	-63.632	1.00	68.65	MOL2	N
ATOM	4847	CA	PHE	C	71	11.132	-60.172	-63.852	1.00	55.13	MOL2	C
ATOM	4848	CB	PHE	C	71	10.950	-59.221	-65.005	1.00	47.53	MOL2	C
ATOM	4849	CG	PHE	C	71	10.576	-59.890	-66.262	1.00	45.02	MOL2	C
ATOM	4850	CD1	PHE	C	71	11.465	-59.963	-67.307	1.00	46.41	MOL2	C
ATOM	4851	CD2	PHE	C	71	9.323	-60.433	-66.415	1.00	42.09	MOL2	C
ATOM	4852	CE1	PHE	C	71	11.103	-60.562	-68.485	1.00	44.29	MOL2	C
ATOM	4853	CE2	PHE	C	71	8.959	-61.033	-67.592	1.00	41.81	MOL2	C
ATOM	4854	CZ	PHE	C	71	9.847	-61.096	-68.628	1.00	40.40	MOL2	C
ATOM	4855	C	PHE	C	71	11.470	-59.372	-62.623	1.00	53.35	MOL2	C
ATOM	4856	O	PHE	C	71	10.616	-59.107	-61.772	1.00	54.82	MOL2	O
ATOM	4857	N	THR	C	72	12.719	-58.957	-62.544	1.00	47.38	MOL2	N
ATOM	4858	CA	THR	C	72	13.162	-58.212	-61.395	1.00	51.19	MOL2	C
ATOM	4859	CB	THR	C	72	13.820	-59.138	-60.369	1.00	57.83	MOL2	C
ATOM	4860	OG1	THR	C	72	12.830	-59.643	-59.463	1.00	69.70	MOL2	O
ATOM	4861	CG2	THR	C	72	14.903	-58.385	-59.603	1.00	59.36	MOL2	C
ATOM	4862	C	THR	C	72	14.178	-57.161	-61.747	1.00	46.72	MOL2	C
ATOM	4863	O	THR	C	72	15.110	-57.419	-62.489	1.00	49.28	MOL2	O
ATOM	4864	N	LEU	C	73	13.990	-55.966	-61.211	1.00	46.28	MOL2	N
ATOM	4865	CA	LEU	C	73	14.925	-54.885	-61.438	1.00	45.82	MOL2	C
ATOM	4866	CB	LEU	C	73	14.196	-53.578	-61.712	1.00	45.60	MOL2	C
ATOM	4867	CG	LEU	C	73	15.168	-52.402	-61.694	1.00	52.06	MOL2	C
ATOM	4868	CD1	LEU	C	73	16.429	-52.775	-62.453	1.00	54.73	MOL2	C
ATOM	4869	CD2	LEU	C	73	14.512	-51.185	-62.299	1.00	54.51	MOL2	C
ATOM	4870	C	LEU	C	73	15.642	-54.787	-60.126	1.00	44.33	MOL2	C
ATOM	4871	O	LEU	C	73	15.015	-54.959	-59.083	1.00	47.74	MOL2	O
ATOM	4872	N	THR	C	74	16.942	-54.521	-60.150	1.00	42.16	MOL2	N
ATOM	4873	CA	THR	C	74	17.665	-54.436	-58.890	1.00	46.63	MOL2	C
ATOM	4874	CB	THR	C	74	18.187	-55.818	-58.459	1.00	50.79	MOL2	C
ATOM	4875	OG1	THR	C	74	19.400	-55.649	-57.714	1.00	53.78	MOL2	O
ATOM	4876	CG2	THR	C	74	18.412	-56.723	-59.683	1.00	50.86	MOL2	C
ATOM	4877	C	THR	C	74	18.821	-53.453	-58.832	1.00	44.72	MOL2	C
ATOM	4878	O	THR	C	74	19.681	-53.425	-59.707	1.00	45.79	MOL2	O
ATOM	4879	N	ILE	C	75	18.831	-52.648	-57.779	1.00	42.15	MOL2	N
ATOM	4880	CA	ILE	C	75	19.873	-51.665	-57.586	1.00	48.05	MOL2	C
ATOM	4881	CB	ILE	C	75	19.282	-50.316	-57.156	1.00	47.25	MOL2	C
ATOM	4882	CG2	ILE	C	75	20.339	-49.226	-57.222	1.00	54.36	MOL2	C
ATOM	4883	OG1	ILE	C	75	18.145	-49.932	-58.091	1.00	41.76	MOL2	C
ATOM	4884	CD1	ILE	C	75	17.763	-48.493	-57.969	1.00	40.92	MOL2	C
ATOM	4885	C	ILE	C	75	20.837	-52.161	-56.510	1.00	53.74	MOL2	C
ATOM	4886	O	ILE	C	75	20.519	-52.153	-55.325	1.00	58.13	MOL2	O
ATOM	4887	N	SER	C	76	22.017	-52.589	-56.947	1.00	56.34	MOL2	N
ATOM	4888	CA	SER	C	76	23.071	-53.111	-56.085	1.00	55.62	MOL2	C
ATOM	4889	CB	SER	C	76	24.334	-53.347	-56.900	1.00	61.50	MOL2	C
ATOM	4890	OG	SER	C	76	24.075	-54.209	-57.995	1.00	81.73	MOL2	O
ATOM	4891	C	SER	C	76	23.446	-52.224	-54.927	1.00	54.64	MOL2	C
ATOM	4892	O	SER	C	76	23.716	-52.699	-53.830	1.00	61.45	MOL2	O
ATOM	4893	N	SER	C	77	23.484	-50.928	-55.163	1.00	52.22	MOL2	N
ATOM	4894	CA	SER	C	77	23.870	-50.024	-54.101	1.00	52.79	MOL2	C
ATOM	4895	CB	SER	C	77	25.389	-49.839	-54.162	1.00	49.01	MOL2	C
ATOM	4896	OG	SER	C	77	25.840	-48.801	-53.318	1.00	53.10	MOL2	O
ATOM	4897	C	SER	C	77	23.138	-48.689	-54.235	1.00	54.66	MOL2	C
ATOM	4898	O	SER	C	77	23.654	-47.741	-54.824	1.00	57.72	MOL2	O
ATOM	4899	N	LEU	C	78	21.935	-48.619	-53.677	1.00	52.90	MOL2	N
ATOM	4900	CA	LEU	C	78	21.130	-47.412	-53.756	1.00	50.36	MOL2	C
ATOM	4901	CB	LEU	C	78	20.011	-47.468	-52.723	1.00	47.88	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4902	CG	LEU	C	78	18.749	-46.876	-53.326	1.00	47.66	MOL2	C
ATOM	4903	CD1	LEU	C	78	18.558	-47.499	-54.675	1.00	48.44	MOL2	C
ATOM	4904	CD2	LEU	C	78	17.545	-47.118	-52.440	1.00	54.70	MOL2	C
ATOM	4905	C	LEU	C	78	21.947	-46.138	-53.582	1.00	50.02	MOL2	C
ATOM	4906	O	LEU	C	78	22.831	-46.061	-52.734	1.00	50.35	MOL2	O
ATOM	4907	N	GLN	C	79	21.640	-45.143	-54.406	1.00	52.73	MOL2	N
ATOM	4908	CA	GLN	C	79	22.334	-43.857	-54.393	1.00	54.06	MOL2	C
ATOM	4909	CB	GLN	C	79	23.080	-43.648	-55.711	1.00	55.34	MOL2	C
ATOM	4910	CG	GLN	C	79	24.229	-44.593	-55.899	1.00	54.70	MOL2	C
ATOM	4911	CD	GLN	C	79	25.156	-44.554	-54.715	1.00	59.34	MOL2	C
ATOM	4912	OE1	GLN	C	79	25.829	-43.547	-54.475	1.00	60.93	MOL2	O
ATOM	4913	NE2	GLN	C	79	25.187	-45.644	-53.949	1.00	52.58	MOL2	N
ATOM	4914	C	GLN	C	79	21.341	-42.731	-54.210	1.00	54.56	MOL2	C
ATOM	4915	O	GLN	C	79	20.169	-42.881	-54.541	1.00	62.39	MOL2	O
ATOM	4916	N	PRO	C	80	21.806	-41.571	-53.721	1.00	52.71	MOL2	N
ATOM	4917	CD	PRO	C	80	23.220	-41.182	-53.617	1.00	49.20	MOL2	C
ATOM	4918	CA	PRO	C	80	20.939	-40.410	-53.493	1.00	55.43	MOL2	C
ATOM	4919	CB	PRO	C	80	21.930	-39.266	-53.320	1.00	49.94	MOL2	C
ATOM	4920	CG	PRO	C	80	23.134	-39.939	-52.777	1.00	51.58	MOL2	C
ATOM	4921	C	PRO	C	80	19.993	-40.161	-54.655	1.00	59.49	MOL2	C
ATOM	4922	O	PRO	C	80	18.794	-39.970	-54.471	1.00	68.04	MOL2	O
ATOM	4923	N	GLU	C	81	20.542	-40.185	-55.858	1.00	58.82	MOL2	N
ATOM	4924	CA	GLU	C	81	19.765	-39.927	-57.051	1.00	65.03	MOL2	C
ATOM	4925	CB	GLU	C	81	20.689	-39.406	-58.158	1.00	76.22	MOL2	C
ATOM	4926	CG	GLU	C	81	22.051	-40.110	-58.272	1.00	88.01	MOL2	C
ATOM	4927	CD	GLU	C	81	23.077	-39.649	-57.229	1.00	97.10	MOL2	C
ATOM	4928	OE1	GLU	C	81	24.225	-40.147	-57.275	1.00	101.10	MOL2	O
ATOM	4929	OE2	GLU	C	81	22.751	-38.795	-56.369	1.00	101.43	MOL2	O
ATOM	4930	C	GLU	C	81	18.959	-41.102	-57.572	1.00	63.06	MOL2	C
ATOM	4931	O	GLU	C	81	18.359	-41.016	-58.638	1.00	70.08	MOL2	O
ATOM	4932	N	ASP	C	82	18.931	-42.199	-56.834	1.00	56.47	MOL2	N
ATOM	4933	CA	ASP	C	82	18.178	-43.356	-57.291	1.00	56.08	MOL2	C
ATOM	4934	CB	ASP	C	82	18.915	-44.631	-56.912	1.00	65.30	MOL2	C
ATOM	4935	CG	ASP	C	82	20.182	-44.808	-57.704	1.00	75.06	MOL2	C
ATOM	4936	OD1	ASP	C	82	20.938	-45.761	-57.409	1.00	79.38	MOL2	O
ATOM	4937	OD2	ASP	C	82	20.407	-43.989	-58.628	1.00	78.88	MOL2	O
ATOM	4938	C	ASP	C	82	16.778	-43.366	-56.716	1.00	50.07	MOL2	C
ATOM	4939	O	ASP	C	82	15.960	-44.244	-57.018	1.00	43.69	MOL2	O
ATOM	4940	N	PHE	C	83	16.512	-42.377	-55.880	1.00	46.85	MOL2	N
ATOM	4941	CA	PHE	C	83	15.217	-42.262	-55.263	1.00	47.13	MOL2	C
ATOM	4942	CB	PHE	C	83	15.316	-41.358	-54.038	1.00	41.56	MOL2	C
ATOM	4943	CG	PHE	C	83	16.047	-41.988	-52.899	1.00	43.74	MOL2	C
ATOM	4944	CD1	PHE	C	83	17.214	-41.435	-52.409	1.00	47.35	MOL2	C
ATOM	4945	CD2	PHE	C	83	15.573	-43.157	-52.326	1.00	50.15	MOL2	C
ATOM	4946	CE1	PHE	C	83	17.899	-42.038	-51.367	1.00	47.11	MOL2	C
ATOM	4947	CE2	PHE	C	83	16.247	-43.765	-51.287	1.00	47.53	MOL2	C
ATOM	4948	CZ	PHE	C	83	17.412	-43.204	-50.808	1.00	50.38	MOL2	C
ATOM	4949	C	PHE	C	83	14.259	-41.716	-56.303	1.00	46.06	MOL2	C
ATOM	4950	O	PHE	C	83	14.272	-40.521	-56.625	1.00	46.82	MOL2	O
ATOM	4951	N	ALA	C	84	13.447	-42.621	-56.838	1.00	40.65	MOL2	N
ATOM	4952	CA	ALA	C	84	12.472	-42.291	-57.854	1.00	41.88	MOL2	C
ATOM	4953	CB	ALA	C	84	13.169	-42.081	-59.176	1.00	43.18	MOL2	C
ATOM	4954	C	ALA	C	84	11.467	-43.417	-57.980	1.00	42.51	MOL2	C
ATOM	4955	O	ALA	C	84	11.444	-44.347	-57.183	1.00	44.46	MOL2	O
ATOM	4956	N	THR	C	85	10.638	-43.340	-58.997	1.00	40.74	MOL2	N
ATOM	4957	CA	THR	C	85	9.659	-44.371	-59.185	1.00	45.97	MOL2	C
ATOM	4958	CB	THR	C	85	8.312	-43.744	-59.441	1.00	52.46	MOL2	C
ATOM	4959	OG1	THR	C	85	8.011	-42.858	-58.352	1.00	55.95	MOL2	O
ATOM	4960	CG2	THR	C	85	7.236	-44.817	-59.564	1.00	57.54	MOL2	C
ATOM	4961	C	THR	C	85	10.132	-45.159	-60.377	1.00	43.47	MOL2	C
ATOM	4962	O	THR	C	85	10.725	-44.579	-61.274	1.00	46.85	MOL2	O
ATOM	4963	N	TYR	C	86	9.896	-46.470	-60.386	1.00	38.56	MOL2	N
ATOM	4964	CA	TYR	C	86	10.333	-47.297	-61.505	1.00	34.41	MOL2	C
ATOM	4965	CB	TYR	C	86	11.420	-48.263	-61.050	1.00	29.81	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	4966	CG	TYR	C	86	12.660	-47.561	-60.554	1.00	33.34	MOL2	C
ATOM	4967	CD1	TYR	C	86	12.753	-47.089	-59.249	1.00	30.80	MOL2	C
ATOM	4968	CE1	TYR	C	86	13.895	-46.406	-58.808	1.00	31.41	MOL2	C
ATOM	4969	CD2	TYR	C	86	13.734	-47.331	-61.407	1.00	38.84	MOL2	C
ATOM	4970	CE2	TYR	C	86	14.873	-46.644	-60.977	1.00	36.10	MOL2	C
ATOM	4971	CZ	TYR	C	86	14.947	-46.192	-59.683	1.00	33.18	MOL2	C
ATOM	4972	OH	TYR	C	86	16.087	-45.553	-59.275	1.00	29.32	MOL2	O
ATOM	4973	C	TYR	C	86	9.192	-48.057	-62.136	1.00	37.41	MOL2	C
ATOM	4974	O	TYR	C	86	8.342	-48.594	-61.433	1.00	42.90	MOL2	O
ATOM	4975	N	TYR	C	87	9.166	-48.097	-63.464	1.00	35.15	MOL2	N
ATOM	4976	CA	TYR	C	87	8.091	-48.793	-64.174	1.00	42.51	MOL2	C
ATOM	4977	CB	TYR	C	87	7.300	-47.825	-65.078	1.00	42.87	MOL2	C
ATOM	4978	CG	TYR	C	87	6.581	-46.680	-64.389	1.00	49.15	MOL2	C
ATOM	4979	CD1	TYR	C	87	5.334	-46.846	-63.809	1.00	49.37	MOL2	C
ATOM	4980	CE1	TYR	C	87	4.699	-45.785	-63.161	1.00	55.42	MOL2	C
ATOM	4981	CD2	TYR	C	87	7.167	-45.429	-64.309	1.00	57.77	MOL2	C
ATOM	4982	CE2	TYR	C	87	6.543	-44.370	-63.667	1.00	58.59	MOL2	C
ATOM	4983	CZ	TYR	C	87	5.318	-44.548	-63.093	1.00	55.31	MOL2	C
ATOM	4984	OH	TYR	C	87	4.748	-43.481	-62.428	1.00	50.87	MOL2	O
ATOM	4985	C	TYR	C	87	8.625	-49.898	-65.069	1.00	44.65	MOL2	C
ATOM	4986	O	TYR	C	87	9.686	-49.744	-65.665	1.00	50.92	MOL2	O
ATOM	4987	N	CYS	C	88	7.902	-51.010	-65.165	1.00	40.51	MOL2	N
ATOM	4988	CA	CYS	C	88	8.321	-52.063	-66.074	1.00	44.56	MOL2	C
ATOM	4989	C	CYS	C	88	7.382	-51.954	-67.247	1.00	44.14	MOL2	C
ATOM	4990	O	CYS	C	88	6.341	-51.336	-67.127	1.00	50.52	MOL2	O
ATOM	4991	CB	CYS	C	88	8.229	-53.445	-65.447	1.00	53.31	MOL2	C
ATOM	4992	SG	CYS	C	88	6.697	-53.880	-64.577	1.00	73.27	MOL2	S
ATOM	4993	N	GLN	C	89	7.744	-52.514	-68.391	1.00	42.16	MOL2	N
ATOM	4994	CA	GLN	C	89	6.883	-52.417	-69.558	1.00	44.69	MOL2	C
ATOM	4995	CB	GLN	C	89	7.140	-51.123	-70.337	1.00	43.41	MOL2	C
ATOM	4996	CG	GLN	C	89	6.642	-51.211	-71.784	1.00	49.94	MOL2	C
ATOM	4997	CD	GLN	C	89	7.269	-50.188	-72.718	1.00	50.73	MOL2	C
ATOM	4998	OE1	GLN	C	89	8.451	-49.885	-72.615	1.00	46.53	MOL2	O
ATOM	4999	NE2	GLN	C	89	6.480	-49.675	-73.656	1.00	52.51	MOL2	N
ATOM	5000	C	GLN	C	89	7.137	-53.582	-70.473	1.00	48.95	MOL2	C
ATOM	5001	O	GLN	C	89	8.263	-54.033	-70.605	1.00	51.54	MOL2	O
ATOM	5002	N	GLN	C	90	6.083	-54.053	-71.121	1.00	53.29	MOL2	N
ATOM	5003	CA	GLN	C	90	6.190	-55.175	-72.029	1.00	56.74	MOL2	C
ATOM	5004	CB	GLN	C	90	5.246	-56.286	-71.568	1.00	59.25	MOL2	C
ATOM	5005	CG	GLN	C	90	3.787	-55.902	-71.608	1.00	58.76	MOL2	C
ATOM	5006	CD	GLN	C	90	3.185	-56.140	-72.969	1.00	68.50	MOL2	C
ATOM	5007	OE1	GLN	C	90	2.093	-55.661	-73.273	1.00	79.12	MOL2	O
ATOM	5008	NE2	GLN	C	90	3.892	-56.895	-73.803	1.00	67.31	MOL2	N
ATOM	5009	C	GLN	C	90	5.798	-54.677	-73.407	1.00	60.06	MOL2	C
ATOM	5010	O	GLN	C	90	5.064	-53.696	-73.520	1.00	60.76	MOL2	O
ATOM	5011	N	THR	C	91	6.306	-55.331	-74.450	1.00	61.92	MOL2	N
ATOM	5012	CA	THR	C	91	5.976	-54.959	-75.819	1.00	62.24	MOL2	C
ATOM	5013	CB	THR	C	91	7.067	-54.124	-76.509	1.00	58.94	MOL2	C
ATOM	5014	OG1	THR	C	91	8.308	-54.830	-76.463	1.00	61.60	MOL2	O
ATOM	5015	CG2	THR	C	91	7.215	-52.783	-75.847	1.00	61.34	MOL2	C
ATOM	5016	C	THR	C	91	5.777	-56.201	-76.648	1.00	66.54	MOL2	C
ATOM	5017	O	THR	C	91	5.987	-56.178	-77.854	1.00	71.36	MOL2	O
ATOM	5018	N	TRP	C	92	5.386	-57.294	-76.010	1.00	70.31	MOL2	N
ATOM	5019	CA	TRP	C	92	5.149	-58.508	-76.762	1.00	80.64	MOL2	C
ATOM	5020	CB	TRP	C	92	5.232	-59.735	-75.857	1.00	85.10	MOL2	C
ATOM	5021	CG	TRP	C	92	5.571	-60.982	-76.607	1.00	97.56	MOL2	C
ATOM	5022	CD2	TRP	C	92	4.837	-62.207	-76.612	1.00	103.33	MOL2	C
ATOM	5023	CE2	TRP	C	92	5.527	-63.108	-77.457	1.00	108.01	MOL2	C
ATOM	5024	CE3	TRP	C	92	3.663	-62.635	-75.984	1.00	106.52	MOL2	C
ATOM	5025	CD1	TRP	C	92	6.650	-61.180	-77.428	1.00	104.29	MOL2	C
ATOM	5026	NE1	TRP	C	92	6.630	-62.457	-77.943	1.00	104.83	MOL2	N
ATOM	5027	CZ2	TRP	C	92	5.078	-64.408	-77.688	1.00	114.24	MOL2	C
ATOM	5028	CZ3	TRP	C	92	3.216	-63.930	-76.214	1.00	115.21	MOL2	C
ATOM	5029	CH2	TRP	C	92	3.923	-64.801	-77.059	1.00	118.29	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5030	C	TRP	C	92	3.766	-58.397	-77.405	1.00	87.15	MOL2	C
ATOM	5031	O	TRP	C	92	3.638	-58.507	-78.626	1.00	89.95	MOL2	O
ATOM	5032	N	SER	C	93	2.741	-58.151	-76.587	1.00	92.89	MOL2	N
ATOM	5033	CA	SER	C	93	1.364	-58.013	-77.073	1.00	98.74	MOL2	C
ATOM	5034	CB	SER	C	93	0.371	-58.525	-76.023	1.00	102.20	MOL2	C
ATOM	5035	OG	SER	C	93	0.370	-59.945	-75.962	1.00	103.64	MOL2	O
ATOM	5036	C	SER	C	93	1.025	-56.568	-77.427	1.00	100.18	MOL2	C
ATOM	5037	O	SER	C	93	1.289	-55.650	-76.647	1.00	97.42	MOL2	O
ATOM	5038	N	ASP	C	94	0.416	-56.393	-78.599	1.00	101.46	MOL2	N
ATOM	5039	CA	ASP	C	94	0.042	-55.086	-79.131	1.00	104.82	MOL2	C
ATOM	5040	CB	ASP	C	94	-1.136	-55.232	-80.089	1.00	113.86	MOL2	C
ATOM	5041	CG	ASP	C	94	-1.477	-53.923	-80.778	1.00	123.75	MOL2	C
ATOM	5042	OD1	ASP	C	94	-2.669	-53.693	-81.099	1.00	127.52	MOL2	O
ATOM	5043	OD2	ASP	C	94	-0.535	-53.126	-81.001	1.00	124.10	MOL2	O
ATOM	5044	C	ASP	C	94	-0.282	-53.949	-78.153	1.00	101.57	MOL2	C
ATOM	5045	O	ASP	C	94	0.285	-52.857	-78.251	1.00	108.20	MOL2	O
ATOM	5046	N	PRO	C	95	-1.225	-54.164	-77.224	1.00	93.00	MOL2	N
ATOM	5047	CD	PRO	C	95	-2.164	-55.268	-77.003	1.00	90.23	MOL2	C
ATOM	5048	CA	PRO	C	95	-1.500	-53.046	-76.312	1.00	85.27	MOL2	C
ATOM	5049	CB	PRO	C	95	-2.800	-53.450	-75.621	1.00	80.37	MOL2	C
ATOM	5050	CG	PRO	C	95	-3.372	-54.514	-76.521	1.00	91.74	MOL2	C
ATOM	5051	C	PRO	C	95	-0.361	-52.954	-75.318	1.00	80.12	MOL2	C
ATOM	5052	O	PRO	C	95	-0.492	-53.406	-74.186	1.00	84.08	MOL2	O
ATOM	5053	N	TRP	C	96	0.763	-52.394	-75.742	1.00	69.19	MOL2	N
ATOM	5054	CA	TRP	C	96	1.902	-52.276	-74.858	1.00	64.73	MOL2	C
ATOM	5055	CB	TRP	C	96	2.939	-51.339	-75.472	1.00	67.03	MOL2	C
ATOM	5056	CG	TRP	C	96	3.479	-51.811	-76.799	1.00	65.50	MOL2	C
ATOM	5057	CD2	TRP	C	96	4.212	-51.031	-77.751	1.00	64.82	MOL2	C
ATOM	5058	CE2	TRP	C	96	4.535	-51.883	-78.830	1.00	64.27	MOL2	C
ATOM	5059	CE3	TRP	C	96	4.631	-49.694	-77.796	1.00	65.71	MOL2	C
ATOM	5060	CD1	TRP	C	96	3.393	-53.074	-77.324	1.00	62.32	MOL2	C
ATOM	5061	NE1	TRP	C	96	4.024	-53.123	-78.543	1.00	57.53	MOL2	N
ATOM	5062	CZ2	TRP	C	96	5.257	-51.439	-79.950	1.00	67.90	MOL2	C
ATOM	5063	CZ3	TRP	C	96	5.350	-49.254	-78.907	1.00	71.07	MOL2	C
ATOM	5064	CH2	TRP	C	96	5.654	-50.127	-79.971	1.00	69.11	MOL2	C
ATOM	5065	C	TRP	C	96	1.448	-51.751	-73.499	1.00	62.33	MOL2	C
ATOM	5066	O	TRP	C	96	0.760	-50.736	-73.411	1.00	61.48	MOL2	O
ATOM	5067	N	THR	C	97	1.825	-52.438	-72.430	1.00	60.38	MOL2	N
ATOM	5068	CA	THR	C	97	1.402	-51.994	-71.107	1.00	67.03	MOL2	C
ATOM	5069	CB	THR	C	97	0.421	-52.981	-70.503	1.00	66.35	MOL2	C
ATOM	5070	OG1	THR	C	97	1.033	-54.275	-70.429	1.00	60.19	MOL2	O
ATOM	5071	CG2	THR	C	97	-0.838	-53.035	-71.356	1.00	68.04	MOL2	C
ATOM	5072	C	THR	C	97	2.517	-51.743	-70.093	1.00	67.76	MOL2	C
ATOM	5073	O	THR	C	97	3.618	-52.282	-70.211	1.00	74.50	MOL2	O
ATOM	5074	N	PHE	C	98	2.219	-50.913	-69.096	1.00	59.78	MOL2	N
ATOM	5075	CA	PHE	C	98	3.187	-50.571	-68.068	1.00	57.99	MOL2	C
ATOM	5076	CB	PHE	C	98	3.302	-49.052	-67.913	1.00	61.94	MOL2	C
ATOM	5077	CG	PHE	C	98	4.001	-48.362	-69.039	1.00	61.57	MOL2	C
ATOM	5078	CD1	PHE	C	98	3.456	-48.332	-70.303	1.00	67.69	MOL2	C
ATOM	5079	CD2	PHE	C	98	5.194	-47.711	-68.823	1.00	66.48	MOL2	C
ATOM	5080	CE1	PHE	C	98	4.093	-47.660	-71.330	1.00	67.42	MOL2	C
ATOM	5081	CE2	PHE	C	98	5.833	-47.039	-69.846	1.00	68.13	MOL2	C
ATOM	5082	CZ	PHE	C	98	5.282	-47.014	-71.097	1.00	66.10	MOL2	C
ATOM	5083	C	PHE	C	98	2.795	-51.131	-66.706	1.00	59.07	MOL2	C
ATOM	5084	O	PHE	C	98	1.687	-51.611	-66.501	1.00	62.87	MOL2	O
ATOM	5085	N	GLY	C	99	3.724	-51.036	-65.765	1.00	59.70	MOL2	N
ATOM	5086	CA	GLY	C	99	3.475	-51.494	-64.420	1.00	53.24	MOL2	C
ATOM	5087	C	GLY	C	99	2.872	-50.333	-63.670	1.00	51.26	MOL2	C
ATOM	5088	O	GLY	C	99	2.812	-49.216	-64.185	1.00	48.83	MOL2	O
ATOM	5089	N	GLN	C	100	2.423	-50.605	-62.455	1.00	51.14	MOL2	N
ATOM	5090	CA	GLN	C	100	1.798	-49.603	-61.623	1.00	55.18	MOL2	C
ATOM	5091	CB	GLN	C	100	1.165	-50.288	-60.427	1.00	63.92	MOL2	C
ATOM	5092	CG	GLN	C	100	2.172	-51.079	-59.621	1.00	74.70	MOL2	C
ATOM	5093	CD	GLN	C	100	1.666	-51.403	-58.236	1.00	86.82	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5094	OE1	GLN	C	100	2.423	-51.875	-57.376	1.00	92.54	MOL2	O
ATOM	5095	NE2	GLN	C	100	0.374	-51.155	-58.004	1.00	91.03	MOL2	N
ATOM	5096	C	GLN	C	100	2.864	-48.636	-61.153	1.00	54.59	MOL2	C
ATOM	5097	O	GLN	C	100	2.571	-47.503	-60.752	1.00	52.82	MOL2	O
ATOM	5098	N	GLY	C	101	4.109	-49.099	-61.203	1.00	53.10	MOL2	N
ATOM	5099	CA	GLY	C	101	5.221	-48.274	-60.761	1.00	53.78	MOL2	C
ATOM	5100	C	GLY	C	101	5.540	-48.436	-59.280	1.00	52.00	MOL2	C
ATOM	5101	O	GLY	C	101	4.632	-48.520	-58.442	1.00	50.84	MOL2	O
ATOM	5102	N	THR	C	102	6.833	-48.470	-58.961	1.00	46.88	MOL2	N
ATOM	5103	CA	THR	C	102	7.312	-48.628	-57.589	1.00	41.81	MOL2	C
ATOM	5104	CB	THR	C	102	8.336	-49.750	-57.467	1.00	42.84	MOL2	C
ATOM	5105	OG1	THR	C	102	7.736	-51.009	-57.785	1.00	42.59	MOL2	O
ATOM	5106	CG2	THR	C	102	8.894	-49.770	-56.079	1.00	37.70	MOL2	C
ATOM	5107	C	THR	C	102	8.042	-47.382	-57.151	1.00	39.95	MOL2	C
ATOM	5108	O	THR	C	102	8.985	-46.964	-57.795	1.00	40.11	MOL2	O
ATOM	5109	N	LYS	C	103	7.634	-46.785	-56.049	1.00	44.42	MOL2	N
ATOM	5110	CA	LYS	C	103	8.325	-45.588	-55.613	1.00	49.42	MOL2	C
ATOM	5111	CB	LYS	C	103	7.337	-44.513	-55.133	1.00	56.28	MOL2	C
ATOM	5112	CG	LYS	C	103	7.986	-43.208	-54.646	1.00	57.48	MOL2	C
ATOM	5113	CD	LYS	C	103	6.943	-42.090	-54.455	1.00	75.34	MOL2	C
ATOM	5114	CE	LYS	C	103	6.175	-41.808	-55.767	1.00	93.46	MOL2	C
ATOM	5115	NZ	LYS	C	103	5.148	-40.707	-55.711	1.00	98.17	MOL2	N
ATOM	5116	C	LYS	C	103	9.280	-45.947	-54.505	1.00	50.29	MOL2	C
ATOM	5117	O	LYS	C	103	8.903	-46.585	-53.518	1.00	55.19	MOL2	O
ATOM	5118	N	VAL	C	104	10.529	-45.546	-54.688	1.00	46.27	MOL2	N
ATOM	5119	CA	VAL	C	104	11.556	-45.801	-53.705	1.00	42.44	MOL2	C
ATOM	5120	CB	VAL	C	104	12.848	-46.242	-54.366	1.00	41.07	MOL2	C
ATOM	5121	CG1	VAL	C	104	13.947	-46.361	-53.315	1.00	44.48	MOL2	C
ATOM	5122	CG2	VAL	C	104	12.621	-47.571	-55.066	1.00	35.63	MOL2	C
ATOM	5123	C	VAL	C	104	11.803	-44.522	-52.957	1.00	40.72	MOL2	C
ATOM	5124	O	VAL	C	104	12.099	-43.505	-53.569	1.00	38.61	MOL2	O
ATOM	5125	N	GLU	C	105	11.671	-44.576	-51.633	1.00	47.49	MOL2	N
ATOM	5126	CA	GLU	C	105	11.874	-43.407	-50.773	1.00	56.29	MOL2	C
ATOM	5127	CB	GLU	C	105	10.555	-43.003	-50.112	1.00	60.05	MOL2	C
ATOM	5128	CG	GLU	C	105	9.531	-42.530	-51.129	1.00	76.31	MOL2	C
ATOM	5129	CD	GLU	C	105	8.137	-42.380	-50.563	1.00	83.54	MOL2	C
ATOM	5130	OE1	GLU	C	105	7.564	-43.409	-50.132	1.00	85.88	MOL2	O
ATOM	5131	OE2	GLU	C	105	7.617	-41.236	-50.559	1.00	87.48	MOL2	O
ATOM	5132	C	GLU	C	105	12.924	-43.665	-49.710	1.00	56.45	MOL2	C
ATOM	5133	O	GLU	C	105	13.151	-44.807	-49.328	1.00	66.11	MOL2	O
ATOM	5134	N	ILE	C	106	13.564	-42.602	-49.233	1.00	57.45	MOL2	N
ATOM	5135	CA	ILE	C	106	14.614	-42.710	-48.210	1.00	63.29	MOL2	C
ATOM	5136	CB	ILE	C	106	15.345	-41.378	-47.985	1.00	69.09	MOL2	C
ATOM	5137	CG2	ILE	C	106	16.817	-41.562	-48.252	1.00	73.60	MOL2	C
ATOM	5138	CG1	ILE	C	106	14.701	-40.266	-48.822	1.00	75.56	MOL2	C
ATOM	5139	CD1	ILE	C	106	15.339	-38.880	-48.647	1.00	72.29	MOL2	C
ATOM	5140	C	ILE	C	106	14.116	-43.108	-46.830	1.00	62.98	MOL2	C
ATOM	5141	O	ILE	C	106	13.289	-42.409	-46.257	1.00	68.92	MOL2	O
ATOM	5142	N	LYS	C	107	14.649	-44.200	-46.283	1.00	58.93	MOL2	N
ATOM	5143	CA	LYS	C	107	14.276	-44.697	-44.946	1.00	52.34	MOL2	C
ATOM	5144	CB	LYS	C	107	14.875	-46.086	-44.728	1.00	53.80	MOL2	C
ATOM	5145	CG	LYS	C	107	14.056	-47.077	-43.939	1.00	61.17	MOL2	C
ATOM	5146	CD	LYS	C	107	13.947	-46.753	-42.471	1.00	67.82	MOL2	C
ATOM	5147	CE	LYS	C	107	13.175	-47.877	-41.744	1.00	80.85	MOL2	C
ATOM	5148	NZ	LYS	C	107	11.870	-48.278	-42.404	1.00	84.14	MOL2	N
ATOM	5149	C	LYS	C	107	14.867	-43.788	-43.888	1.00	44.89	MOL2	C
ATOM	5150	O	LYS	C	107	15.973	-43.294	-44.049	1.00	43.57	MOL2	O
ATOM	5151	N	ARG	C	108	14.149	-43.562	-42.799	1.00	47.59	MOL2	N
ATOM	5152	CA	ARG	C	108	14.698	-42.731	-41.719	1.00	53.58	MOL2	C
ATOM	5153	CB	ARG	C	108	14.588	-41.238	-42.075	1.00	54.26	MOL2	C
ATOM	5154	CG	ARG	C	108	13.184	-40.659	-42.059	1.00	55.57	MOL2	C
ATOM	5155	CD	ARG	C	108	12.876	-40.077	-40.702	1.00	58.02	MOL2	C
ATOM	5156	NE	ARG	C	108	13.231	-38.665	-40.573	1.00	56.78	MOL2	N
ATOM	5157	CZ	ARG	C	108	13.332	-38.031	-39.407	1.00	54.67	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5158	NH1	ARG	C	108	13.121	-38.685	-38.273	1.00	49.50	MOL2	N
ATOM	5159	NH2	ARG	C	108	13.613	-36.737	-39.370	1.00	53.79	MOL2	N
ATOM	5160	C	ARG	C	108	14.098	-43.020	-40.322	1.00	53.05	MOL2	C
ATOM	5161	O	ARG	C	108	13.123	-43.785	-40.174	1.00	50.99	MOL2	O
ATOM	5162	N	THR	C	109	14.698	-42.434	-39.291	1.00	49.06	MOL2	N
ATOM	5163	CA	THR	C	109	14.201	-42.687	-37.943	1.00	50.32	MOL2	C
ATOM	5164	CB	THR	C	109	15.051	-42.016	-36.841	1.00	47.66	MOL2	C
ATOM	5165	OG1	THR	C	109	14.837	-40.598	-36.835	1.00	49.22	MOL2	O
ATOM	5166	CG2	THR	C	109	16.509	-42.320	-37.067	1.00	52.82	MOL2	C
ATOM	5167	C	THR	C	109	12.789	-42.197	-37.830	1.00	50.20	MOL2	C
ATOM	5168	O	THR	C	109	12.454	-41.146	-38.353	1.00	54.79	MOL2	O
ATOM	5169	N	ASP	C	110	11.954	-42.966	-37.148	1.00	50.95	MOL2	N
ATOM	5170	CA	ASP	C	110	10.557	-42.593	-36.982	1.00	53.05	MOL2	C
ATOM	5171	CB	ASP	C	110	9.814	-43.725	-36.261	1.00	55.22	MOL2	C
ATOM	5172	CG	ASP	C	110	9.661	-44.982	-37.140	1.00	65.59	MOL2	C
ATOM	5173	OD1	ASP	C	110	10.490	-45.198	-38.062	1.00	71.39	MOL2	O
ATOM	5174	OD2	ASP	C	110	8.716	-45.765	-36.905	1.00	64.73	MOL2	O
ATOM	5175	C	ASP	C	110	10.424	-41.265	-36.238	1.00	51.10	MOL2	C
ATOM	5176	O	ASP	C	110	11.309	-40.875	-35.477	1.00	50.89	MOL2	O
ATOM	5177	N	ALA	C	111	9.340	-40.544	-36.494	1.00	50.53	MOL2	N
ATOM	5178	CA	ALA	C	111	9.123	-39.268	-35.821	1.00	51.57	MOL2	C
ATOM	5179	CB	ALA	C	111	9.864	-38.157	-36.528	1.00	52.34	MOL2	C
ATOM	5180	C	ALA	C	111	7.638	-38.961	-35.759	1.00	53.06	MOL2	C
ATOM	5181	O	ALA	C	111	6.908	-39.124	-36.739	1.00	47.58	MOL2	O
ATOM	5182	N	ALA	C	112	7.203	-38.529	-34.581	1.00	53.40	MOL2	N
ATOM	5183	CA	ALA	C	112	5.814	-38.210	-34.349	1.00	50.17	MOL2	C
ATOM	5184	CB	ALA	C	112	5.564	-38.185	-32.880	1.00	55.55	MOL2	C
ATOM	5185	C	ALA	C	112	5.410	-36.880	-34.975	1.00	53.70	MOL2	C
ATOM	5186	O	ALA	C	112	6.202	-35.931	-35.052	1.00	54.34	MOL2	O
ATOM	5187	N	PRO	C	113	4.156	-36.798	-35.432	1.00	53.05	MOL2	N
ATOM	5188	CD	PRO	C	113	3.166	-37.881	-35.344	1.00	52.40	MOL2	C
ATOM	5189	CA	PRO	C	113	3.559	-35.626	-36.066	1.00	55.03	MOL2	C
ATOM	5190	CB	PRO	C	113	2.263	-36.176	-36.623	1.00	55.06	MOL2	C
ATOM	5191	CG	PRO	C	113	1.873	-37.135	-35.581	1.00	51.19	MOL2	C
ATOM	5192	C	PRO	C	113	3.284	-34.525	-35.074	1.00	59.02	MOL2	C
ATOM	5193	O	PRO	C	113	3.070	-34.785	-33.892	1.00	64.39	MOL2	O
ATOM	5194	N	THR	C	114	3.290	-33.293	-35.561	1.00	62.28	MOL2	N
ATOM	5195	CA	THR	C	114	3.000	-32.149	-34.719	1.00	66.52	MOL2	C
ATOM	5196	CB	THR	C	114	4.086	-31.088	-34.827	1.00	72.58	MOL2	C
ATOM	5197	OG1	THR	C	114	5.212	-31.486	-34.037	1.00	83.95	MOL2	O
ATOM	5198	CG2	THR	C	114	3.572	-29.752	-34.345	1.00	74.22	MOL2	C
ATOM	5199	C	THR	C	114	1.698	-31.605	-35.247	1.00	68.36	MOL2	C
ATOM	5200	O	THR	C	114	1.666	-30.956	-36.293	1.00	72.84	MOL2	O
ATOM	5201	N	VAL	C	115	0.619	-31.890	-34.527	1.00	69.64	MOL2	N
ATOM	5202	CA	VAL	C	115	-0.711	-31.454	-34.942	1.00	71.67	MOL2	C
ATOM	5203	CB	VAL	C	115	-1.792	-32.401	-34.392	1.00	68.29	MOL2	C
ATOM	5204	CG1	VAL	C	115	-3.165	-31.978	-34.883	1.00	65.89	MOL2	C
ATOM	5205	CG2	VAL	C	115	-1.494	-33.812	-34.824	1.00	68.29	MOL2	C
ATOM	5206	C	VAL	C	115	-1.083	-30.021	-34.558	1.00	76.27	MOL2	C
ATOM	5207	O	VAL	C	115	-0.536	-29.433	-33.611	1.00	80.19	MOL2	O
ATOM	5208	N	SER	C	116	-2.026	-29.468	-35.311	1.00	74.82	MOL2	N
ATOM	5209	CA	SER	C	116	-2.495	-28.117	-35.086	1.00	72.32	MOL2	C
ATOM	5210	CB	SER	C	116	-1.538	-27.122	-35.757	1.00	75.16	MOL2	C
ATOM	5211	OG	SER	C	116	-0.198	-27.312	-35.319	1.00	74.38	MOL2	O
ATOM	5212	C	SER	C	116	-3.883	-28.024	-35.700	1.00	71.04	MOL2	C
ATOM	5213	O	SER	C	116	-4.092	-28.417	-36.850	1.00	67.49	MOL2	O
ATOM	5214	N	ILE	C	117	-4.847	-27.532	-34.936	1.00	72.51	MOL2	N
ATOM	5215	CA	ILE	C	117	-6.183	-27.413	-35.496	1.00	76.85	MOL2	C
ATOM	5216	CB	ILE	C	117	-7.188	-28.294	-34.712	1.00	74.89	MOL2	C
ATOM	5217	CG2	ILE	C	117	-7.482	-27.688	-33.360	1.00	75.13	MOL2	C
ATOM	5218	CG1	ILE	C	117	-8.458	-28.482	-35.540	1.00	73.77	MOL2	C
ATOM	5219	CD1	ILE	C	117	-9.384	-29.550	-35.002	1.00	70.72	MOL2	C
ATOM	5220	C	ILE	C	117	-6.619	-25.939	-35.571	1.00	79.10	MOL2	C
ATOM	5221	O	ILE	C	117	-6.304	-25.124	-34.689	1.00	75.27	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	5222	N	PHE	C	118	-7.312	-25.594	-36.654	1.00	79.06	MOL2	N
ATOM	5223	CA	PHE	C	118	-7.734	-24.226	-36.841	1.00	82.93	MOL2	C
ATOM	5224	CB	PHE	C	118	-6.868	-23.600	-37.922	1.00	88.66	MOL2	C
ATOM	5225	CG	PHE	C	118	-5.412	-23.779	-37.668	1.00	92.35	MOL2	C
ATOM	5226	CD1	PHE	C	118	-4.698	-24.765	-38.319	1.00	100.70	MOL2	C
ATOM	5227	CD2	PHE	C	118	-4.770	-23.010	-36.718	1.00	94.88	MOL2	C
ATOM	5228	CE1	PHE	C	118	-3.358	-24.982	-38.022	1.00	108.64	MOL2	C
ATOM	5229	CE2	PHE	C	118	-3.436	-23.220	-36.414	1.00	102.11	MOL2	C
ATOM	5230	CZ	PHE	C	118	-2.727	-24.206	-37.065	1.00	106.08	MOL2	C
ATOM	5231	C	PHE	C	118	-9.215	-24.045	-37.125	1.00	84.79	MOL2	C
ATOM	5232	O	PHE	C	118	-9.797	-24.722	-37.981	1.00	84.33	MOL2	O
ATOM	5233	N	PRO	C	119	-9.845	-23.123	-36.378	1.00	84.75	MOL2	N
ATOM	5234	CD	PRO	C	119	-9.142	-22.344	-35.345	1.00	86.66	MOL2	C
ATOM	5235	CA	PRO	C	119	-11.260	-22.746	-36.435	1.00	82.20	MOL2	C
ATOM	5236	CB	PRO	C	119	-11.425	-21.842	-35.219	1.00	89.30	MOL2	C
ATOM	5237	CG	PRO	C	119	-10.216	-22.175	-34.332	1.00	89.26	MOL2	C
ATOM	5238	C	PRO	C	119	-11.509	-21.989	-37.719	1.00	81.90	MOL2	C
ATOM	5239	O	PRO	C	119	-10.617	-21.295	-38.211	1.00	85.94	MOL2	O
ATOM	5240	N	PRO	C	120	-12.728	-22.088	-38.266	1.00	79.18	MOL2	N
ATOM	5241	CD	PRO	C	120	-13.891	-22.740	-37.654	1.00	74.33	MOL2	C
ATOM	5242	CA	PRO	C	120	-13.109	-21.414	-39.514	1.00	83.28	MOL2	C
ATOM	5243	CB	PRO	C	120	-14.613	-21.666	-39.598	1.00	78.99	MOL2	C
ATOM	5244	CG	PRO	C	120	-14.785	-22.936	-38.853	1.00	79.17	MOL2	C
ATOM	5245	C	PRO	C	120	-12.781	-19.918	-39.496	1.00	88.69	MOL2	C
ATOM	5246	O	PRO	C	120	-13.058	-19.227	-38.512	1.00	88.57	MOL2	O
ATOM	5247	N	SER	C	121	-12.181	-19.420	-40.577	1.00	93.69	MOL2	N
ATOM	5248	CA	SER	C	121	-11.840	-18.002	-40.654	1.00	98.12	MOL2	C
ATOM	5249	CB	SER	C	121	-11.149	-17.666	-41.986	1.00	103.21	MOL2	C
ATOM	5250	OG	SER	C	121	-9.860	-18.249	-42.094	1.00	106.70	MOL2	O
ATOM	5251	C	SER	C	121	-13.130	-17.196	-40.549	1.00	99.93	MOL2	C
ATOM	5252	O	SER	C	121	-14.105	-17.485	-41.254	1.00	98.91	MOL2	O
ATOM	5253	N	SER	C	122	-13.144	-16.195	-39.669	1.00	100.00	MOL2	N
ATOM	5254	CA	SER	C	122	-14.333	-15.355	-39.516	1.00	98.46	MOL2	C
ATOM	5255	CB	SER	C	122	-14.039	-14.168	-38.593	1.00	96.67	MOL2	C
ATOM	5256	OG	SER	C	122	-13.835	-14.597	-37.260	1.00	95.18	MOL2	O
ATOM	5257	C	SER	C	122	-14.733	-14.850	-40.901	1.00	97.46	MOL2	C
ATOM	5258	O	SER	C	122	-15.912	-14.780	-41.250	1.00	95.78	MOL2	O
ATOM	5259	N	GLU	C	123	-13.719	-14.515	-41.685	1.00	95.17	MOL2	N
ATOM	5260	CA	GLU	C	123	-13.897	-14.021	-43.031	1.00	96.49	MOL2	C
ATOM	5261	CB	GLU	C	123	-12.513	-13.741	-43.626	1.00	101.06	MOL2	C
ATOM	5262	CG	GLU	C	123	-11.598	-12.872	-42.722	1.00	105.38	MOL2	C
ATOM	5263	CD	GLU	C	123	-11.419	-13.419	-41.291	1.00	107.61	MOL2	C
ATOM	5264	OE1	GLU	C	123	-11.022	-14.594	-41.134	1.00	111.76	MOL2	O
ATOM	5265	OE2	GLU	C	123	-11.670	-12.673	-40.316	1.00	103.87	MOL2	O
ATOM	5266	C	GLU	C	123	-14.656	-15.072	-43.845	1.00	97.39	MOL2	C
ATOM	5267	O	GLU	C	123	-15.453	-14.742	-44.728	1.00	97.52	MOL2	O
ATOM	5268	N	GLN	C	124	-14.414	-16.340	-43.525	1.00	97.89	MOL2	N
ATOM	5269	CA	GLN	C	124	-15.059	-17.460	-44.212	1.00	101.57	MOL2	C
ATOM	5270	CB	GLN	C	124	-14.358	-18.771	-43.837	1.00	105.91	MOL2	C
ATOM	5271	CG	GLN	C	124	-15.008	-20.006	-44.441	1.00	107.01	MOL2	C
ATOM	5272	CD	GLN	C	124	-14.364	-21.295	-43.978	1.00	103.71	MOL2	C
ATOM	5273	OE1	GLN	C	124	-14.499	-22.331	-44.631	1.00	101.30	MOL2	O
ATOM	5274	NE2	GLN	C	124	-13.673	-21.244	-42.841	1.00	99.29	MOL2	N
ATOM	5275	C	GLN	C	124	-16.529	-17.559	-43.823	1.00	99.96	MOL2	C
ATOM	5276	O	GLN	C	124	-17.417	-17.669	-44.677	1.00	94.72	MOL2	O
ATOM	5277	N	LEU	C	125	-16.750	-17.544	-42.514	1.00	100.90	MOL2	N
ATOM	5278	CA	LEU	C	125	-18.077	-17.616	-41.919	1.00	105.80	MOL2	C
ATOM	5279	CB	LEU	C	125	-18.006	-17.163	-40.460	1.00	107.11	MOL2	C
ATOM	5280	CG	LEU	C	125	-17.051	-17.885	-39.509	1.00	112.14	MOL2	C
ATOM	5281	CD1	LEU	C	125	-16.864	-17.060	-38.238	1.00	111.82	MOL2	C
ATOM	5282	CD2	LEU	C	125	-17.602	-19.270	-39.189	1.00	113.18	MOL2	C
ATOM	5283	C	LEU	C	125	-19.037	-16.693	-42.655	1.00	109.20	MOL2	C
ATOM	5284	O	LEU	C	125	-20.187	-17.050	-42.942	1.00	109.87	MOL2	O
ATOM	5285	N	THR	C	126	-18.553	-15.488	-42.939	1.00	110.02	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	5286	CA	THR	C	126	-19.352	-14.487	-43.627	1.00110.15	MOL2	C
ATOM	5287	CB	THR	C	126	-18.690	-13.090	-43.555	1.00111.30	MOL2	C
ATOM	5288	OG1	THR	C	126	-17.549	-13.055	-44.421	1.00116.23	MOL2	O
ATOM	5289	CG2	THR	C	126	-18.240	-12.781	-42.125	1.00110.60	MOL2	C
ATOM	5290	C	THR	C	126	-19.519	-14.880	-45.089	1.00111.30	MOL2	C
ATOM	5291	O	THR	C	126	-19.216	-14.096	-45.991	1.00113.98	MOL2	O
ATOM	5292	N	SER	C	127	-19.993	-16.101	-45.316	1.00110.58	MOL2	N
ATOM	5293	CA	SER	C	127	-20.208	-16.602	-46.668	1.00111.26	MOL2	C
ATOM	5294	CB	SER	C	127	-18.870	-16.820	-47.385	1.00115.20	MOL2	C
ATOM	5295	OG	SER	C	127	-19.073	-17.129	-48.757	1.00114.55	MOL2	O
ATOM	5296	C	SER	C	127	-20.980	-17.910	-46.610	1.00110.60	MOL2	C
ATOM	5297	O	SER	C	127	-21.007	-18.672	-47.580	1.00110.21	MOL2	O
ATOM	5298	N	GLY	C	128	-21.600	-18.166	-45.461	1.00109.69	MOL2	N
ATOM	5299	CA	GLY	C	128	-22.384	-19.379	-45.292	1.00110.41	MOL2	C
ATOM	5300	C	GLY	C	128	-21.583	-20.668	-45.338	1.00108.79	MOL2	C
ATOM	5301	O	GLY	C	128	-22.125	-21.751	-45.585	1.00107.03	MOL2	O
ATOM	5302	N	GLY	C	129	-20.283	-20.556	-45.098	1.00106.35	MOL2	N
ATOM	5303	CA	GLY	C	129	-19.442	-21.734	-45.117	1.00104.12	MOL2	C
ATOM	5304	C	GLY	C	129	-18.409	-21.660	-44.017	1.00102.84	MOL2	C
ATOM	5305	O	GLY	C	129	-18.098	-20.564	-43.523	1.00 96.92	MOL2	O
ATOM	5306	N	ALA	C	130	-17.885	-22.827	-43.634	1.00102.40	MOL2	N
ATOM	5307	CA	ALA	C	130	-16.870	-22.927	-42.582	1.00 98.21	MOL2	C
ATOM	5308	CB	ALA	C	130	-17.524	-22.848	-41.193	1.00102.42	MOL2	C
ATOM	5309	C	ALA	C	130	-16.077	-24.222	-42.702	1.00 93.42	MOL2	C
ATOM	5310	O	ALA	C	130	-16.649	-25.302	-42.884	1.00 89.92	MOL2	O
ATOM	5311	N	SER	C	131	-14.756	-24.108	-42.607	1.00 89.44	MOL2	N
ATOM	5312	CA	SER	C	131	-13.896	-25.279	-42.684	1.00 84.50	MOL2	C
ATOM	5313	CB	SER	C	131	-13.157	-25.330	-44.023	1.00 88.74	MOL2	C
ATOM	5314	OG	SER	C	131	-14.002	-25.863	-45.031	1.00 96.57	MOL2	O
ATOM	5315	C	SER	C	131	-12.903	-25.319	-41.542	1.00 78.50	MOL2	C
ATOM	5316	O	SER	C	131	-12.319	-24.293	-41.170	1.00 74.59	MOL2	O
ATOM	5317	N	VAL	C	132	-12.745	-26.502	-40.955	1.00 74.38	MOL2	N
ATOM	5318	CA	VAL	C	132	-11.783	-26.644	-39.878	1.00 74.12	MOL2	C
ATOM	5319	CB	VAL	C	132	-12.332	-27.379	-38.674	1.00 76.94	MOL2	C
ATOM	5320	CG1	VAL	C	132	-11.266	-27.399	-37.588	1.00 73.30	MOL2	C
ATOM	5321	CG2	VAL	C	132	-13.578	-26.684	-38.170	1.00 80.37	MOL2	C
ATOM	5322	C	VAL	C	132	-10.586	-27.400	-40.411	1.00 72.25	MOL2	C
ATOM	5323	O	VAL	C	132	-10.688	-28.531	-40.890	1.00 66.86	MOL2	O
ATOM	5324	N	VAL	C	133	-9.441	-26.746	-40.331	1.00 72.51	MOL2	N
ATOM	5325	CA	VAL	C	133	-8.217	-27.310	-40.840	1.00 71.90	MOL2	C
ATOM	5326	CB	VAL	C	133	-7.479	-26.261	-41.712	1.00 70.60	MOL2	C
ATOM	5327	CG1	VAL	C	133	-6.087	-26.743	-42.083	1.00 64.45	MOL2	C
ATOM	5328	CG2	VAL	C	133	-8.301	-25.984	-42.958	1.00 64.26	MOL2	C
ATOM	5329	C	VAL	C	133	-7.318	-27.824	-39.726	1.00 75.65	MOL2	C
ATOM	5330	O	VAL	C	133	-7.151	-27.189	-38.675	1.00 71.43	MOL2	O
ATOM	5331	N	CYS	C	134	-6.751	-28.998	-39.984	1.00 78.14	MOL2	N
ATOM	5332	CA	CYS	C	134	-5.856	-29.671	-39.058	1.00 75.48	MOL2	C
ATOM	5333	C	CYS	C	134	-4.587	-30.106	-39.816	1.00 70.11	MOL2	C
ATOM	5334	O	CYS	C	134	-4.651	-30.847	-40.799	1.00 61.50	MOL2	O
ATOM	5335	CB	CYS	C	134	-6.592	-30.873	-38.461	1.00 79.82	MOL2	C
ATOM	5336	SG	CYS	C	134	-5.788	-31.675	-37.042	1.00 94.89	MOL2	S
ATOM	5337	N	PHE	C	135	-3.439	-29.612	-39.365	1.00 70.18	MOL2	N
ATOM	5338	CA	PHE	C	135	-2.160	-29.933	-39.986	1.00 69.90	MOL2	C
ATOM	5339	CB	PHE	C	135	-1.278	-28.679	-40.115	1.00 76.29	MOL2	C
ATOM	5340	CG	PHE	C	135	-1.846	-27.613	-41.011	1.00 82.52	MOL2	C
ATOM	5341	CD1	PHE	C	135	-1.694	-26.270	-40.685	1.00 81.78	MOL2	C
ATOM	5342	CD2	PHE	C	135	-2.512	-27.947	-42.185	1.00 83.39	MOL2	C
ATOM	5343	CE1	PHE	C	135	-2.194	-25.281	-41.509	1.00 85.51	MOL2	C
ATOM	5344	CE2	PHE	C	135	-3.014	-26.962	-43.016	1.00 86.16	MOL2	C
ATOM	5345	CZ	PHE	C	135	-2.855	-25.626	-42.677	1.00 90.03	MOL2	C
ATOM	5346	C	PHE	C	135	-1.415	-30.948	-39.139	1.00 66.86	MOL2	C
ATOM	5347	O	PHE	C	135	-1.311	-30.804	-37.919	1.00 64.94	MOL2	O
ATOM	5348	N	LEU	C	136	-0.906	-31.979	-39.798	1.00 64.71	MOL2	N
ATOM	5349	CA	LEU	C	136	-0.118	-33.015	-39.139	1.00 63.06	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5350	CB	LEU	C	136	-0.717	-34.401	-39.409	1.00	61.67	MOL2	C
ATOM	5351	CG	LEU	C	136	-2.218	-34.640	-39.217	1.00	55.96	MOL2	C
ATOM	5352	CD1	LEU	C	136	-2.673	-34.038	-37.926	1.00	51.18	MOL2	C
ATOM	5353	CD2	LEU	C	136	-2.974	-34.029	-40.358	1.00	61.97	MOL2	C
ATOM	5354	C	LEU	C	136	1.230	-32.879	-39.840	1.00	61.45	MOL2	C
ATOM	5355	O	LEU	C	136	1.433	-33.449	-40.913	1.00	65.67	MOL2	O
ATOM	5356	N	ASN	C	137	2.149	-32.126	-39.249	1.00	58.41	MOL2	N
ATOM	5357	CA	ASN	C	137	3.420	-31.896	-39.916	1.00	64.32	MOL2	C
ATOM	5358	CB	ASN	C	137	3.778	-30.404	-39.885	1.00	70.81	MOL2	C
ATOM	5359	CG	ASN	C	137	2.629	-29.516	-40.307	1.00	75.64	MOL2	C
ATOM	5360	OD1	ASN	C	137	2.040	-29.702	-41.373	1.00	79.28	MOL2	O
ATOM	5361	ND2	ASN	C	137	2.306	-28.536	-39.470	1.00	77.18	MOL2	N
ATOM	5362	C	ASN	C	137	4.632	-32.663	-39.451	1.00	64.01	MOL2	C
ATOM	5363	O	ASN	C	137	4.753	-33.048	-38.291	1.00	67.80	MOL2	O
ATOM	5364	N	ASN	C	138	5.531	-32.865	-40.402	1.00	64.58	MOL2	N
ATOM	5365	CA	ASN	C	138	6.800	-33.516	-40.160	1.00	68.57	MOL2	C
ATOM	5366	CB	ASN	C	138	7.705	-32.506	-39.472	1.00	66.72	MOL2	C
ATOM	5367	CG	ASN	C	138	7.733	-31.195	-40.202	1.00	69.15	MOL2	C
ATOM	5368	OD1	ASN	C	138	8.169	-31.129	-41.349	1.00	71.75	MOL2	O
ATOM	5369	ND2	ASN	C	138	7.248	-30.142	-39.556	1.00	77.70	MOL2	N
ATOM	5370	C	ASN	C	138	6.767	-34.817	-39.367	1.00	69.69	MOL2	C
ATOM	5371	O	ASN	C	138	7.131	-34.840	-38.185	1.00	74.89	MOL2	O
ATOM	5372	N	PHE	C	139	6.352	-35.901	-40.013	1.00	63.17	MOL2	N
ATOM	5373	CA	PHE	C	139	6.311	-37.180	-39.330	1.00	60.21	MOL2	C
ATOM	5374	CB	PHE	C	139	4.882	-37.496	-38.912	1.00	58.82	MOL2	C
ATOM	5375	CG	PHE	C	139	3.937	-37.691	-40.050	1.00	55.93	MOL2	C
ATOM	5376	CD1	PHE	C	139	3.626	-38.967	-40.498	1.00	55.11	MOL2	C
ATOM	5377	CD2	PHE	C	139	3.298	-36.607	-40.626	1.00	55.63	MOL2	C
ATOM	5378	CE1	PHE	C	139	2.681	-39.158	-41.498	1.00	56.66	MOL2	C
ATOM	5379	CE2	PHE	C	139	2.350	-36.794	-41.631	1.00	58.47	MOL2	C
ATOM	5380	CZ	PHE	C	139	2.041	-38.070	-42.064	1.00	52.74	MOL2	C
ATOM	5381	C	PHE	C	139	6.892	-38.298	-40.180	1.00	60.49	MOL2	C
ATOM	5382	O	PHE	C	139	7.191	-38.093	-41.352	1.00	65.37	MOL2	O
ATOM	5383	N	TYR	C	140	7.057	-39.476	-39.584	1.00	56.93	MOL2	N
ATOM	5384	CA	TYR	C	140	7.640	-40.617	-40.280	1.00	50.75	MOL2	C
ATOM	5385	CB	TYR	C	140	9.164	-40.461	-40.370	1.00	53.03	MOL2	C
ATOM	5386	CG	TYR	C	140	9.813	-41.442	-41.314	1.00	56.37	MOL2	C
ATOM	5387	CD1	TYR	C	140	9.818	-41.211	-42.676	1.00	59.38	MOL2	C
ATOM	5388	CE1	TYR	C	140	10.285	-42.155	-43.565	1.00	59.29	MOL2	C
ATOM	5389	CD2	TYR	C	140	10.313	-42.650	-40.861	1.00	59.76	MOL2	C
ATOM	5390	CE2	TYR	C	140	10.784	-43.603	-41.749	1.00	59.78	MOL2	C
ATOM	5391	CZ	TYR	C	140	10.757	-43.348	-43.101	1.00	56.94	MOL2	C
ATOM	5392	OH	TYR	C	140	11.148	-44.301	-44.004	1.00	60.05	MOL2	O
ATOM	5393	C	TYR	C	140	7.349	-41.865	-39.484	1.00	50.85	MOL2	C
ATOM	5394	O	TYR	C	140	7.496	-41.871	-38.262	1.00	54.51	MOL2	O
ATOM	5395	N	PRO	C	141	6.947	-42.948	-40.157	1.00	46.94	MOL2	N
ATOM	5396	CD	PRO	C	141	6.842	-44.281	-39.555	1.00	46.87	MOL2	C
ATOM	5397	CA	PRO	C	141	6.760	-43.037	-41.598	1.00	50.29	MOL2	C
ATOM	5398	CB	PRO	C	141	6.637	-44.532	-41.838	1.00	54.32	MOL2	C
ATOM	5399	CG	PRO	C	141	6.046	-45.016	-40.589	1.00	49.13	MOL2	C
ATOM	5400	C	PRO	C	141	5.537	-42.285	-42.067	1.00	57.77	MOL2	C
ATOM	5401	O	PRO	C	141	4.907	-41.569	-41.284	1.00	58.00	MOL2	O
ATOM	5402	N	LYS	C	142	5.207	-42.469	-43.345	1.00	61.24	MOL2	N
ATOM	5403	CA	LYS	C	142	4.086	-41.794	-43.973	1.00	61.92	MOL2	C
ATOM	5404	CB	LYS	C	142	4.259	-41.804	-45.488	1.00	68.52	MOL2	C
ATOM	5405	CG	LYS	C	142	4.625	-43.160	-46.075	1.00	86.64	MOL2	C
ATOM	5406	CD	LYS	C	142	4.708	-43.117	-47.608	1.00	91.64	MOL2	C
ATOM	5407	CE	LYS	C	142	5.222	-44.440	-48.198	1.00	98.10	MOL2	C
ATOM	5408	NZ	LYS	C	142	4.341	-45.622	-47.914	1.00	102.50	MOL2	N
ATOM	5409	C	LYS	C	142	2.718	-42.331	-43.623	1.00	60.19	MOL2	C
ATOM	5410	O	LYS	C	142	1.750	-41.586	-43.648	1.00	65.75	MOL2	O
ATOM	5411	N	ASP	C	143	2.614	-43.612	-43.302	1.00	60.86	MOL2	N
ATOM	5412	CA	ASP	C	143	1.302	-44.156	-42.968	1.00	66.49	MOL2	C
ATOM	5413	CB	ASP	C	143	1.365	-45.675	-42.862	1.00	80.74	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5414	CG	ASP	C	143	1.948	-46.312	-44.118	1.00	98.49	MOL2	C
ATOM	5415	OD1	ASP	C	143	1.239	-46.356	-45.150	1.00	102.89	MOL2	O
ATOM	5416	OD2	ASP	C	143	3.125	-46.752	-44.080	1.00	107.17	MOL2	O
ATOM	5417	C	ASP	C	143	0.824	-43.535	-41.674	1.00	64.02	MOL2	C
ATOM	5418	O	ASP	C	143	1.454	-43.666	-40.626	1.00	70.52	MOL2	O
ATOM	5419	N	ILE	C	144	-0.281	-42.810	-41.767	1.00	62.33	MOL2	N
ATOM	5420	CA	ILE	C	144	-0.862	-42.140	-40.607	1.00	61.79	MOL2	C
ATOM	5421	CB	ILE	C	144	-0.432	-40.688	-40.487	1.00	52.91	MOL2	C
ATOM	5422	CG2	ILE	C	144	-1.199	-39.859	-41.480	1.00	41.58	MOL2	C
ATOM	5423	CG1	ILE	C	144	-0.771	-40.168	-39.093	1.00	48.15	MOL2	C
ATOM	5424	CD1	ILE	C	144	-0.151	-38.833	-38.788	1.00	47.62	MOL2	C
ATOM	5425	C	ILE	C	144	-2.356	-42.117	-40.798	1.00	65.02	MOL2	C
ATOM	5426	O	ILE	C	144	-2.839	-42.255	-41.918	1.00	64.19	MOL2	O
ATOM	5427	N	ASN	C	145	-3.093	-41.926	-39.714	1.00	68.11	MOL2	N
ATOM	5428	CA	ASN	C	145	-4.532	-41.906	-39.837	1.00	76.59	MOL2	C
ATOM	5429	CB	ASN	C	145	-5.093	-43.281	-39.473	1.00	86.33	MOL2	C
ATOM	5430	CG	ASN	C	145	-6.573	-43.397	-39.768	1.00	100.33	MOL2	C
ATOM	5431	OD1	ASN	C	145	-7.015	-43.141	-40.894	1.00	108.69	MOL2	O
ATOM	5432	ND2	ASN	C	145	-7.353	-43.782	-38.757	1.00	104.92	MOL2	N
ATOM	5433	C	ASN	C	145	-5.179	-40.806	-38.999	1.00	79.08	MOL2	C
ATOM	5434	O	ASN	C	145	-4.922	-40.676	-37.794	1.00	81.54	MOL2	O
ATOM	5435	N	VAL	C	146	-6.023	-40.013	-39.657	1.00	78.50	MOL2	N
ATOM	5436	CA	VAL	C	146	-6.703	-38.898	-39.012	1.00	77.82	MOL2	C
ATOM	5437	CB	VAL	C	146	-6.609	-37.632	-39.884	1.00	75.85	MOL2	C
ATOM	5438	CG1	VAL	C	146	-7.477	-37.790	-41.121	1.00	77.98	MOL2	C
ATOM	5439	CG2	VAL	C	146	-7.012	-36.422	-39.085	1.00	76.44	MOL2	C
ATOM	5440	C	VAL	C	146	-8.170	-39.222	-38.757	1.00	79.53	MOL2	C
ATOM	5441	O	VAL	C	146	-8.844	-39.818	-39.601	1.00	79.89	MOL2	O
ATOM	5442	N	LYS	C	147	-8.651	-38.821	-37.583	1.00	83.36	MOL2	N
ATOM	5443	CA	LYS	C	147	-10.031	-39.056	-37.166	1.00	84.28	MOL2	C
ATOM	5444	CB	LYS	C	147	-10.034	-40.026	-35.978	1.00	90.58	MOL2	C
ATOM	5445	CG	LYS	C	147	-11.297	-40.862	-35.799	1.00	100.75	MOL2	C
ATOM	5446	CD	LYS	C	147	-11.402	-41.970	-36.854	1.00	106.03	MOL2	C
ATOM	5447	CE	LYS	C	147	-12.371	-43.079	-36.418	1.00	106.05	MOL2	C
ATOM	5448	NZ	LYS	C	147	-11.915	-43.811	-35.193	1.00	99.23	MOL2	N
ATOM	5449	C	LYS	C	147	-10.648	-37.718	-36.730	1.00	83.61	MOL2	C
ATOM	5450	O	LYS	C	147	-10.072	-37.000	-35.896	1.00	79.83	MOL2	O
ATOM	5451	N	TRP	C	148	-11.806	-37.385	-37.299	1.00	82.15	MOL2	N
ATOM	5452	CA	TRP	C	148	-12.518	-36.148	-36.961	1.00	82.38	MOL2	C
ATOM	5453	CB	TRP	C	148	-13.112	-35.510	-38.223	1.00	79.87	MOL2	C
ATOM	5454	CG	TRP	C	148	-12.131	-34.739	-39.039	1.00	78.56	MOL2	C
ATOM	5455	CD2	TRP	C	148	-11.536	-33.488	-38.691	1.00	74.63	MOL2	C
ATOM	5456	CE2	TRP	C	148	-10.660	-33.138	-39.733	1.00	75.12	MOL2	C
ATOM	5457	CE3	TRP	C	148	-11.660	-32.629	-37.597	1.00	75.81	MOL2	C
ATOM	5458	CD1	TRP	C	148	-11.607	-35.090	-40.252	1.00	75.00	MOL2	C
ATOM	5459	NE1	TRP	C	148	-10.722	-34.132	-40.675	1.00	71.58	MOL2	N
ATOM	5460	CZ2	TRP	C	148	-9.910	-31.965	-39.711	1.00	78.98	MOL2	C
ATOM	5461	CZ3	TRP	C	148	-10.918	-31.469	-37.576	1.00	77.16	MOL2	C
ATOM	5462	CH2	TRP	C	148	-10.052	-31.146	-38.626	1.00	80.07	MOL2	C
ATOM	5463	C	TRP	C	148	-13.662	-36.422	-35.978	1.00	86.86	MOL2	C
ATOM	5464	O	TRP	C	148	-14.372	-37.429	-36.105	1.00	86.90	MOL2	O
ATOM	5465	N	LYS	C	149	-13.851	-35.532	-35.005	1.00	88.93	MOL2	N
ATOM	5466	CA	LYS	C	149	-14.933	-35.708	-34.040	1.00	89.42	MOL2	C
ATOM	5467	CB	LYS	C	149	-14.421	-36.397	-32.765	1.00	91.44	MOL2	C
ATOM	5468	CG	LYS	C	149	-14.301	-37.924	-32.862	1.00	92.37	MOL2	C
ATOM	5469	CD	LYS	C	149	-13.833	-38.516	-31.527	1.00	97.01	MOL2	C
ATOM	5470	CE	LYS	C	149	-13.685	-40.035	-31.572	1.00	94.56	MOL2	C
ATOM	5471	NZ	LYS	C	149	-13.188	-40.560	-30.266	1.00	92.95	MOL2	N
ATOM	5472	C	LYS	C	149	-15.657	-34.408	-33.676	1.00	91.10	MOL2	C
ATOM	5473	O	LYS	C	149	-15.070	-33.467	-33.120	1.00	88.06	MOL2	O
ATOM	5474	N	ILE	C	150	-16.944	-34.378	-34.018	1.00	93.01	MOL2	N
ATOM	5475	CA	ILE	C	150	-17.832	-33.246	-33.742	1.00	92.66	MOL2	C
ATOM	5476	CB	ILE	C	150	-18.829	-33.022	-34.928	1.00	88.95	MOL2	C
ATOM	5477	CG2	ILE	C	150	-18.145	-32.293	-36.070	1.00	82.58	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5478	CG1	ILE	C	150	-19.378	-34.372	-35.410	1.00	85.89	MOL2	C
ATOM	5479	CD1	ILE	C	150	-20.283	-34.287	-36.620	1.00	82.92	MOL2	C
ATOM	5480	C	ILE	C	150	-18.627	-33.578	-32.471	1.00	93.45	MOL2	C
ATOM	5481	O	ILE	C	150	-19.451	-34.498	-32.470	1.00	92.06	MOL2	O
ATOM	5482	N	ASP	C	151	-18.378	-32.836	-31.395	1.00	95.21	MOL2	N
ATOM	5483	CA	ASP	C	151	-19.063	-33.075	-30.128	1.00	103.28	MOL2	C
ATOM	5484	CB	ASP	C	151	-20.524	-32.594	-30.198	1.00	115.41	MOL2	C
ATOM	5485	CG	ASP	C	151	-20.695	-31.151	-29.712	1.00	123.70	MOL2	C
ATOM	5486	OD1	ASP	C	151	-20.264	-30.842	-28.575	1.00	125.67	MOL2	O
ATOM	5487	OD2	ASP	C	151	-21.266	-30.331	-30.463	1.00	127.57	MOL2	O
ATOM	5488	C	ASP	C	151	-19.004	-34.541	-29.673	1.00	102.98	MOL2	C
ATOM	5489	O	ASP	C	151	-19.953	-35.064	-29.070	1.00	103.40	MOL2	O
ATOM	5490	N	GLY	C	152	-17.886	-35.203	-29.968	1.00	99.06	MOL2	N
ATOM	5491	CA	GLY	C	152	-17.721	-36.583	-29.544	1.00	96.11	MOL2	C
ATOM	5492	C	GLY	C	152	-17.970	-37.689	-30.553	1.00	94.54	MOL2	C
ATOM	5493	O	GLY	C	152	-17.555	-38.829	-30.333	1.00	95.10	MOL2	O
ATOM	5494	N	SER	C	153	-18.648	-37.382	-31.651	1.00	93.68	MOL2	N
ATOM	5495	CA	SER	C	153	-18.911	-38.406	-32.651	1.00	97.25	MOL2	C
ATOM	5496	CB	SER	C	153	-20.401	-38.398	-33.043	1.00	102.40	MOL2	C
ATOM	5497	OG	SER	C	153	-20.879	-37.091	-33.319	1.00	104.42	MOL2	O
ATOM	5498	C	SER	C	153	-18.011	-38.290	-33.891	1.00	98.07	MOL2	C
ATOM	5499	O	SER	C	153	-17.672	-37.193	-34.351	1.00	94.93	MOL2	O
ATOM	5500	N	GLU	C	154	-17.621	-39.448	-34.412	1.00	99.80	MOL2	N
ATOM	5501	CA	GLU	C	154	-16.760	-39.555	-35.586	1.00	101.67	MOL2	C
ATOM	5502	CB	GLU	C	154	-16.365	-41.028	-35.789	1.00	112.22	MOL2	C
ATOM	5503	CG	GLU	C	154	-17.573	-41.987	-35.942	1.00	122.85	MOL2	C
ATOM	5504	CD	GLU	C	154	-17.182	-43.460	-36.123	1.00	128.93	MOL2	C
ATOM	5505	OE1	GLU	C	154	-18.094	-44.311	-36.263	1.00	128.05	MOL2	O
ATOM	5506	OE2	GLU	C	154	-15.969	-43.768	-36.125	1.00	132.10	MOL2	O
ATOM	5507	C	GLU	C	154	-17.422	-39.049	-36.867	1.00	100.46	MOL2	C
ATOM	5508	O	GLU	C	154	-18.530	-39.473	-37.212	1.00	95.86	MOL2	O
ATOM	5509	N	ARG	C	155	-16.752	-38.147	-37.576	1.00	101.89	MOL2	N
ATOM	5510	CA	ARG	C	155	-17.303	-37.664	-38.834	1.00	104.81	MOL2	C
ATOM	5511	CB	ARG	C	155	-17.558	-36.153	-38.794	1.00	115.43	MOL2	C
ATOM	5512	CG	ARG	C	155	-18.542	-35.687	-39.879	1.00	124.32	MOL2	C
ATOM	5513	CD	ARG	C	155	-19.678	-36.706	-40.048	1.00	130.47	MOL2	C
ATOM	5514	NE	ARG	C	155	-20.698	-36.285	-41.007	1.00	133.53	MOL2	N
ATOM	5515	CZ	ARG	C	155	-21.548	-37.114	-41.609	1.00	135.26	MOL2	C
ATOM	5516	NH1	ARG	C	155	-21.503	-38.421	-41.360	1.00	135.19	MOL2	N
ATOM	5517	NH2	ARG	C	155	-22.452	-36.636	-42.454	1.00	132.94	MOL2	N
ATOM	5518	C	ARG	C	155	-16.334	-38.018	-39.953	1.00	102.03	MOL2	C
ATOM	5519	O	ARG	C	155	-15.115	-37.886	-39.796	1.00	100.80	MOL2	O
ATOM	5520	N	GLN	C	156	-16.872	-38.496	-41.073	1.00	99.85	MOL2	N
ATOM	5521	CA	GLN	C	156	-16.021	-38.870	-42.194	1.00	102.60	MOL2	C
ATOM	5522	CB	GLN	C	156	-16.088	-40.395	-42.429	1.00	106.25	MOL2	C
ATOM	5523	CG	GLN	C	156	-17.039	-40.858	-43.537	1.00	113.94	MOL2	C
ATOM	5524	CD	GLN	C	156	-16.388	-40.889	-44.922	1.00	117.43	MOL2	C
ATOM	5525	OE1	GLN	C	156	-17.072	-41.043	-45.941	1.00	117.35	MOL2	O
ATOM	5526	NE2	GLN	C	156	-15.063	-40.756	-44.960	1.00	120.20	MOL2	N
ATOM	5527	C	GLN	C	156	-16.382	-38.098	-43.471	1.00	101.69	MOL2	C
ATOM	5528	O	GLN	C	156	-15.495	-37.649	-44.211	1.00	102.59	MOL2	O
ATOM	5529	N	ASN	C	157	-17.673	-37.919	-43.730	1.00	98.72	MOL2	N
ATOM	5530	CA	ASN	C	157	-18.057	-37.207	-44.936	1.00	98.32	MOL2	C
ATOM	5531	CB	ASN	C	157	-19.551	-37.377	-45.217	1.00	105.31	MOL2	C
ATOM	5532	CG	ASN	C	157	-19.926	-38.823	-45.526	1.00	113.27	MOL2	C
ATOM	5533	OD1	ASN	C	157	-19.856	-39.694	-44.655	1.00	119.33	MOL2	O
ATOM	5534	ND2	ASN	C	157	-20.320	-39.085	-46.771	1.00	116.14	MOL2	N
ATOM	5535	C	ASN	C	157	-17.679	-35.737	-44.852	1.00	96.79	MOL2	C
ATOM	5536	O	ASN	C	157	-17.705	-35.126	-43.775	1.00	93.05	MOL2	O
ATOM	5537	N	GLY	C	158	-17.300	-35.184	-46.001	1.00	95.37	MOL2	N
ATOM	5538	CA	GLY	C	158	-16.906	-33.789	-46.060	1.00	93.14	MOL2	C
ATOM	5539	C	GLY	C	158	-15.480	-33.578	-45.592	1.00	91.67	MOL2	C
ATOM	5540	O	GLY	C	158	-15.116	-32.478	-45.165	1.00	95.46	MOL2	O
ATOM	5541	N	VAL	C	159	-14.669	-34.629	-45.669	1.00	85.73	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	5542	CA	VAL	C	159	-13.281	-34.540	-45.245	1.00	82.29	MOL2	C
ATOM	5543	CB	VAL	C	159	-12.945	-35.652	-44.238	1.00	83.40	MOL2	C
ATOM	5544	CG1	VAL	C	159	-11.493	-35.546	-43.819	1.00	88.32	MOL2	C
ATOM	5545	CG2	VAL	C	159	-13.848	-35.545	-43.025	1.00	82.27	MOL2	C
ATOM	5546	C	VAL	C	159	-12.352	-34.678	-46.436	1.00	79.59	MOL2	C
ATOM	5547	O	VAL	C	159	-12.479	-35.624	-47.209	1.00	81.26	MOL2	O
ATOM	5548	N	LEU	C	160	-11.428	-33.734	-46.588	1.00	77.19	MOL2	N
ATOM	5549	CA	LEU	C	160	-10.471	-33.789	-47.688	1.00	78.45	MOL2	C
ATOM	5550	CB	LEU	C	160	-10.703	-32.652	-48.678	1.00	81.34	MOL2	C
ATOM	5551	CG	LEU	C	160	-11.919	-32.873	-49.574	1.00	85.85	MOL2	C
ATOM	5552	CD1	LEU	C	160	-11.724	-32.078	-50.861	1.00	88.04	MOL2	C
ATOM	5553	CD2	LEU	C	160	-12.084	-34.361	-49.888	1.00	80.45	MOL2	C
ATOM	5554	C	LEU	C	160	-9.037	-33.752	-47.190	1.00	79.38	MOL2	C
ATOM	5555	O	LEU	C	160	-8.625	-32.838	-46.459	1.00	79.90	MOL2	O
ATOM	5556	N	ASN	C	161	-8.266	-34.748	-47.606	1.00	75.54	MOL2	N
ATOM	5557	CA	ASN	C	161	-6.894	-34.827	-47.167	1.00	73.49	MOL2	C
ATOM	5558	CB	ASN	C	161	-6.724	-36.137	-46.418	1.00	77.61	MOL2	C
ATOM	5559	CG	ASN	C	161	-7.811	-36.337	-45.382	1.00	77.08	MOL2	C
ATOM	5560	OD1	ASN	C	161	-8.011	-35.489	-44.510	1.00	74.15	MOL2	O
ATOM	5561	ND2	ASN	C	161	-8.528	-37.452	-45.478	1.00	76.33	MOL2	N
ATOM	5562	C	ASN	C	161	-5.895	-34.680	-48.305	1.00	70.79	MOL2	C
ATOM	5563	O	ASN	C	161	-6.196	-34.991	-49.460	1.00	70.84	MOL2	O
ATOM	5564	N	SER	C	162	-4.714	-34.179	-47.960	1.00	66.45	MOL2	N
ATOM	5565	CA	SER	C	162	-3.646	-33.957	-48.917	1.00	69.71	MOL2	C
ATOM	5566	CB	SER	C	162	-3.715	-32.526	-49.440	1.00	74.54	MOL2	C
ATOM	5567	OG	SER	C	162	-2.530	-32.176	-50.132	1.00	82.17	MOL2	O
ATOM	5568	C	SER	C	162	-2.307	-34.175	-48.239	1.00	71.75	MOL2	C
ATOM	5569	O	SER	C	162	-2.013	-33.536	-47.228	1.00	75.21	MOL2	O
ATOM	5570	N	TRP	C	163	-1.489	-35.060	-48.801	1.00	70.73	MOL2	N
ATOM	5571	CA	TRP	C	163	-0.181	-35.358	-48.226	1.00	68.71	MOL2	C
ATOM	5572	CB	TRP	C	163	-0.054	-36.864	-48.056	1.00	74.55	MOL2	C
ATOM	5573	CG	TRP	C	163	-1.266	-37.475	-47.441	1.00	79.91	MOL2	C
ATOM	5574	CD2	TRP	C	163	-2.469	-37.843	-48.118	1.00	81.33	MOL2	C
ATOM	5575	CE2	TRP	C	163	-3.340	-38.391	-47.152	1.00	83.58	MOL2	C
ATOM	5576	CE3	TRP	C	163	-2.896	-37.765	-49.447	1.00	86.25	MOL2	C
ATOM	5577	CD1	TRP	C	163	-1.448	-37.799	-46.127	1.00	80.97	MOL2	C
ATOM	5578	NE1	TRP	C	163	-2.690	-38.353	-45.946	1.00	80.59	MOL2	N
ATOM	5579	CZ2	TRP	C	163	-4.615	-38.862	-47.472	1.00	87.30	MOL2	C
ATOM	5580	CZ3	TRP	C	163	-4.167	-38.236	-49.768	1.00	92.21	MOL2	C
ATOM	5581	CH2	TRP	C	163	-5.010	-38.777	-48.783	1.00	90.22	MOL2	C
ATOM	5582	C	TRP	C	163	0.951	-34.840	-49.107	1.00	61.85	MOL2	C
ATOM	5583	O	TRP	C	163	0.816	-34.778	-50.319	1.00	65.33	MOL2	O
ATOM	5584	N	THR	C	164	2.070	-34.470	-48.506	1.00	55.65	MOL2	N
ATOM	5585	CA	THR	C	164	3.194	-33.992	-49.292	1.00	56.35	MOL2	C
ATOM	5586	CB	THR	C	164	3.838	-32.807	-48.622	1.00	53.31	MOL2	C
ATOM	5587	OG1	THR	C	164	4.522	-33.230	-47.432	1.00	41.23	MOL2	O
ATOM	5588	CG2	THR	C	164	2.774	-31.816	-48.260	1.00	56.03	MOL2	C
ATOM	5589	C	THR	C	164	4.245	-35.088	-49.476	1.00	65.48	MOL2	C
ATOM	5590	O	THR	C	164	4.087	-36.206	-48.977	1.00	69.34	MOL2	O
ATOM	5591	N	ASP	C	165	5.319	-34.779	-50.193	1.00	69.90	MOL2	N
ATOM	5592	CA	ASP	C	165	6.356	-35.772	-50.406	1.00	74.84	MOL2	C
ATOM	5593	CB	ASP	C	165	6.834	-35.720	-51.848	1.00	89.04	MOL2	C
ATOM	5594	CG	ASP	C	165	5.751	-36.151	-52.825	1.00	103.78	MOL2	C
ATOM	5595	OD1	ASP	C	165	5.047	-37.148	-52.521	1.00	102.42	MOL2	O
ATOM	5596	OD2	ASP	C	165	5.609	-35.502	-53.892	1.00	113.76	MOL2	O
ATOM	5597	C	ASP	C	165	7.514	-35.596	-49.444	1.00	71.07	MOL2	C
ATOM	5598	O	ASP	C	165	7.635	-34.570	-48.790	1.00	69.30	MOL2	O
ATOM	5599	N	GLN	C	166	8.352	-36.617	-49.340	1.00	67.93	MOL2	N
ATOM	5600	CA	GLN	C	166	9.495	-36.563	-48.443	1.00	70.95	MOL2	C
ATOM	5601	CB	GLN	C	166	10.494	-37.653	-48.845	1.00	75.14	MOL2	C
ATOM	5602	CG	GLN	C	166	11.259	-38.271	-47.694	1.00	69.86	MOL2	C
ATOM	5603	CD	GLN	C	166	11.247	-39.774	-47.778	1.00	73.46	MOL2	C
ATOM	5604	OE1	GLN	C	166	10.985	-40.451	-46.791	1.00	74.44	MOL2	O
ATOM	5605	NE2	GLN	C	166	11.523	-40.311	-48.966	1.00	71.21	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	5606	C	GLN	C	166	10.177	-35.183	-48.472	1.00	69.79	MOL2	C
ATOM	5607	O	GLN	C	166	10.872	-34.842	-49.426	1.00	73.54	MOL2	O
ATOM	5608	N	ASP	C	167	9.980	-34.395	-47.423	1.00	65.97	MOL2	N
ATOM	5609	CA	ASP	C	167	10.571	-33.069	-47.341	1.00	70.13	MOL2	C
ATOM	5610	CB	ASP	C	167	10.181	-32.413	-46.005	1.00	77.64	MOL2	C
ATOM	5611	CG	ASP	C	167	10.426	-30.896	-45.981	1.00	83.32	MOL2	C
ATOM	5612	OD1	ASP	C	167	9.714	-30.161	-46.709	1.00	84.29	MOL2	O
ATOM	5613	OD2	ASP	C	167	11.324	-30.442	-45.228	1.00	76.26	MOL2	O
ATOM	5614	C	ASP	C	167	12.088	-33.127	-47.465	1.00	72.07	MOL2	C
ATOM	5615	O	ASP	C	167	12.775	-33.505	-46.527	1.00	70.94	MOL2	O
ATOM	5616	N	SER	C	168	12.592	-32.741	-48.631	1.00	79.29	MOL2	N
ATOM	5617	CA	SER	C	168	14.025	-32.704	-48.936	1.00	88.10	MOL2	C
ATOM	5618	CB	SER	C	168	14.262	-31.612	-49.976	1.00	93.34	MOL2	C
ATOM	5619	OG	SER	C	168	13.535	-30.441	-49.622	1.00	98.24	MOL2	O
ATOM	5620	C	SER	C	168	14.979	-32.486	-47.749	1.00	89.30	MOL2	C
ATOM	5621	O	SER	C	168	16.055	-33.097	-47.683	1.00	91.01	MOL2	O
ATOM	5622	N	LYS	C	169	14.587	-31.611	-46.825	1.00	88.09	MOL2	N
ATOM	5623	CA	LYS	C	169	15.400	-31.303	-45.649	1.00	92.44	MOL2	C
ATOM	5624	CB	LYS	C	169	14.773	-30.140	-44.879	1.00	100.12	MOL2	C
ATOM	5625	CG	LYS	C	169	14.461	-28.908	-45.715	1.00	116.06	MOL2	C
ATOM	5626	CD	LYS	C	169	13.644	-27.890	-44.907	1.00	126.27	MOL2	C
ATOM	5627	CE	LYS	C	169	13.220	-26.682	-45.747	1.00	128.00	MOL2	C
ATOM	5628	NZ	LYS	C	169	12.237	-25.821	-45.023	1.00	129.09	MOL2	N
ATOM	5629	C	LYS	C	169	15.571	-32.482	-44.677	1.00	90.77	MOL2	C
ATOM	5630	O	LYS	C	169	16.654	-33.078	-44.572	1.00	93.81	MOL2	O
ATOM	5631	N	ASP	C	170	14.484	-32.803	-43.977	1.00	82.39	MOL2	N
ATOM	5632	CA	ASP	C	170	14.441	-33.866	-42.969	1.00	71.05	MOL2	C
ATOM	5633	CB	ASP	C	170	13.663	-33.344	-41.763	1.00	69.29	MOL2	C
ATOM	5634	CG	ASP	C	170	12.240	-32.947	-42.127	1.00	68.19	MOL2	C
ATOM	5635	OD1	ASP	C	170	11.489	-32.485	-41.239	1.00	60.97	MOL2	O
ATOM	5636	OD2	ASP	C	170	11.873	-33.106	-43.313	1.00	63.76	MOL2	O
ATOM	5637	C	ASP	C	170	13.815	-35.200	-43.429	1.00	65.02	MOL2	C
ATOM	5638	O	ASP	C	170	13.528	-36.080	-42.619	1.00	60.81	MOL2	O
ATOM	5639	N	SER	C	171	13.578	-35.333	-44.722	1.00	59.46	MOL2	N
ATOM	5640	CA	SER	C	171	13.022	-36.553	-45.270	1.00	54.15	MOL2	C
ATOM	5641	CB	SER	C	171	14.138	-37.597	-45.292	1.00	51.78	MOL2	C
ATOM	5642	OG	SER	C	171	15.347	-36.995	-45.758	1.00	42.36	MOL2	O
ATOM	5643	C	SER	C	171	11.754	-37.064	-44.563	1.00	51.92	MOL2	C
ATOM	5644	O	SER	C	171	11.426	-38.243	-44.642	1.00	54.05	MOL2	O
ATOM	5645	N	THR	C	172	11.031	-36.157	-43.901	1.00	51.32	MOL2	N
ATOM	5646	CA	THR	C	172	9.772	-36.480	-43.197	1.00	54.67	MOL2	C
ATOM	5647	CB	THR	C	172	9.515	-35.542	-42.014	1.00	59.05	MOL2	C
ATOM	5648	OG1	THR	C	172	9.148	-34.247	-42.520	1.00	59.61	MOL2	O
ATOM	5649	CG2	THR	C	172	10.749	-35.422	-41.132	1.00	62.03	MOL2	C
ATOM	5650	C	THR	C	172	8.553	-36.284	-44.103	1.00	52.87	MOL2	C
ATOM	5651	O	THR	C	172	8.685	-35.951	-45.270	1.00	63.57	MOL2	O
ATOM	5652	N	TYR	C	173	7.358	-36.465	-43.557	1.00	48.76	MOL2	N
ATOM	5653	CA	TYR	C	173	6.135	-36.276	-44.331	1.00	49.61	MOL2	C
ATOM	5654	CB	TYR	C	173	5.379	-37.598	-44.470	1.00	47.69	MOL2	C
ATOM	5655	CG	TYR	C	173	6.084	-38.569	-45.370	1.00	58.69	MOL2	C
ATOM	5656	CD1	TYR	C	173	7.430	-38.840	-45.194	1.00	65.87	MOL2	C
ATOM	5657	CE1	TYR	C	173	8.131	-39.643	-46.075	1.00	67.64	MOL2	C
ATOM	5658	CD2	TYR	C	173	5.444	-39.145	-46.450	1.00	64.37	MOL2	C
ATOM	5659	CE2	TYR	C	173	6.140	-39.959	-47.341	1.00	69.47	MOL2	C
ATOM	5660	CZ	TYR	C	173	7.488	-40.194	-47.145	1.00	67.62	MOL2	C
ATOM	5661	OH	TYR	C	173	8.222	-40.938	-48.034	1.00	72.08	MOL2	O
ATOM	5662	C	TYR	C	173	5.251	-35.249	-43.636	1.00	54.70	MOL2	C
ATOM	5663	O	TYR	C	173	5.546	-34.820	-42.520	1.00	58.65	MOL2	O
ATOM	5664	N	SER	C	174	4.175	-34.841	-44.301	1.00	55.44	MOL2	N
ATOM	5665	CA	SER	C	174	3.233	-33.882	-43.725	1.00	51.27	MOL2	C
ATOM	5666	CB	SER	C	174	3.734	-32.449	-43.893	1.00	51.27	MOL2	C
ATOM	5667	OG	SER	C	174	4.931	-32.233	-43.160	1.00	52.62	MOL2	O
ATOM	5668	C	SER	C	174	1.885	-34.051	-44.395	1.00	50.66	MOL2	C
ATOM	5669	O	SER	C	174	1.804	-34.427	-45.569	1.00	49.82	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	5670	N	MET	C	175	0.825	-33.791	-43.643	1.00	53.28	MOL2	N
ATOM	5671	CA	MET	C	175	-0.531	-33.941	-44.169	1.00	61.42	MOL2	C
ATOM	5672	CB	MET	C	175	-1.126	-35.277	-43.738	1.00	56.48	MOL2	C
ATOM	5673	CG	MET	C	175	-2.586	-35.392	-44.081	1.00	50.77	MOL2	C
ATOM	5674	SD	MET	C	175	-3.360	-36.575	-43.020	1.00	66.93	MOL2	S
ATOM	5675	CE	MET	C	175	-4.501	-37.411	-44.143	1.00	53.52	MOL2	C
ATOM	5676	C	MET	C	175	-1.470	-32.833	-43.708	1.00	64.71	MOL2	C
ATOM	5677	O	MET	C	175	-1.327	-32.312	-42.599	1.00	69.75	MOL2	O
ATOM	5678	N	SER	C	176	-2.442	-32.491	-44.549	1.00	62.56	MOL2	N
ATOM	5679	CA	SER	C	176	-3.388	-31.440	-44.203	1.00	68.23	MOL2	C
ATOM	5680	CB	SER	C	176	-3.102	-30.187	-45.050	1.00	72.17	MOL2	C
ATOM	5681	OG	SER	C	176	-3.896	-29.081	-44.649	1.00	75.40	MOL2	O
ATOM	5682	C	SER	C	176	-4.847	-31.879	-44.375	1.00	70.83	MOL2	C
ATOM	5683	O	SER	C	176	-5.383	-31.908	-45.492	1.00	72.93	MOL2	O
ATOM	5684	N	SER	C	177	-5.490	-32.223	-43.262	1.00	71.42	MOL2	N
ATOM	5685	CA	SER	C	177	-6.890	-32.635	-43.312	1.00	70.80	MOL2	C
ATOM	5686	CB	SER	C	177	-7.183	-33.735	-42.296	1.00	66.64	MOL2	C
ATOM	5687	OG	SER	C	177	-8.517	-34.185	-42.443	1.00	57.08	MOL2	O
ATOM	5688	C	SER	C	177	-7.799	-31.438	-43.037	1.00	73.96	MOL2	C
ATOM	5689	O	SER	C	177	-7.594	-30.681	-42.081	1.00	70.44	MOL2	O
ATOM	5690	N	THR	C	178	-8.805	-31.267	-43.888	1.00	79.89	MOL2	N
ATOM	5691	CA	THR	C	178	-9.736	-30.153	-43.736	1.00	83.31	MOL2	C
ATOM	5692	CB	THR	C	178	-9.576	-29.107	-44.884	1.00	89.72	MOL2	C
ATOM	5693	OG1	THR	C	178	-8.203	-28.704	-44.989	1.00	98.13	MOL2	O
ATOM	5694	CG2	THR	C	178	-10.426	-27.878	-44.606	1.00	86.77	MOL2	C
ATOM	5695	C	THR	C	178	-11.193	-30.620	-43.694	1.00	81.67	MOL2	C
ATOM	5696	O	THR	C	178	-11.696	-31.244	-44.642	1.00	75.38	MOL2	O
ATOM	5697	N	LEU	C	179	-11.861	-30.327	-42.578	1.00	82.75	MOL2	N
ATOM	5698	CA	LEU	C	179	-13.267	-30.688	-42.426	1.00	83.11	MOL2	C
ATOM	5699	CB	LEU	C	179	-13.638	-30.983	-40.974	1.00	79.30	MOL2	C
ATOM	5700	CG	LEU	C	179	-14.785	-32.000	-40.909	1.00	73.97	MOL2	C
ATOM	5701	CD1	LEU	C	179	-15.327	-32.017	-39.512	1.00	73.79	MOL2	C
ATOM	5702	CD2	LEU	C	179	-15.884	-31.665	-41.912	1.00	61.79	MOL2	C
ATOM	5703	C	LEU	C	179	-14.095	-29.511	-42.904	1.00	84.35	MOL2	C
ATOM	5704	O	LEU	C	179	-14.118	-28.453	-42.267	1.00	81.74	MOL2	O
ATOM	5705	N	THR	C	180	-14.773	-29.707	-44.028	1.00	83.44	MOL2	N
ATOM	5706	CA	THR	C	180	-15.598	-28.673	-44.613	1.00	85.77	MOL2	C
ATOM	5707	CB	THR	C	180	-15.359	-28.592	-46.158	1.00	88.62	MOL2	C
ATOM	5708	OG1	THR	C	180	-16.342	-27.747	-46.763	1.00	86.12	MOL2	O
ATOM	5709	CG2	THR	C	180	-15.426	-29.975	-46.799	1.00	92.07	MOL2	C
ATOM	5710	C	THR	C	180	-17.069	-28.931	-44.315	1.00	89.54	MOL2	C
ATOM	5711	O	THR	C	180	-17.636	-29.952	-44.713	1.00	87.13	MOL2	O
ATOM	5712	N	LEU	C	181	-17.675	-28.001	-43.586	1.00	95.28	MOL2	N
ATOM	5713	CA	LEU	C	181	-19.087	-28.100	-43.247	1.00	100.55	MOL2	C
ATOM	5714	CB	LEU	C	181	-19.253	-28.373	-41.744	1.00	101.03	MOL2	C
ATOM	5715	CG	LEU	C	181	-18.023	-28.175	-40.848	1.00	101.25	MOL2	C
ATOM	5716	CD1	LEU	C	181	-17.724	-26.683	-40.687	1.00	98.19	MOL2	C
ATOM	5717	CD2	LEU	C	181	-18.277	-28.825	-39.491	1.00	97.16	MOL2	C
ATOM	5718	C	LEU	C	181	-19.816	-26.819	-43.671	1.00	104.10	MOL2	C
ATOM	5719	O	LEU	C	181	-19.203	-25.888	-44.214	1.00	102.19	MOL2	O
ATOM	5720	N	THR	C	182	-21.129	-26.786	-43.463	1.00	108.71	MOL2	N
ATOM	5721	CA	THR	C	182	-21.913	-25.604	-43.813	1.00	111.41	MOL2	C
ATOM	5722	CB	THR	C	182	-23.308	-25.961	-44.372	1.00	113.22	MOL2	C
ATOM	5723	OG1	THR	C	182	-24.150	-26.433	-43.309	1.00	114.49	MOL2	O
ATOM	5724	CG2	THR	C	182	-23.183	-27.028	-45.453	1.00	111.82	MOL2	C
ATOM	5725	C	THR	C	182	-22.103	-24.784	-42.546	1.00	112.00	MOL2	C
ATOM	5726	O	THR	C	182	-22.343	-25.336	-41.471	1.00	111.30	MOL2	O
ATOM	5727	N	LYS	C	183	-21.985	-23.469	-42.672	1.00	113.84	MOL2	N
ATOM	5728	CA	LYS	C	183	-22.141	-22.578	-41.528	1.00	116.17	MOL2	C
ATOM	5729	CB	LYS	C	183	-22.474	-21.164	-42.017	1.00	122.32	MOL2	C
ATOM	5730	CG	LYS	C	183	-22.940	-20.217	-40.928	1.00	127.78	MOL2	C
ATOM	5731	CD	LYS	C	183	-22.291	-18.853	-41.076	1.00	133.45	MOL2	C
ATOM	5732	CE	LYS	C	183	-20.832	-18.885	-40.633	1.00	134.43	MOL2	C
ATOM	5733	NZ	LYS	C	183	-19.983	-19.798	-41.448	1.00	135.94	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	5734	C	LYS	C	183	-23.223	-23.058	-40.560	1.00114.83	MOL2	C
ATOM	5735	O	LYS	C	183	-23.110	-22.879	-39.343	1.00114.09	MOL2	O
ATOM	5736	N	ASP	C	184	-24.266	-23.673	-41.110	1.00112.78	MOL2	N
ATOM	5737	CA	ASP	C	184	-25.374	-24.171	-40.302	1.00111.31	MOL2	C
ATOM	5738	CB	ASP	C	184	-26.502	-24.691	-41.212	1.00122.40	MOL2	C
ATOM	5739	CG	ASP	C	184	-26.976	-23.645	-42.228	1.00129.47	MOL2	C
ATOM	5740	OD1	ASP	C	184	-27.293	-22.503	-41.819	1.00130.84	MOL2	O
ATOM	5741	OD2	ASP	C	184	-27.038	-23.972	-43.437	1.00131.20	MOL2	O
ATOM	5742	C	ASP	C	184	-24.913	-25.278	-39.357	1.00105.04	MOL2	C
ATOM	5743	O	ASP	C	184	-24.942	-25.108	-38.133	1.00 99.16	MOL2	O
ATOM	5744	N	GLU	C	185	-24.494	-26.402	-39.942	1.00100.32	MOL2	N
ATOM	5745	CA	GLU	C	185	-24.010	-27.568	-39.197	1.00 97.52	MOL2	C
ATOM	5746	CB	GLU	C	185	-23.495	-28.630	-40.172	1.00103.77	MOL2	C
ATOM	5747	CG	GLU	C	185	-24.525	-29.640	-40.672	1.00114.29	MOL2	C
ATOM	5748	CD	GLU	C	185	-24.581	-30.906	-39.817	1.00120.06	MOL2	C
ATOM	5749	OE1	GLU	C	185	-25.092	-31.938	-40.314	1.00119.67	MOL2	O
ATOM	5750	OE2	GLU	C	185	-24.122	-30.871	-38.651	1.00121.57	MOL2	O
ATOM	5751	C	GLU	C	185	-22.890	-27.214	-38.215	1.00 93.65	MOL2	C
ATOM	5752	O	GLU	C	185	-22.768	-27.818	-37.143	1.00 89.39	MOL2	O
ATOM	5753	N	TYR	C	186	-22.061	-26.243	-38.585	1.00 91.15	MOL2	N
ATOM	5754	CA	TYR	C	186	-20.969	-25.846	-37.712	1.00 90.99	MOL2	C
ATOM	5755	CB	TYR	C	186	-20.048	-24.823	-38.383	1.00 93.51	MOL2	C
ATOM	5756	CG	TYR	C	186	-19.012	-24.246	-37.436	1.00 93.52	MOL2	C
ATOM	5757	CD1	TYR	C	186	-19.361	-23.297	-36.486	1.00 97.80	MOL2	C
ATOM	5758	CE1	TYR	C	186	-18.435	-22.797	-35.590	1.00 98.27	MOL2	C
ATOM	5759	CD2	TYR	C	186	-17.698	-24.677	-37.463	1.00 94.43	MOL2	C
ATOM	5760	CE2	TYR	C	186	-16.765	-24.179	-36.568	1.00 96.25	MOL2	C
ATOM	5761	CZ	TYR	C	186	-17.142	-23.240	-35.637	1.00 94.84	MOL2	C
ATOM	5762	OH	TYR	C	186	-16.227	-22.728	-34.755	1.00 96.28	MOL2	O
ATOM	5763	C	TYR	C	186	-21.510	-25.261	-36.424	1.00 93.77	MOL2	C
ATOM	5764	O	TYR	C	186	-20.935	-25.479	-35.358	1.00 96.72	MOL2	O
ATOM	5765	N	GLU	C	187	-22.612	-24.518	-36.525	1.00 95.78	MOL2	N
ATOM	5766	CA	GLU	C	187	-23.236	-23.877	-35.364	1.00 97.26	MOL2	C
ATOM	5767	CB	GLU	C	187	-24.255	-22.825	-35.831	1.00104.73	MOL2	C
ATOM	5768	CG	GLU	C	187	-23.687	-21.655	-36.637	1.00111.79	MOL2	C
ATOM	5769	CD	GLU	C	187	-22.778	-20.739	-35.820	1.00118.04	MOL2	C
ATOM	5770	OE1	GLU	C	187	-22.470	-19.630	-36.312	1.00117.06	MOL2	O
ATOM	5771	OE2	GLU	C	187	-22.365	-21.120	-34.699	1.00121.68	MOL2	O
ATOM	5772	C	GLU	C	187	-23.935	-24.864	-34.424	1.00 95.32	MOL2	C
ATOM	5773	O	GLU	C	187	-23.872	-24.713	-33.198	1.00 85.41	MOL2	O
ATOM	5774	N	ARG	C	188	-24.597	-25.864	-35.016	1.00 97.41	MOL2	N
ATOM	5775	CA	ARG	C	188	-25.340	-26.887	-34.277	1.00 98.56	MOL2	C
ATOM	5776	CB	ARG	C	188	-25.955	-27.891	-35.255	1.00 97.07	MOL2	C
ATOM	5777	CG	ARG	C	188	-26.790	-27.227	-36.328	1.00104.21	MOL2	C
ATOM	5778	CD	ARG	C	188	-27.252	-28.208	-37.392	1.00112.70	MOL2	C
ATOM	5779	NE	ARG	C	188	-27.661	-27.498	-38.604	1.00122.18	MOL2	N
ATOM	5780	CZ	ARG	C	188	-27.990	-28.087	-39.751	1.00124.20	MOL2	C
ATOM	5781	NH1	ARG	C	188	-27.962	-29.409	-39.848	1.00126.54	MOL2	N
ATOM	5782	NH2	ARG	C	188	-28.329	-27.352	-40.807	1.00121.65	MOL2	N
ATOM	5783	C	ARG	C	188	-24.512	-27.634	-33.229	1.00100.68	MOL2	C
ATOM	5784	O	ARG	C	188	-25.077	-28.256	-32.324	1.00101.42	MOL2	O
ATOM	5785	N	HIS	C	189	-23.185	-27.571	-33.343	1.00100.30	MOL2	N
ATOM	5786	CA	HIS	C	189	-22.310	-28.256	-32.390	1.00 97.49	MOL2	C
ATOM	5787	CB	HIS	C	189	-21.672	-29.472	-33.055	1.00101.41	MOL2	C
ATOM	5788	CG	HIS	C	189	-22.663	-30.382	-33.710	1.00105.48	MOL2	C
ATOM	5789	CD2	HIS	C	189	-23.194	-31.561	-33.308	1.00106.26	MOL2	C
ATOM	5790	ND1	HIS	C	189	-23.243	-30.096	-34.929	1.00108.49	MOL2	N
ATOM	5791	CE1	HIS	C	189	-24.086	-31.061	-35.251	1.00109.87	MOL2	C
ATOM	5792	NE2	HIS	C	189	-24.075	-31.962	-34.285	1.00111.52	MOL2	N
ATOM	5793	C	HIS	C	189	-21.234	-27.343	-31.802	1.00 96.73	MOL2	C
ATOM	5794	O	HIS	C	189	-20.976	-26.254	-32.321	1.00 94.15	MOL2	O
ATOM	5795	N	ASN	C	190	-20.593	-27.793	-30.727	1.00 99.11	MOL2	N
ATOM	5796	CA	ASN	C	190	-19.589	-26.967	-30.058	1.00106.33	MOL2	C
ATOM	5797	CB	ASN	C	190	-20.060	-26.674	-28.619	1.00118.99	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5798	CG	ASN	C	190	-19.356	-25.466	-27.991	1.00128.44	MOL2	C
ATOM	5799	OD1	ASN	C	190	-18.126	-25.435	-27.877	1.00132.56	MOL2	O
ATOM	5800	ND2	ASN	C	190	-20.142	-24.470	-27.573	1.00130.77	MOL2	N
ATOM	5801	C	ASN	C	190	-18.143	-27.488	-30.031	1.00104.71	MOL2	C
ATOM	5802	O	ASN	C	190	-17.205	-26.711	-30.257	1.00102.41	MOL2	O
ATOM	5803	N	SER	C	191	-17.948	-28.779	-29.747	1.00102.86	MOL2	N
ATOM	5804	CA	SER	C	191	-16.588	-29.330	-29.688	1.00 98.88	MOL2	C
ATOM	5805	CB	SER	C	191	-16.441	-30.332	-28.521	1.00100.66	MOL2	C
ATOM	5806	OG	SER	C	191	-17.297	-31.457	-28.638	1.00102.00	MOL2	O
ATOM	5807	C	SER	C	191	-16.111	-29.967	-30.993	1.00 96.99	MOL2	C
ATOM	5808	O	SER	C	191	-16.820	-30.764	-31.620	1.00 92.58	MOL2	O
ATOM	5809	N	TYR	C	192	-14.898	-29.588	-31.394	1.00 96.21	MOL2	N
ATOM	5810	CA	TYR	C	192	-14.286	-30.090	-32.621	1.00 94.20	MOL2	C
ATOM	5811	CB	TYR	C	192	-14.210	-28.977	-33.670	1.00 98.25	MOL2	C
ATOM	5812	CG	TYR	C	192	-15.552	-28.622	-34.269	1.00102.09	MOL2	C
ATOM	5813	CD1	TYR	C	192	-15.948	-27.297	-34.397	1.00101.80	MOL2	C
ATOM	5814	CE1	TYR	C	192	-17.182	-26.971	-34.932	1.00105.33	MOL2	C
ATOM	5815	CD2	TYR	C	192	-16.431	-29.619	-34.698	1.00100.60	MOL2	C
ATOM	5816	CE2	TYR	C	192	-17.665	-29.300	-35.237	1.00101.03	MOL2	C
ATOM	5817	CZ	TYR	C	192	-18.037	-27.975	-35.352	1.00104.61	MOL2	C
ATOM	5818	OH	TYR	C	192	-19.262	-27.644	-35.894	1.00103.77	MOL2	O
ATOM	5819	C	TYR	C	192	-12.898	-30.635	-32.334	1.00 92.21	MOL2	C
ATOM	5820	O	TYR	C	192	-12.010	-29.911	-31.862	1.00 91.97	MOL2	O
ATOM	5821	N	THR	C	193	-12.714	-31.916	-32.633	1.00 87.96	MOL2	N
ATOM	5822	CA	THR	C	193	-11.443	-32.574	-32.386	1.00 86.37	MOL2	C
ATOM	5823	CB	THR	C	193	-11.602	-33.679	-31.349	1.00 89.98	MOL2	C
ATOM	5824	OG1	THR	C	193	-12.186	-34.830	-31.977	1.00 90.57	MOL2	O
ATOM	5825	CG2	THR	C	193	-12.516	-33.220	-30.222	1.00 95.21	MOL2	C
ATOM	5826	C	THR	C	193	-10.875	-33.237	-33.628	1.00 85.96	MOL2	C
ATOM	5827	O	THR	C	193	-11.608	-33.720	-34.496	1.00 80.74	MOL2	O
ATOM	5828	N	CYS	C	194	-9.552	-33.281	-33.680	1.00 88.35	MOL2	N
ATOM	5829	CA	CYS	C	194	-8.835	-33.903	-34.778	1.00 86.66	MOL2	C
ATOM	5830	C	CYS	C	194	-7.866	-34.866	-34.096	1.00 85.37	MOL2	C
ATOM	5831	O	CYS	C	194	-6.920	-34.446	-33.421	1.00 84.98	MOL2	O
ATOM	5832	CB	CYS	C	194	-8.123	-32.815	-35.571	1.00 89.98	MOL2	C
ATOM	5833	SG	CYS	C	194	-6.893	-33.362	-36.776	1.00 89.61	MOL2	S
ATOM	5834	N	GLU	C	195	-8.138	-36.161	-34.230	1.00 84.20	MOL2	N
ATOM	5835	CA	GLU	C	195	-7.300	-37.172	-33.590	1.00 84.87	MOL2	C
ATOM	5836	CB	GLU	C	195	-8.159	-38.157	-32.783	1.00 94.33	MOL2	C
ATOM	5837	CG	GLU	C	195	-9.060	-37.488	-31.737	1.00104.52	MOL2	C
ATOM	5838	CD	GLU	C	195	-9.777	-38.477	-30.816	1.00110.31	MOL2	C
ATOM	5839	OE1	GLU	C	195	-10.283	-39.511	-31.312	1.00115.56	MOL2	O
ATOM	5840	OE2	GLU	C	195	-9.848	-38.209	-29.594	1.00111.25	MOL2	O
ATOM	5841	C	GLU	C	195	-6.425	-37.930	-34.576	1.00 82.75	MOL2	C
ATOM	5842	O	GLU	C	195	-6.911	-38.637	-35.471	1.00 77.51	MOL2	O
ATOM	5843	N	ALA	C	196	-5.117	-37.782	-34.397	1.00 81.78	MOL2	N
ATOM	5844	CA	ALA	C	196	-4.157	-38.437	-35.278	1.00 78.73	MOL2	C
ATOM	5845	CB	ALA	C	196	-3.095	-37.436	-35.740	1.00 79.10	MOL2	C
ATOM	5846	C	ALA	C	196	-3.488	-39.645	-34.634	1.00 76.27	MOL2	C
ATOM	5847	O	ALA	C	196	-2.815	-39.527	-33.599	1.00 78.76	MOL2	O
ATOM	5848	N	THR	C	197	-3.687	-40.806	-35.258	1.00 69.31	MOL2	N
ATOM	5849	CA	THR	C	197	-3.105	-42.066	-34.793	1.00 65.11	MOL2	C
ATOM	5850	CB	THR	C	197	-4.145	-43.221	-34.890	1.00 64.89	MOL2	C
ATOM	5851	OG1	THR	C	197	-4.013	-44.073	-33.746	1.00 72.06	MOL2	O
ATOM	5852	CG2	THR	C	197	-3.940	-44.053	-36.150	1.00 56.49	MOL2	C
ATOM	5853	C	THR	C	197	-1.853	-42.402	-35.634	1.00 64.02	MOL2	C
ATOM	5854	O	THR	C	197	-1.904	-42.476	-36.866	1.00 54.75	MOL2	O
ATOM	5855	N	HIS	C	198	-0.729	-42.616	-34.955	1.00 66.83	MOL2	N
ATOM	5856	CA	HIS	C	198	0.538	-42.882	-35.633	1.00 64.57	MOL2	C
ATOM	5857	CB	HIS	C	198	1.261	-41.535	-35.811	1.00 62.18	MOL2	C
ATOM	5858	CG	HIS	C	198	2.485	-41.593	-36.668	1.00 63.38	MOL2	C
ATOM	5859	CD2	HIS	C	198	3.764	-41.223	-36.417	1.00 60.84	MOL2	C
ATOM	5860	ND1	HIS	C	198	2.460	-42.024	-37.978	1.00 62.33	MOL2	N
ATOM	5861	CE1	HIS	C	198	3.671	-41.916	-38.495	1.00 63.38	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5862	NE2	HIS	C	198	4.480	-41.432	-37.570	1.00	60.65	MOL2	N
ATOM	5863	C	HIS	C	198	1.449	-43.895	-34.909	1.00	63.67	MOL2	C
ATOM	5864	O	HIS	C	198	1.548	-43.913	-33.682	1.00	70.98	MOL2	O
ATOM	5865	N	LYS	C	199	2.110	-44.729	-35.699	1.00	61.78	MOL2	N
ATOM	5866	CA	LYS	C	199	3.030	-45.756	-35.219	1.00	56.62	MOL2	C
ATOM	5867	CB	LYS	C	199	3.878	-46.232	-36.402	1.00	61.39	MOL2	C
ATOM	5868	CG	LYS	C	199	5.123	-47.018	-36.059	1.00	58.85	MOL2	C
ATOM	5869	CD	LYS	C	199	5.719	-47.591	-37.335	1.00	58.87	MOL2	C
ATOM	5870	CE	LYS	C	199	7.112	-48.137	-37.114	1.00	61.59	MOL2	C
ATOM	5871	NZ	LYS	C	199	7.774	-48.382	-38.423	1.00	69.57	MOL2	N
ATOM	5872	C	LYS	C	199	3.925	-45.310	-34.068	1.00	53.02	MOL2	C
ATOM	5873	O	LYS	C	199	4.378	-46.128	-33.270	1.00	55.72	MOL2	C
ATOM	5874	N	THR	C	200	4.173	-44.012	-33.980	1.00	47.42	MOL2	N
ATOM	5875	CA	THR	C	200	5.010	-43.455	-32.925	1.00	55.51	MOL2	C
ATOM	5876	CB	THR	C	200	5.255	-41.963	-33.182	1.00	57.59	MOL2	C
ATOM	5877	OG1	THR	C	200	4.061	-41.375	-33.715	1.00	62.14	MOL2	O
ATOM	5878	CG2	THR	C	200	6.391	-41.767	-34.147	1.00	57.64	MOL2	C
ATOM	5879	C	THR	C	200	4.451	-43.598	-31.496	1.00	58.33	MOL2	C
ATOM	5880	O	THR	C	200	5.201	-43.513	-30.513	1.00	56.11	MOL2	O
ATOM	5881	N	SER	C	201	3.142	-43.789	-31.376	1.00	58.57	MOL2	N
ATOM	5882	CA	SER	C	201	2.535	-43.917	-30.062	1.00	65.13	MOL2	C
ATOM	5883	CB	SER	C	201	2.133	-42.551	-29.498	1.00	75.06	MOL2	C
ATOM	5884	OG	SER	C	201	1.660	-42.651	-28.155	1.00	76.72	MOL2	O
ATOM	5885	C	SER	C	201	1.316	-44.797	-30.084	1.00	68.79	MOL2	C
ATOM	5886	O	SER	C	201	0.698	-45.002	-31.124	1.00	71.76	MOL2	O
ATOM	5887	N	THR	C	202	0.981	-45.301	-28.902	1.00	71.34	MOL2	N
ATOM	5888	CA	THR	C	202	-0.160	-46.179	-28.683	1.00	66.29	MOL2	C
ATOM	5889	CB	THR	C	202	0.122	-47.043	-27.496	1.00	61.94	MOL2	C
ATOM	5890	OG1	THR	C	202	0.569	-46.207	-26.414	1.00	61.91	MOL2	O
ATOM	5891	CG2	THR	C	202	1.203	-48.029	-27.834	1.00	62.11	MOL2	C
ATOM	5892	C	THR	C	202	-1.391	-45.338	-28.380	1.00	71.53	MOL2	C
ATOM	5893	O	THR	C	202	-2.532	-45.799	-28.497	1.00	68.75	MOL2	O
ATOM	5894	N	SER	C	203	-1.132	-44.095	-27.985	1.00	74.60	MOL2	N
ATOM	5895	CA	SER	C	203	-2.175	-43.149	-27.637	1.00	75.06	MOL2	C
ATOM	5896	CB	SER	C	203	-1.944	-42.627	-26.207	1.00	78.78	MOL2	C
ATOM	5897	OG	SER	C	203	-0.582	-42.302	-25.977	1.00	74.75	MOL2	O
ATOM	5898	C	SER	C	203	-2.184	-41.999	-28.628	1.00	73.19	MOL2	C
ATOM	5899	O	SER	C	203	-1.217	-41.237	-28.701	1.00	72.48	MOL2	O
ATOM	5900	N	PRO	C	204	-3.283	-41.869	-29.405	1.00	74.35	MOL2	N
ATOM	5901	CD	PRO	C	204	-4.374	-42.866	-29.369	1.00	74.62	MOL2	C
ATOM	5902	CA	PRO	C	204	-3.554	-40.854	-30.436	1.00	70.15	MOL2	C
ATOM	5903	CB	PRO	C	204	-5.025	-41.084	-30.763	1.00	67.10	MOL2	C
ATOM	5904	CG	PRO	C	204	-5.146	-42.573	-30.652	1.00	69.63	MOL2	C
ATOM	5905	C	PRO	C	204	-3.308	-39.427	-29.989	1.00	69.69	MOL2	C
ATOM	5906	O	PRO	C	204	-3.640	-39.063	-28.858	1.00	72.58	MOL2	O
ATOM	5907	N	ILE	C	205	-2.713	-38.628	-30.874	1.00	70.09	MOL2	N
ATOM	5908	CA	ILE	C	205	-2.458	-37.225	-30.570	1.00	71.17	MOL2	C
ATOM	5909	CB	ILE	C	205	-1.315	-36.633	-31.448	1.00	67.23	MOL2	C
ATOM	5910	CG2	ILE	C	205	-1.212	-35.133	-31.230	1.00	64.64	MOL2	C
ATOM	5911	CG1	ILE	C	205	0.022	-37.289	-31.075	1.00	71.12	MOL2	C
ATOM	5912	CD1	ILE	C	205	1.259	-36.419	-31.340	1.00	70.56	MOL2	C
ATOM	5913	C	ILE	C	205	-3.782	-36.535	-30.873	1.00	73.78	MOL2	C
ATOM	5914	O	ILE	C	205	-4.331	-36.671	-31.977	1.00	67.96	MOL2	O
ATOM	5915	N	VAL	C	206	-4.317	-35.829	-29.879	1.00	76.89	MOL2	N
ATOM	5916	CA	VAL	C	206	-5.593	-35.160	-30.060	1.00	81.99	MOL2	C
ATOM	5917	CB	VAL	C	206	-6.659	-35.771	-29.128	1.00	76.92	MOL2	C
ATOM	5918	CG1	VAL	C	206	-8.023	-35.259	-29.506	1.00	83.47	MOL2	C
ATOM	5919	CG2	VAL	C	206	-6.638	-37.266	-29.228	1.00	74.77	MOL2	C
ATOM	5920	C	VAL	C	206	-5.521	-33.652	-29.817	1.00	87.24	MOL2	C
ATOM	5921	O	VAL	C	206	-4.991	-33.194	-28.790	1.00	88.17	MOL2	O
ATOM	5922	N	LYS	C	207	-6.041	-32.888	-30.777	1.00	86.74	MOL2	N
ATOM	5923	CA	LYS	C	207	-6.074	-31.437	-30.668	1.00	89.73	MOL2	C
ATOM	5924	CB	LYS	C	207	-5.084	-30.790	-31.640	1.00	92.01	MOL2	C
ATOM	5925	CG	LYS	C	207	-3.610	-31.037	-31.305	1.00	90.07	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	5926	CD	LYS	C	207	-3.231	-30.490	-29.936	1.00	94.48	MOL2	C
ATOM	5927	CE	LYS	C	207	-1.722	-30.567	-29.694	1.00	97.81	MOL2	C
ATOM	5928	NZ	LYS	C	207	-1.303	-30.034	-28.355	1.00	99.93	MOL2	N
ATOM	5929	C	LYS	C	207	-7.502	-31.021	-30.990	1.00	93.06	MOL2	C
ATOM	5930	O	LYS	C	207	-8.111	-31.550	-31.929	1.00	90.15	MOL2	O
ATOM	5931	N	SER	C	208	-8.042	-30.098	-30.191	1.00	95.64	MOL2	N
ATOM	5932	CA	SER	C	208	-9.418	-29.633	-30.376	1.00	96.16	MOL2	C
ATOM	5933	CB	SER	C	208	-10.400	-30.478	-29.550	1.00	92.40	MOL2	C
ATOM	5934	OG	SER	C	208	-10.301	-31.851	-29.858	1.00	86.23	MOL2	O
ATOM	5935	C	SER	C	208	-9.592	-28.186	-29.964	1.00	98.80	MOL2	C
ATOM	5936	O	SER	C	208	-8.657	-27.538	-29.490	1.00	96.21	MOL2	O
ATOM	5937	N	PHE	C	209	-10.818	-27.703	-30.126	1.00	104.94	MOL2	N
ATOM	5938	CA	PHE	C	209	-11.165	-26.331	-29.788	1.00	112.91	MOL2	C
ATOM	5939	CB	PHE	C	209	-10.646	-25.379	-30.867	1.00	119.37	MOL2	C
ATOM	5940	CG	PHE	C	209	-11.603	-25.205	-32.013	1.00	125.03	MOL2	C
ATOM	5941	CD1	PHE	C	209	-12.188	-23.975	-32.261	1.00	127.55	MOL2	C
ATOM	5942	CD2	PHE	C	209	-11.974	-26.289	-32.796	1.00	127.39	MOL2	C
ATOM	5943	CE1	PHE	C	209	-13.128	-23.832	-33.264	1.00	132.81	MOL2	C
ATOM	5944	CE2	PHE	C	209	-12.913	-26.151	-33.798	1.00	131.06	MOL2	C
ATOM	5945	CZ	PHE	C	209	-13.492	-24.924	-34.033	1.00	134.21	MOL2	C
ATOM	5946	C	PHE	C	209	-12.692	-26.208	-29.732	1.00	116.65	MOL2	C
ATOM	5947	O	PHE	C	209	-13.413	-26.882	-30.486	1.00	114.04	MOL2	O
ATOM	5948	N	ASN	C	210	-13.179	-25.343	-28.843	1.00	119.28	MOL2	N
ATOM	5949	CA	ASN	C	210	-14.613	-25.107	-28.715	1.00	122.10	MOL2	C
ATOM	5950	CB	ASN	C	210	-15.063	-25.285	-27.266	1.00	122.85	MOL2	C
ATOM	5951	CG	ASN	C	210	-15.326	-26.733	-26.920	1.00	124.32	MOL2	C
ATOM	5952	OD1	ASN	C	210	-16.123	-27.399	-27.580	1.00	120.86	MOL2	O
ATOM	5953	ND2	ASN	C	210	-14.659	-27.229	-25.884	1.00	126.41	MOL2	N
ATOM	5954	C	ASN	C	210	-14.945	-23.697	-29.188	1.00	125.34	MOL2	C
ATOM	5955	O	ASN	C	210	-14.053	-22.852	-29.316	1.00	124.68	MOL2	O
ATOM	5956	N	ARG	C	211	-16.228	-23.448	-29.445	1.00	130.51	MOL2	N
ATOM	5957	CA	ARG	C	211	-16.687	-22.137	-29.905	1.00	135.75	MOL2	C
ATOM	5958	CB	ARG	C	211	-18.032	-22.273	-30.626	1.00	135.55	MOL2	C
ATOM	5959	CG	ARG	C	211	-18.058	-23.334	-31.715	1.00	138.83	MOL2	C
ATOM	5960	CD	ARG	C	211	-19.445	-23.492	-32.338	1.00	143.96	MOL2	C
ATOM	5961	NE	ARG	C	211	-20.477	-23.824	-31.355	1.00	150.84	MOL2	N
ATOM	5962	CZ	ARG	C	211	-21.122	-22.932	-30.603	1.00	156.30	MOL2	C
ATOM	5963	NH1	ARG	C	211	-20.850	-21.638	-30.717	1.00	159.23	MOL2	N
ATOM	5964	NH2	ARG	C	211	-22.037	-23.334	-29.727	1.00	157.52	MOL2	N
ATOM	5965	C	ARG	C	211	-16.825	-21.130	-28.756	1.00	141.28	MOL2	C
ATOM	5966	O	ARG	C	211	-17.563	-21.351	-27.787	1.00	138.31	MOL2	O
ATOM	5967	N	ASN	C	212	-16.102	-20.022	-28.893	1.00	149.64	MOL2	N
ATOM	5968	CA	ASN	C	212	-16.077	-18.930	-27.925	1.00	157.26	MOL2	C
ATOM	5969	CB	ASN	C	212	-14.645	-18.774	-27.385	1.00	158.65	MOL2	C
ATOM	5970	CG	ASN	C	212	-13.580	-18.869	-28.491	1.00	160.07	MOL2	C
ATOM	5971	OD1	ASN	C	212	-13.470	-17.989	-29.352	1.00	159.67	MOL2	O
ATOM	5972	ND2	ASN	C	212	-12.799	-19.947	-28.468	1.00	157.43	MOL2	N
ATOM	5973	C	ASN	C	212	-16.525	-17.643	-28.633	1.00	162.36	MOL2	C
ATOM	5974	O	ASN	C	212	-17.142	-16.760	-28.027	1.00	162.64	MOL2	O
ATOM	5975	N	GLU	C	213	-16.193	-17.561	-29.923	1.00	168.08	MOL2	N
ATOM	5976	CA	GLU	C	213	-16.534	-16.432	-30.794	1.00	172.24	MOL2	C
ATOM	5977	CB	GLU	C	213	-18.060	-16.334	-30.957	1.00	174.81	MOL2	C
ATOM	5978	CG	GLU	C	213	-18.588	-16.676	-32.363	1.00	178.79	MOL2	C
ATOM	5979	CD	GLU	C	213	-18.485	-18.160	-32.725	1.00	180.90	MOL2	C
ATOM	5980	OE1	GLU	C	213	-19.059	-18.999	-31.995	1.00	182.92	MOL2	O
ATOM	5981	OE2	GLU	C	213	-17.840	-18.486	-33.748	1.00	179.09	MOL2	O
ATOM	5982	C	GLU	C	213	-15.981	-15.067	-30.379	1.00	173.25	MOL2	C
ATOM	5983	O	GLU	C	213	-16.527	-14.402	-29.499	1.00	173.91	MOL2	O
ATOM	5984	N	CYS	C	214	-14.900	-14.653	-31.034	1.00	174.34	MOL2	N
ATOM	5985	CA	CYS	C	214	-14.271	-13.364	-30.765	1.00	176.87	MOL2	C
ATOM	5986	CB	CYS	C	214	-13.684	-13.328	-29.352	1.00	177.45	MOL2	C
ATOM	5987	SG	CYS	C	214	-14.578	-12.272	-28.158	1.00	178.63	MOL2	S
ATOM	5988	C	CYS	C	214	-13.166	-13.089	-31.782	1.00	177.57	MOL2	C
ATOM	5989	O	CYS	C	214	-12.996	-13.915	-32.703	1.00	177.03	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	5990	OXT	CYS	C	214	-12.485	-12.051	-31.648	1.00178.26	MOL2	O
ATOM	5991	CB	GLU	D	1	22.314	-35.760	-79.347	1.00 84.87	MOL2	C
ATOM	5992	CG	GLU	D	1	22.427	-36.327	-80.787	1.00101.66	MOL2	C
ATOM	5993	CD	GLU	D	1	23.307	-35.500	-81.745	1.00109.46	MOL2	C
ATOM	5994	OE1	GLU	D	1	23.251	-35.754	-82.981	1.00102.99	MOL2	O
ATOM	5995	OE2	GLU	D	1	24.058	-34.614	-81.266	1.00111.21	MOL2	O
ATOM	5996	C	GLU	D	1	19.956	-35.196	-79.880	1.00 69.87	MOL2	C
ATOM	5997	O	GLU	D	1	19.881	-35.083	-81.098	1.00 75.70	MOL2	O
ATOM	5998	N	GLU	D	1	20.944	-34.490	-77.692	1.00 75.00	MOL2	N
ATOM	5999	CA	GLU	D	1	21.198	-34.723	-79.145	1.00 73.87	MOL2	C
ATOM	6000	N	VAL	D	2	18.974	-35.724	-79.162	1.00 63.06	MOL2	N
ATOM	6001	CA	VAL	D	2	17.762	-36.194	-79.827	1.00 55.58	MOL2	C
ATOM	6002	CB	VAL	D	2	17.566	-37.689	-79.628	1.00 47.21	MOL2	C
ATOM	6003	CG1	VAL	D	2	16.454	-38.199	-80.509	1.00 20.53	MOL2	C
ATOM	6004	CG2	VAL	D	2	18.854	-38.402	-79.914	1.00 52.31	MOL2	C
ATOM	6005	C	VAL	D	2	16.514	-35.503	-79.331	1.00 60.47	MOL2	C
ATOM	6006	O	VAL	D	2	15.623	-36.155	-78.805	1.00 66.99	MOL2	O
ATOM	6007	N	GLN	D	3	16.439	-34.192	-79.527	1.00 62.47	MOL2	N
ATOM	6008	CA	GLN	D	3	15.305	-33.390	-79.078	1.00 60.74	MOL2	C
ATOM	6009	CB	GLN	D	3	15.532	-31.937	-79.505	1.00 68.39	MOL2	C
ATOM	6010	CG	GLN	D	3	16.934	-31.419	-79.214	1.00 90.44	MOL2	C
ATOM	6011	CD	GLN	D	3	17.198	-30.040	-79.819	1.00104.39	MOL2	C
ATOM	6012	OE1	GLN	D	3	18.353	-29.614	-79.949	1.00112.27	MOL2	O
ATOM	6013	NE2	GLN	D	3	16.126	-29.334	-80.186	1.00106.58	MOL2	N
ATOM	6014	C	GLN	D	3	13.911	-33.840	-79.546	1.00 52.32	MOL2	C
ATOM	6015	O	GLN	D	3	13.716	-34.239	-80.690	1.00 46.30	MOL2	O
ATOM	6016	N	LEU	D	4	12.951	-33.776	-78.630	1.00 47.94	MOL2	N
ATOM	6017	CA	LEU	D	4	11.550	-34.087	-78.905	1.00 45.55	MOL2	C
ATOM	6018	CB	LEU	D	4	11.184	-35.486	-78.423	1.00 36.42	MOL2	C
ATOM	6019	CG	LEU	D	4	11.126	-36.543	-79.515	1.00 40.93	MOL2	C
ATOM	6020	CD1	LEU	D	4	12.450	-36.560	-80.210	1.00 48.51	MOL2	C
ATOM	6021	CD2	LEU	D	4	10.802	-37.918	-78.947	1.00 37.15	MOL2	C
ATOM	6022	C	LEU	D	4	10.784	-33.048	-78.095	1.00 51.22	MOL2	C
ATOM	6023	O	LEU	D	4	11.038	-32.902	-76.885	1.00 57.44	MOL2	O
ATOM	6024	N	VAL	D	5	9.893	-32.291	-78.742	1.00 48.35	MOL2	N
ATOM	6025	CA	VAL	D	5	9.128	-31.282	-78.008	1.00 48.38	MOL2	C
ATOM	6026	CB	VAL	D	5	9.726	-29.864	-78.176	1.00 39.25	MOL2	C
ATOM	6027	CG1	VAL	D	5	11.212	-29.956	-78.478	1.00 29.62	MOL2	C
ATOM	6028	CG2	VAL	D	5	8.995	-29.114	-79.250	1.00 51.89	MOL2	C
ATOM	6029	C	VAL	D	5	7.652	-31.267	-78.381	1.00 52.00	MOL2	C
ATOM	6030	O	VAL	D	5	7.280	-31.145	-79.555	1.00 54.17	MOL2	O
ATOM	6031	N	GLU	D	6	6.812	-31.418	-77.363	1.00 56.64	MOL2	N
ATOM	6032	CA	GLU	D	6	5.379	-31.428	-77.570	1.00 62.34	MOL2	C
ATOM	6033	CB	GLU	D	6	4.720	-32.458	-76.657	1.00 65.34	MOL2	C
ATOM	6034	CG	GLU	D	6	5.275	-33.857	-76.832	1.00 74.88	MOL2	C
ATOM	6035	CD	GLU	D	6	6.236	-34.247	-75.728	1.00 79.38	MOL2	C
ATOM	6036	OE1	GLU	D	6	7.023	-33.380	-75.290	1.00 75.80	MOL2	O
ATOM	6037	OE2	GLU	D	6	6.203	-35.426	-75.307	1.00 82.65	MOL2	O
ATOM	6038	C	GLU	D	6	4.803	-30.044	-77.319	1.00 66.15	MOL2	C
ATOM	6039	O	GLU	D	6	5.439	-29.187	-76.681	1.00 61.42	MOL2	O
ATOM	6040	N	SER	D	7	3.602	-29.826	-77.844	1.00 69.22	MOL2	N
ATOM	6041	CA	SER	D	7	2.930	-28.549	-77.691	1.00 70.93	MOL2	C
ATOM	6042	CB	SER	D	7	3.601	-27.486	-78.574	1.00 74.24	MOL2	C
ATOM	6043	OG	SER	D	7	4.164	-28.060	-79.748	1.00 77.33	MOL2	O
ATOM	6044	C	SER	D	7	1.463	-28.680	-78.031	1.00 70.64	MOL2	C
ATOM	6045	O	SER	D	7	1.029	-29.683	-78.622	1.00 63.72	MOL2	O
ATOM	6046	N	GLY	D	8	0.702	-27.665	-77.634	1.00 73.56	MOL2	N
ATOM	6047	CA	GLY	D	8	-0.722	-27.665	-77.901	1.00 81.67	MOL2	C
ATOM	6048	C	GLY	D	8	-1.499	-28.062	-76.673	1.00 83.23	MOL2	C
ATOM	6049	O	GLY	D	8	-2.624	-28.547	-76.769	1.00 83.26	MOL2	O
ATOM	6050	N	GLY	D	9	-0.890	-27.852	-75.513	1.00 88.14	MOL2	N
ATOM	6051	CA	GLY	D	9	-1.547	-28.206	-74.269	1.00 94.12	MOL2	C
ATOM	6052	C	GLY	D	9	-2.523	-27.148	-73.805	1.00 94.96	MOL2	C
ATOM	6053	O	GLY	D	9	-2.441	-25.995	-74.236	1.00 96.56	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	6054	N	GLY	D	10	-3.443	-27.544	-72.926	1.00	95.77	MOL2	N
ATOM	6055	CA	GLY	D	10	-4.438	-26.621	-72.407	1.00	93.74	MOL2	C
ATOM	6056	C	GLY	D	10	-5.672	-27.331	-71.882	1.00	90.23	MOL2	C
ATOM	6057	O	GLY	D	10	-5.716	-28.563	-71.821	1.00	87.47	MOL2	O
ATOM	6058	N	LEU	D	11	-6.681	-26.549	-71.513	1.00	87.23	MOL2	N
ATOM	6059	CA	LEU	D	11	-7.929	-27.083	-70.975	1.00	85.72	MOL2	C
ATOM	6060	CB	LEU	D	11	-8.429	-26.209	-69.828	1.00	86.17	MOL2	C
ATOM	6061	CG	LEU	D	11	-7.397	-25.409	-69.026	1.00	92.46	MOL2	C
ATOM	6062	CD1	LEU	D	11	-6.610	-24.445	-69.933	1.00	92.06	MOL2	C
ATOM	6063	CD2	LEU	D	11	-8.134	-24.642	-67.938	1.00	92.18	MOL2	C
ATOM	6064	C	LEU	D	11	-8.973	-27.054	-72.057	1.00	81.57	MOL2	C
ATOM	6065	O	LEU	D	11	-8.858	-26.296	-73.007	1.00	81.09	MOL2	O
ATOM	6066	N	VAL	D	12	-10.007	-27.860	-71.911	1.00	81.34	MOL2	N
ATOM	6067	CA	VAL	D	12	-11.050	-27.851	-72.911	1.00	90.17	MOL2	C
ATOM	6068	CB	VAL	D	12	-10.484	-28.360	-74.253	1.00	85.76	MOL2	C
ATOM	6069	CG1	VAL	D	12	-9.519	-29.480	-73.995	1.00	88.33	MOL2	C
ATOM	6070	CG2	VAL	D	12	-11.607	-28.814	-75.170	1.00	93.86	MOL2	C
ATOM	6071	C	VAL	D	12	-12.283	-28.644	-72.464	1.00	96.91	MOL2	C
ATOM	6072	O	VAL	D	12	-12.196	-29.827	-72.130	1.00	100.56	MOL2	O
ATOM	6073	N	GLN	D	13	-13.428	-27.961	-72.442	1.00	100.84	MOL2	N
ATOM	6074	CA	GLN	D	13	-14.702	-28.555	-72.036	1.00	99.10	MOL2	C
ATOM	6075	CB	GLN	D	13	-15.880	-27.642	-72.450	1.00	105.56	MOL2	C
ATOM	6076	CG	GLN	D	13	-15.513	-26.216	-72.931	1.00	107.21	MOL2	C
ATOM	6077	CD	GLN	D	13	-15.442	-25.179	-71.807	1.00	109.35	MOL2	C
ATOM	6078	OE1	GLN	D	13	-16.437	-24.911	-71.125	1.00	104.19	MOL2	O
ATOM	6079	NE2	GLN	D	13	-14.263	-24.587	-71.619	1.00	106.68	MOL2	N
ATOM	6080	C	GLN	D	13	-14.898	-29.935	-72.665	1.00	93.48	MOL2	C
ATOM	6081	O	GLN	D	13	-14.483	-30.186	-73.802	1.00	85.32	MOL2	O
ATOM	6082	N	PRO	D	14	-15.529	-30.853	-71.922	1.00	92.73	MOL2	N
ATOM	6083	CD	PRO	D	14	-15.928	-30.745	-70.506	1.00	91.49	MOL2	C
ATOM	6084	CA	PRO	D	14	-15.766	-32.200	-72.448	1.00	93.50	MOL2	C
ATOM	6085	CB	PRO	D	14	-16.742	-32.789	-71.442	1.00	93.16	MOL2	C
ATOM	6086	CG	PRO	D	14	-16.228	-32.190	-70.136	1.00	96.15	MOL2	C
ATOM	6087	C	PRO	D	14	-16.328	-32.121	-73.861	1.00	95.56	MOL2	C
ATOM	6088	O	PRO	D	14	-16.834	-31.077	-74.278	1.00	95.24	MOL2	O
ATOM	6089	N	GLY	D	15	-16.226	-33.218	-74.602	1.00	99.20	MOL2	N
ATOM	6090	CA	GLY	D	15	-16.714	-33.222	-75.969	1.00	100.83	MOL2	C
ATOM	6091	C	GLY	D	15	-15.810	-32.426	-76.900	1.00	101.96	MOL2	C
ATOM	6092	O	GLY	D	15	-15.628	-32.814	-78.058	1.00	105.17	MOL2	O
ATOM	6093	N	GLY	D	16	-15.244	-31.322	-76.399	1.00	97.91	MOL2	N
ATOM	6094	CA	GLY	D	16	-14.362	-30.485	-77.200	1.00	92.60	MOL2	C
ATOM	6095	C	GLY	D	16	-13.253	-31.244	-77.912	1.00	93.12	MOL2	C
ATOM	6096	O	GLY	D	16	-13.158	-32.474	-77.809	1.00	94.06	MOL2	O
ATOM	6097	N	SER	D	17	-12.405	-30.519	-78.640	1.00	90.56	MOL2	N
ATOM	6098	CA	SER	D	17	-11.305	-31.152	-79.368	1.00	88.06	MOL2	C
ATOM	6099	CB	SER	D	17	-11.666	-31.329	-80.849	1.00	84.28	MOL2	C
ATOM	6100	OG	SER	D	17	-11.944	-32.684	-81.155	1.00	71.92	MOL2	O
ATOM	6101	C	SER	D	17	-9.988	-30.395	-79.279	1.00	86.85	MOL2	C
ATOM	6102	O	SER	D	17	-9.972	-29.168	-79.144	1.00	82.24	MOL2	O
ATOM	6103	N	LEU	D	18	-8.889	-31.149	-79.358	1.00	87.92	MOL2	N
ATOM	6104	CA	LEU	D	18	-7.537	-30.591	-79.318	1.00	83.54	MOL2	C
ATOM	6105	CB	LEU	D	18	-6.970	-30.620	-77.901	1.00	78.94	MOL2	C
ATOM	6106	CG	LEU	D	18	-6.472	-29.234	-77.506	1.00	78.53	MOL2	C
ATOM	6107	CD1	LEU	D	18	-5.626	-29.308	-76.241	1.00	74.08	MOL2	C
ATOM	6108	CD2	LEU	D	18	-5.683	-28.658	-78.673	1.00	78.57	MOL2	C
ATOM	6109	C	LEU	D	18	-6.594	-31.357	-80.237	1.00	81.40	MOL2	C
ATOM	6110	O	LEU	D	18	-6.772	-32.557	-80.473	1.00	80.75	MOL2	O
ATOM	6111	N	ARG	D	19	-5.597	-30.648	-80.757	1.00	79.15	MOL2	N
ATOM	6112	CA	ARG	D	19	-4.599	-31.241	-81.644	1.00	78.03	MOL2	C
ATOM	6113	CB	ARG	D	19	-4.678	-30.634	-83.039	1.00	78.17	MOL2	C
ATOM	6114	CG	ARG	D	19	-3.535	-31.018	-83.949	1.00	65.90	MOL2	C
ATOM	6115	CD	ARG	D	19	-3.131	-29.824	-84.786	1.00	69.08	MOL2	C
ATOM	6116	NE	ARG	D	19	-2.427	-30.199	-86.005	1.00	74.67	MOL2	N
ATOM	6117	C2	ARG	D	19	-2.777	-31.215	-86.793	1.00	75.43	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6118	NH1	ARG	D	19	-3.823	-31.978	-86.487	1.00	65.68	MOL2	N
ATOM	6119	NH2	ARG	D	19	-2.093	-31.453	-87.909	1.00	79.00	MOL2	N
ATOM	6120	C	ARG	D	19	-3.215	-30.986	-81.073	1.00	78.02	MOL2	C
ATOM	6121	O	ARG	D	19	-2.788	-29.831	-80.907	1.00	72.90	MOL2	O
ATOM	6122	N	LEU	D	20	-2.526	-32.085	-80.777	1.00	77.70	MOL2	N
ATOM	6123	CA	LEU	D	20	-1.187	-32.051	-80.211	1.00	75.48	MOL2	C
ATOM	6124	CB	LEU	D	20	-1.058	-33.127	-79.137	1.00	77.70	MOL2	C
ATOM	6125	CG	LEU	D	20	-1.804	-32.904	-77.828	1.00	78.75	MOL2	C
ATOM	6126	CD1	LEU	D	20	-1.722	-34.166	-76.990	1.00	76.76	MOL2	C
ATOM	6127	CD2	LEU	D	20	-1.205	-31.702	-77.100	1.00	77.37	MOL2	C
ATOM	6128	C	LEU	D	20	-0.113	-32.289	-81.265	1.00	75.06	MOL2	C
ATOM	6129	O	LEU	D	20	-0.276	-33.122	-82.174	1.00	66.09	MOL2	O
ATOM	6130	N	SER	D	21	0.992	-31.564	-81.127	1.00	73.95	MOL2	N
ATOM	6131	CA	SER	D	21	2.104	-31.715	-82.049	1.00	72.69	MOL2	C
ATOM	6132	CB	SER	D	21	2.227	-30.478	-82.927	1.00	70.61	MOL2	C
ATOM	6133	OG	SER	D	21	2.423	-29.334	-82.123	1.00	79.90	MOL2	O
ATOM	6134	C	SER	D	21	3.412	-31.955	-81.288	1.00	71.91	MOL2	C
ATOM	6135	O	SER	D	21	3.579	-31.529	-80.139	1.00	71.22	MOL2	O
ATOM	6136	N	CYS	D	22	4.326	-32.659	-81.945	1.00	70.37	MOL2	N
ATOM	6137	CA	CYS	D	22	5.631	-32.983	-81.386	1.00	65.79	MOL2	C
ATOM	6138	C	CYS	D	22	6.688	-32.757	-82.450	1.00	57.43	MOL2	C
ATOM	6139	O	CYS	D	22	6.630	-33.341	-83.527	1.00	54.04	MOL2	O
ATOM	6140	CB	CYS	D	22	5.663	-34.443	-80.951	1.00	73.70	MOL2	C
ATOM	6141	SG	CYS	D	22	7.282	-35.006	-80.333	1.00	84.99	MOL2	S
ATOM	6142	N	ALA	D	23	7.648	-31.899	-82.155	1.00	52.00	MOL2	N
ATOM	6143	CA	ALA	D	23	8.698	-31.629	-83.117	1.00	54.76	MOL2	C
ATOM	6144	CB	ALA	D	23	9.031	-30.160	-83.132	1.00	64.70	MOL2	C
ATOM	6145	C	ALA	D	23	9.923	-32.435	-82.747	1.00	58.66	MOL2	C
ATOM	6146	O	ALA	D	23	10.476	-32.278	-81.658	1.00	64.59	MOL2	O
ATOM	6147	N	ALA	D	24	10.353	-33.296	-83.660	1.00	56.45	MOL2	N
ATOM	6148	CA	ALA	D	24	11.507	-34.144	-83.422	1.00	50.35	MOL2	C
ATOM	6149	CB	ALA	D	24	11.214	-35.531	-83.917	1.00	53.80	MOL2	C
ATOM	6150	C	ALA	D	24	12.754	-33.625	-84.097	1.00	47.82	MOL2	C
ATOM	6151	O	ALA	D	24	12.690	-32.843	-85.034	1.00	56.17	MOL2	O
ATOM	6152	N	SER	D	25	13.902	-34.072	-83.626	1.00	45.00	MOL2	N
ATOM	6153	CA	SER	D	25	15.161	-33.661	-84.227	1.00	44.92	MOL2	C
ATOM	6154	CB	SER	D	25	15.457	-32.185	-83.964	1.00	35.52	MOL2	C
ATOM	6155	OG	SER	D	25	16.204	-32.031	-82.768	1.00	42.35	MOL2	O
ATOM	6156	C	SER	D	25	16.267	-34.505	-83.636	1.00	47.14	MOL2	C
ATOM	6157	O	SER	D	25	16.072	-35.179	-82.627	1.00	56.46	MOL2	O
ATOM	6158	N	GLY	D	26	17.433	-34.464	-84.259	1.00	43.68	MOL2	N
ATOM	6159	CA	GLY	D	26	18.537	-35.247	-83.757	1.00	46.50	MOL2	C
ATOM	6160	C	GLY	D	26	18.520	-36.681	-84.252	1.00	43.78	MOL2	C
ATOM	6161	O	GLY	D	26	19.283	-37.508	-83.763	1.00	45.34	MOL2	O
ATOM	6162	N	PHE	D	27	17.650	-36.992	-85.205	1.00	38.63	MOL2	N
ATOM	6163	CA	PHE	D	27	17.612	-38.343	-85.746	1.00	39.22	MOL2	C
ATOM	6164	CB	PHE	D	27	17.191	-39.314	-84.669	1.00	24.50	MOL2	C
ATOM	6165	CG	PHE	D	27	15.738	-39.268	-84.334	1.00	28.38	MOL2	C
ATOM	6166	CD1	PHE	D	27	14.876	-40.235	-84.822	1.00	27.26	MOL2	C
ATOM	6167	CD2	PHE	D	27	15.239	-38.304	-83.474	1.00	36.41	MOL2	C
ATOM	6168	CE1	PHE	D	27	13.552	-40.243	-84.451	1.00	30.72	MOL2	C
ATOM	6169	CE2	PHE	D	27	13.900	-38.304	-83.094	1.00	31.86	MOL2	C
ATOM	6170	CZ	PHE	D	27	13.060	-39.271	-83.579	1.00	32.53	MOL2	C
ATOM	6171	C	PHE	D	27	16.738	-38.508	-86.983	1.00	46.31	MOL2	C
ATOM	6172	O	PHE	D	27	15.866	-37.676	-87.273	1.00	52.97	MOL2	O
ATOM	6173	N	THR	D	28	16.964	-39.574	-87.740	1.00	46.42	MOL2	N
ATOM	6174	CA	THR	D	28	16.165	-39.706	-88.940	1.00	53.33	MOL2	C
ATOM	6175	CB	THR	D	28	16.824	-40.642	-89.998	1.00	52.12	MOL2	C
ATOM	6176	OG1	THR	D	28	16.286	-41.959	-89.886	1.00	62.36	MOL2	O
ATOM	6177	CG2	THR	D	28	18.345	-40.660	-89.824	1.00	46.59	MOL2	C
ATOM	6178	C	THR	D	28	14.748	-40.133	-88.596	1.00	51.79	MOL2	C
ATOM	6179	O	THR	D	28	14.407	-41.313	-88.553	1.00	48.04	MOL2	O
ATOM	6180	N	PHE	D	29	13.929	-39.117	-88.348	1.00	53.46	MOL2	N
ATOM	6181	CA	PHE	D	29	12.531	-39.278	-87.979	1.00	54.72	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6182	CB	PHE	D	29	11.881	-37.895	-87.926	1.00	62.47	MOL2	C
ATOM	6183	CG	PHE	D	29	10.451	-37.898	-87.455	1.00	66.59	MOL2	C
ATOM	6184	CD1	PHE	D	29	9.420	-38.253	-88.310	1.00	68.36	MOL2	C
ATOM	6185	CD2	PHE	D	29	10.143	-37.514	-86.164	1.00	66.24	MOL2	C
ATOM	6186	CE1	PHE	D	29	8.118	-38.219	-87.890	1.00	68.35	MOL2	C
ATOM	6187	CE2	PHE	D	29	8.849	-37.480	-85.738	1.00	68.10	MOL2	C
ATOM	6188	CZ	PHE	D	29	7.830	-37.832	-86.603	1.00	73.32	MOL2	C
ATOM	6189	C	PHE	D	29	11.759	-40.183	-88.928	1.00	54.82	MOL2	C
ATOM	6190	O	PHE	D	29	11.075	-41.110	-88.506	1.00	48.52	MOL2	O
ATOM	6191	N	SER	D	30	11.876	-39.900	-90.218	1.00	60.43	MOL2	N
ATOM	6192	CA	SER	D	30	11.183	-40.659	-91.253	1.00	60.64	MOL2	C
ATOM	6193	CB	SER	D	30	11.528	-40.087	-92.625	1.00	60.73	MOL2	C
ATOM	6194	OG	SER	D	30	12.897	-40.295	-92.920	1.00	59.38	MOL2	O
ATOM	6195	C	SER	D	30	11.539	-42.135	-91.243	1.00	60.18	MOL2	C
ATOM	6196	O	SER	D	30	11.050	-42.898	-92.070	1.00	56.89	MOL2	O
ATOM	6197	N	ASP	D	31	12.391	-42.539	-90.311	1.00	60.72	MOL2	N
ATOM	6198	CA	ASP	D	31	12.809	-43.926	-90.263	1.00	59.43	MOL2	C
ATOM	6199	CB	ASP	D	31	14.328	-44.025	-90.173	1.00	61.21	MOL2	C
ATOM	6200	CG	ASP	D	31	14.944	-44.592	-91.432	1.00	68.54	MOL2	C
ATOM	6201	OD1	ASP	D	31	14.563	-45.722	-91.815	1.00	78.88	MOL2	O
ATOM	6202	OD2	ASP	D	31	15.801	-43.916	-92.040	1.00	68.22	MOL2	O
ATOM	6203	C	ASP	D	31	12.209	-44.732	-89.151	1.00	57.94	MOL2	C
ATOM	6204	O	ASP	D	31	12.081	-45.941	-89.272	1.00	59.54	MOL2	O
ATOM	6205	N	TYR	D	32	11.822	-44.070	-88.074	1.00	57.77	MOL2	N
ATOM	6206	CA	TYR	D	32	11.280	-44.769	-86.925	1.00	57.85	MOL2	C
ATOM	6207	CB	TYR	D	32	12.081	-44.358	-85.689	1.00	55.56	MOL2	C
ATOM	6208	CG	TYR	D	32	13.524	-44.813	-85.736	1.00	57.47	MOL2	C
ATOM	6209	CD1	TYR	D	32	14.485	-44.106	-86.443	1.00	58.58	MOL2	C
ATOM	6210	CE1	TYR	D	32	15.775	-44.593	-86.560	1.00	62.62	MOL2	C
ATOM	6211	CD2	TYR	D	32	13.901	-46.006	-85.139	1.00	55.62	MOL2	C
ATOM	6212	CE2	TYR	D	32	15.166	-46.490	-85.246	1.00	51.87	MOL2	C
ATOM	6213	CZ	TYR	D	32	16.103	-45.799	-85.961	1.00	63.39	MOL2	C
ATOM	6214	OH	TYR	D	32	17.347	-46.371	-86.130	1.00	70.01	MOL2	O
ATOM	6215	C	TYR	D	32	9.796	-44.556	-86.663	1.00	60.28	MOL2	C
ATOM	6216	O	TYR	D	32	9.220	-43.567	-87.096	1.00	66.37	MOL2	O
ATOM	6217	N	ASN	D	33	9.176	-45.493	-85.953	1.00	60.37	MOL2	N
ATOM	6218	CA	ASN	D	33	7.769	-45.367	-85.596	1.00	56.47	MOL2	C
ATOM	6219	CB	ASN	D	33	7.224	-46.708	-85.112	1.00	56.79	MOL2	C
ATOM	6220	CG	ASN	D	33	7.470	-47.815	-86.109	1.00	66.86	MOL2	C
ATOM	6221	OD1	ASN	D	33	8.551	-47.901	-86.684	1.00	78.81	MOL2	O
ATOM	6222	ND2	ASN	D	33	6.476	-48.671	-86.321	1.00	68.08	MOL2	N
ATOM	6223	C	ASN	D	33	7.728	-44.362	-84.459	1.00	53.80	MOL2	C
ATOM	6224	O	ASN	D	33	8.735	-44.112	-83.810	1.00	58.25	MOL2	O
ATOM	6225	N	MET	D	34	6.574	-43.772	-84.212	1.00	50.73	MOL2	N
ATOM	6226	CA	MET	D	34	6.474	-42.811	-83.127	1.00	50.71	MOL2	C
ATOM	6227	CB	MET	D	34	6.370	-41.407	-83.686	1.00	53.02	MOL2	C
ATOM	6228	CG	MET	D	34	7.641	-40.933	-84.344	1.00	52.86	MOL2	C
ATOM	6229	SD	MET	D	34	8.901	-40.768	-83.107	1.00	49.81	MOL2	S
ATOM	6230	CE	MET	D	34	8.706	-39.069	-82.552	1.00	51.28	MOL2	C
ATOM	6231	C	MET	D	34	5.248	-43.134	-82.321	1.00	47.40	MOL2	C
ATOM	6232	O	MET	D	34	4.383	-43.860	-82.792	1.00	49.62	MOL2	O
ATOM	6233	N	ALA	D	35	5.168	-42.618	-81.104	1.00	42.59	MOL2	N
ATOM	6234	CA	ALA	D	35	3.997	-42.901	-80.289	1.00	44.94	MOL2	C
ATOM	6235	CB	ALA	D	35	4.106	-44.285	-79.657	1.00	32.32	MOL2	C
ATOM	6236	C	ALA	D	35	3.711	-41.866	-79.214	1.00	46.03	MOL2	C
ATOM	6237	O	ALA	D	35	4.533	-40.981	-78.906	1.00	40.89	MOL2	O
ATOM	6238	N	TRP	D	36	2.506	-41.967	-78.669	1.00	44.59	MOL2	N
ATOM	6239	CA	TRP	D	36	2.094	-41.069	-77.618	1.00	44.38	MOL2	C
ATOM	6240	CB	TRP	D	36	0.825	-40.306	-78.000	1.00	38.84	MOL2	C
ATOM	6241	CG	TRP	D	36	1.033	-39.334	-79.074	1.00	28.40	MOL2	C
ATOM	6242	CD2	TRP	D	36	1.448	-37.980	-78.919	1.00	26.98	MOL2	C
ATOM	6243	CE2	TRP	D	36	1.624	-37.449	-80.209	1.00	29.52	MOL2	C
ATOM	6244	CE3	TRP	D	36	1.697	-37.163	-77.811	1.00	33.21	MOL2	C
ATOM	6245	CD1	TRP	D	36	0.965	-39.571	-80.414	1.00	31.07	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6246	NE1	TRP	D	36	1.323	-38.444	-81.106	1.00	29.81	MOL2	N
ATOM	6247	CZ2	TRP	D	36	2.042	-36.129	-80.426	1.00	24.35	MOL2	C
ATOM	6248	CZ3	TRP	D	36	2.114	-35.854	-78.024	1.00	30.24	MOL2	C
ATOM	6249	CH2	TRP	D	36	2.281	-35.353	-79.327	1.00	27.49	MOL2	C
ATOM	6250	C	TRP	D	36	1.832	-41.944	-76.421	1.00	44.63	MOL2	C
ATOM	6251	O	TRP	D	36	1.315	-43.052	-76.551	1.00	45.46	MOL2	O
ATOM	6252	N	VAL	D	37	2.211	-41.438	-75.262	1.00	41.30	MOL2	N
ATOM	6253	CA	VAL	D	37	2.038	-42.148	-74.025	1.00	49.84	MOL2	C
ATOM	6254	CB	VAL	D	37	3.395	-42.719	-73.560	1.00	56.87	MOL2	C
ATOM	6255	CG1	VAL	D	37	3.386	-42.972	-72.067	1.00	63.23	MOL2	C
ATOM	6256	CG2	VAL	D	37	3.690	-44.006	-74.304	1.00	60.97	MOL2	C
ATOM	6257	C	VAL	D	37	1.560	-41.086	-73.064	1.00	55.18	MOL2	C
ATOM	6258	O	VAL	D	37	2.156	-40.003	-72.996	1.00	54.18	MOL2	O
ATOM	6259	N	ARG	D	38	0.473	-41.358	-72.343	1.00	58.77	MOL2	N
ATOM	6260	CA	ARG	D	38	-0.004	-40.359	-71.391	1.00	60.58	MOL2	C
ATOM	6261	CB	ARG	D	38	-1.442	-39.886	-71.682	1.00	69.17	MOL2	C
ATOM	6262	CG	ARG	D	38	-2.578	-40.905	-71.597	1.00	75.27	MOL2	C
ATOM	6263	CD	ARG	D	38	-3.921	-40.148	-71.651	1.00	85.53	MOL2	C
ATOM	6264	NE	ARG	D	38	-5.021	-40.914	-72.235	1.00	88.71	MOL2	N
ATOM	6265	CZ	ARG	D	38	-5.593	-41.964	-71.655	1.00	95.44	MOL2	C
ATOM	6266	NH1	ARG	D	38	-5.178	-42.378	-70.465	1.00	96.28	MOL2	N
ATOM	6267	NH2	ARG	D	38	-6.567	-42.615	-72.275	1.00	98.30	MOL2	N
ATOM	6268	C	ARG	D	38	0.103	-40.826	-69.967	1.00	56.56	MOL2	C
ATOM	6269	O	ARG	D	38	0.255	-42.023	-69.698	1.00	51.91	MOL2	O
ATOM	6270	N	GLN	D	39	0.028	-39.860	-69.056	1.00	53.51	MOL2	N
ATOM	6271	CA	GLN	D	39	0.139	-40.141	-67.634	1.00	55.30	MOL2	C
ATOM	6272	CB	GLN	D	39	1.582	-39.968	-67.220	1.00	55.50	MOL2	C
ATOM	6273	CG	GLN	D	39	1.860	-40.157	-65.765	1.00	53.77	MOL2	C
ATOM	6274	CD	GLN	D	39	3.308	-39.849	-65.454	1.00	63.42	MOL2	C
ATOM	6275	OE1	GLN	D	39	3.801	-38.728	-65.701	1.00	55.69	MOL2	O
ATOM	6276	NE2	GLN	D	39	4.010	-40.844	-64.922	1.00	67.76	MOL2	N
ATOM	6277	C	GLN	D	39	-0.744	-39.226	-66.796	1.00	60.85	MOL2	C
ATOM	6278	O	GLN	D	39	-0.403	-38.061	-66.559	1.00	58.46	MOL2	O
ATOM	6279	N	ALA	D	40	-1.870	-39.771	-66.338	1.00	64.05	MOL2	N
ATOM	6280	CA	ALA	D	40	-2.830	-39.028	-65.537	1.00	65.19	MOL2	C
ATOM	6281	CB	ALA	D	40	-4.008	-39.906	-65.248	1.00	71.21	MOL2	C
ATOM	6282	C	ALA	D	40	-2.197	-38.578	-64.242	1.00	68.48	MOL2	C
ATOM	6283	O	ALA	D	40	-1.424	-39.311	-63.649	1.00	74.09	MOL2	O
ATOM	6284	N	PRO	D	41	-2.531	-37.373	-63.768	1.00	73.48	MOL2	N
ATOM	6285	CD	PRO	D	41	-3.523	-36.419	-64.275	1.00	78.11	MOL2	C
ATOM	6286	CA	PRO	D	41	-1.946	-36.885	-62.517	1.00	79.78	MOL2	C
ATOM	6287	CB	PRO	D	41	-2.818	-35.687	-62.171	1.00	76.98	MOL2	C
ATOM	6288	CG	PRO	D	41	-3.152	-35.159	-63.505	1.00	81.73	MOL2	C
ATOM	6289	C	PRO	D	41	-1.926	-37.940	-61.411	1.00	83.13	MOL2	C
ATOM	6290	O	PRO	D	41	-2.927	-38.617	-61.135	1.00	85.49	MOL2	O
ATOM	6291	N	GLY	D	42	-0.762	-38.082	-60.793	1.00	80.93	MOL2	N
ATOM	6292	CA	GLY	D	42	-0.614	-39.051	-59.738	1.00	79.13	MOL2	C
ATOM	6293	C	GLY	D	42	-0.533	-40.467	-60.263	1.00	80.48	MOL2	C
ATOM	6294	O	GLY	D	42	0.230	-41.265	-59.733	1.00	89.17	MOL2	O
ATOM	6295	N	LYS	D	43	-1.297	-40.791	-61.302	1.00	76.33	MOL2	N
ATOM	6296	CA	LYS	D	43	-1.289	-42.147	-61.845	1.00	76.92	MOL2	C
ATOM	6297	CB	LYS	D	43	-2.559	-42.375	-62.669	1.00	87.60	MOL2	C
ATOM	6298	CG	LYS	D	43	-3.852	-42.332	-61.841	1.00	100.68	MOL2	C
ATOM	6299	CD	LYS	D	43	-3.882	-43.434	-60.770	1.00	111.98	MOL2	C
ATOM	6300	CE	LYS	D	43	-5.192	-43.448	-59.964	1.00	116.94	MOL2	C
ATOM	6301	NZ	LYS	D	43	-6.398	-43.856	-60.758	1.00	120.34	MOL2	N
ATOM	6302	C	LYS	D	43	-0.046	-42.572	-62.650	1.00	71.83	MOL2	C
ATOM	6303	O	LYS	D	43	0.917	-41.806	-62.805	1.00	65.21	MOL2	O
ATOM	6304	N	GLY	D	44	-0.083	-43.809	-63.147	1.00	67.68	MOL2	N
ATOM	6305	CA	GLY	D	44	1.027	-44.366	-63.905	1.00	68.58	MOL2	C
ATOM	6306	C	GLY	D	44	1.138	-43.967	-65.367	1.00	69.48	MOL2	C
ATOM	6307	O	GLY	D	44	0.738	-42.867	-65.756	1.00	74.59	MOL2	O
ATOM	6308	N	LEU	D	45	1.688	-44.858	-66.187	1.00	64.01	MOL2	N
ATOM	6309	CA	LEU	D	45	1.852	-44.557	-67.603	1.00	60.60	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6310	CB	LEU	D	45	3.320	-44.748	-68.025	1.00	54.13	MOL2	C
ATOM	6311	CG	LEU	D	45	4.370	-43.830	-67.366	1.00	53.54	MOL2	C
ATOM	6312	CD1	LEU	D	45	5.787	-44.216	-67.791	1.00	44.54	MOL2	C
ATOM	6313	CD2	LEU	D	45	4.097	-42.397	-67.738	1.00	41.93	MOL2	C
ATOM	6314	C	LEU	D	45	0.938	-45.426	-68.453	1.00	64.12	MOL2	C
ATOM	6315	O	LEU	D	45	0.864	-46.641	-68.263	1.00	69.15	MOL2	O
ATOM	6316	N	GLU	D	46	0.235	-44.786	-69.382	1.00	64.42	MOL2	N
ATOM	6317	CA	GLU	D	46	-0.688	-45.471	-70.275	1.00	64.76	MOL2	C
ATOM	6318	CB	GLU	D	46	-2.119	-44.975	-70.049	1.00	71.52	MOL2	C
ATOM	6319	CG	GLU	D	46	-2.683	-45.278	-68.676	1.00	89.62	MOL2	C
ATOM	6320	CD	GLU	D	46	-3.848	-44.373	-68.310	1.00	100.48	MOL2	C
ATOM	6321	OE1	GLU	D	46	-4.866	-44.380	-69.042	1.00	101.04	MOL2	O
ATOM	6322	OE2	GLU	D	46	-3.739	-43.654	-67.284	1.00	108.36	MOL2	O
ATOM	6323	C	GLU	D	46	-0.286	-45.152	-71.694	1.00	62.81	MOL2	C
ATOM	6324	O	GLU	D	46	-0.028	-43.995	-72.031	1.00	55.53	MOL2	O
ATOM	6325	N	TRP	D	47	-0.226	-46.173	-72.535	1.00	65.54	MOL2	N
ATOM	6326	CA	TRP	D	47	0.124	-45.927	-73.917	1.00	65.61	MOL2	C
ATOM	6327	CB	TRP	D	47	0.730	-47.159	-74.551	1.00	62.17	MOL2	C
ATOM	6328	CG	TRP	D	47	0.787	-47.004	-76.002	1.00	65.07	MOL2	C
ATOM	6329	CD2	TRP	D	47	0.012	-47.719	-76.961	1.00	70.61	MOL2	C
ATOM	6330	CE2	TRP	D	47	0.336	-47.205	-78.225	1.00	72.82	MOL2	C
ATOM	6331	CE3	TRP	D	47	-0.929	-48.747	-76.873	1.00	74.31	MOL2	C
ATOM	6332	CD1	TRP	D	47	1.533	-46.109	-76.698	1.00	67.74	MOL2	C
ATOM	6333	NE1	TRP	D	47	1.270	-46.220	-78.040	1.00	73.44	MOL2	N
ATOM	6334	CZ2	TRP	D	47	-0.247	-47.683	-79.390	1.00	79.25	MOL2	C
ATOM	6335	CZ3	TRP	D	47	-1.504	-49.220	-78.031	1.00	75.33	MOL2	C
ATOM	6336	CH2	TRP	D	47	-1.163	-48.689	-79.272	1.00	78.23	MOL2	C
ATOM	6337	C	TRP	D	47	-1.112	-45.509	-74.709	1.00	67.66	MOL2	C
ATOM	6338	O	TRP	D	47	-2.158	-46.149	-74.642	1.00	72.85	MOL2	O
ATOM	6339	N	VAL	D	48	-0.988	-44.424	-75.457	1.00	65.33	MOL2	N
ATOM	6340	CA	VAL	D	48	-2.090	-43.923	-76.259	1.00	58.35	MOL2	C
ATOM	6341	CB	VAL	D	48	-1.967	-42.418	-76.437	1.00	54.66	MOL2	C
ATOM	6342	CG1	VAL	D	48	-2.995	-41.931	-77.412	1.00	49.86	MOL2	C
ATOM	6343	CG2	VAL	D	48	-2.119	-41.729	-75.091	1.00	57.15	MOL2	C
ATOM	6344	C	VAL	D	48	-2.122	-44.572	-77.637	1.00	61.39	MOL2	C
ATOM	6345	O	VAL	D	48	-2.918	-45.473	-77.888	1.00	64.06	MOL2	O
ATOM	6346	N	ALA	D	49	-1.254	-44.118	-78.531	1.00	63.57	MOL2	N
ATOM	6347	CA	ALA	D	49	-1.217	-44.668	-79.878	1.00	67.27	MOL2	C
ATOM	6348	CB	ALA	D	49	-2.186	-43.930	-80.753	1.00	67.63	MOL2	C
ATOM	6349	C	ALA	D	49	0.168	-44.580	-80.485	1.00	71.79	MOL2	C
ATOM	6350	O	ALA	D	49	1.030	-43.847	-79.995	1.00	73.85	MOL2	O
ATOM	6351	N	THR	D	50	0.369	-45.339	-81.558	1.00	72.05	MOL2	N
ATOM	6352	CA	THR	D	50	1.636	-45.349	-82.277	1.00	70.38	MOL2	C
ATOM	6353	CB	THR	D	50	2.541	-46.560	-81.866	1.00	70.10	MOL2	C
ATOM	6354	OG1	THR	D	50	3.552	-46.738	-82.861	1.00	83.42	MOL2	O
ATOM	6355	CG2	THR	D	50	1.760	-47.853	-81.757	1.00	64.64	MOL2	C
ATOM	6356	C	THR	D	50	1.370	-45.390	-83.786	1.00	66.34	MOL2	C
ATOM	6357	O	THR	D	50	0.409	-46.007	-84.228	1.00	72.25	MOL2	O
ATOM	6358	N	ILE	D	51	2.211	-44.715	-84.561	1.00	60.82	MOL2	N
ATOM	6359	CA	ILE	D	51	2.089	-44.659	-86.018	1.00	59.66	MOL2	C
ATOM	6360	CB	ILE	D	51	1.791	-43.226	-86.488	1.00	59.51	MOL2	C
ATOM	6361	CG2	ILE	D	51	2.830	-42.257	-85.943	1.00	45.70	MOL2	C
ATOM	6362	CG1	ILE	D	51	1.813	-43.161	-88.009	1.00	57.26	MOL2	C
ATOM	6363	CD1	ILE	D	51	1.666	-41.750	-88.529	1.00	60.49	MOL2	C
ATOM	6364	C	ILE	D	51	3.424	-45.079	-86.605	1.00	63.20	MOL2	C
ATOM	6365	O	ILE	D	51	4.465	-44.721	-86.055	1.00	72.07	MOL2	O
ATOM	6366	N	THR	D	52	3.429	-45.809	-87.717	1.00	58.77	MOL2	N
ATOM	6367	CA	THR	D	52	4.711	-46.242	-88.267	1.00	64.58	MOL2	C
ATOM	6368	CB	THR	D	52	4.577	-47.476	-89.140	1.00	67.42	MOL2	C
ATOM	6369	OG1	THR	D	52	4.114	-47.086	-90.435	1.00	79.19	MOL2	O
ATOM	6370	CG2	THR	D	52	3.609	-48.463	-88.516	1.00	68.84	MOL2	C
ATOM	6371	C	THR	D	52	5.469	-45.195	-89.067	1.00	67.67	MOL2	C
ATOM	6372	O	THR	D	52	4.945	-44.136	-89.384	1.00	73.88	MOL2	O
ATOM	6373	N	TYR	D	53	6.715	-45.508	-89.396	1.00	73.17	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	6374	CA	TYR	D	53	7.584	-44.595	-90.133	1.00	81.30	MOL2	C
ATOM	6375	CB	TYR	D	53	8.954	-45.247	-90.337	1.00	81.09	MOL2	C
ATOM	6376	CG	TYR	D	53	8.931	-46.494	-91.195	1.00	75.76	MOL2	C
ATOM	6377	CD1	TYR	D	53	9.213	-46.436	-92.557	1.00	69.59	MOL2	C
ATOM	6378	CE1	TYR	D	53	9.211	-47.572	-93.332	1.00	68.27	MOL2	C
ATOM	6379	CD2	TYR	D	53	8.639	-47.732	-90.639	1.00	75.59	MOL2	C
ATOM	6380	CE2	TYR	D	53	8.632	-48.874	-91.408	1.00	74.16	MOL2	C
ATOM	6381	CZ	TYR	D	53	8.921	-48.790	-92.751	1.00	73.12	MOL2	C
ATOM	6382	OH	TYR	D	53	8.936	-49.940	-93.502	1.00	77.65	MOL2	O
ATOM	6383	C	TYR	D	53	7.041	-44.130	-91.478	1.00	86.35	MOL2	C
ATOM	6384	O	TYR	D	53	7.011	-42.931	-91.763	1.00	85.84	MOL2	O
ATOM	6385	N	GLU	D	54	6.636	-45.090	-92.305	1.00	92.68	MOL2	N
ATOM	6386	CA	GLU	D	54	6.086	-44.825	-93.633	1.00	95.67	MOL2	C
ATOM	6387	CB	GLU	D	54	5.591	-46.135	-94.237	1.00	98.17	MOL2	C
ATOM	6388	CG	GLU	D	54	4.537	-46.831	-93.382	1.00	103.97	MOL2	C
ATOM	6389	CD	GLU	D	54	4.883	-48.285	-93.112	1.00	112.26	MOL2	C
ATOM	6390	OE1	GLU	D	54	4.140	-48.960	-92.361	1.00	114.82	MOL2	O
ATOM	6391	OE2	GLU	D	54	5.904	-48.756	-93.658	1.00	115.58	MOL2	O
ATOM	6392	C	GLU	D	54	4.917	-43.858	-93.508	1.00	95.71	MOL2	C
ATOM	6393	O	GLU	D	54	4.665	-43.033	-94.389	1.00	92.35	MOL2	O
ATOM	6394	N	GLY	D	55	4.199	-43.987	-92.399	1.00	96.32	MOL2	N
ATOM	6395	CA	GLY	D	55	3.066	-43.129	-92.141	1.00	95.86	MOL2	C
ATOM	6396	C	GLY	D	55	1.754	-43.803	-92.463	1.00	99.83	MOL2	C
ATOM	6397	O	GLY	D	55	0.706	-43.162	-92.397	1.00	100.50	MOL2	O
ATOM	6398	N	ARG	D	56	1.789	-45.086	-92.810	1.00	101.58	MOL2	N
ATOM	6399	CA	ARG	D	56	0.547	-45.768	-93.141	1.00	107.62	MOL2	C
ATOM	6400	CB	ARG	D	56	0.512	-46.141	-94.626	1.00	120.65	MOL2	C
ATOM	6401	CG	ARG	D	56	-0.912	-46.353	-95.176	1.00	134.36	MOL2	C
ATOM	6402	CD	ARG	D	56	-1.736	-45.047	-95.179	1.00	140.80	MOL2	C
ATOM	6403	NE	ARG	D	56	-3.118	-45.228	-95.637	1.00	145.28	MOL2	N
ATOM	6404	CZ	ARG	D	56	-4.144	-45.563	-94.854	1.00	146.77	MOL2	C
ATOM	6405	NH1	ARG	D	56	-3.964	-45.757	-93.549	1.00	145.89	MOL2	N
ATOM	6406	NH2	ARG	D	56	-5.357	-45.707	-95.380	1.00	144.12	MOL2	N
ATOM	6407	C	ARG	D	56	0.300	-47.002	-92.303	1.00	103.95	MOL2	C
ATOM	6408	O	ARG	D	56	0.527	-48.126	-92.748	1.00	104.42	MOL2	O
ATOM	6409	N	ASN	D	57	-0.179	-46.763	-91.088	1.00	101.45	MOL2	N
ATOM	6410	CA	ASN	D	57	-0.503	-47.800	-90.117	1.00	98.58	MOL2	C
ATOM	6411	CB	ASN	D	57	0.499	-48.949	-90.176	1.00	100.68	MOL2	C
ATOM	6412	CG	ASN	D	57	-0.112	-50.208	-90.740	1.00	103.67	MOL2	C
ATOM	6413	OD1	ASN	D	57	-1.112	-50.707	-90.217	1.00	103.03	MOL2	O
ATOM	6414	ND2	ASN	D	57	0.477	-50.729	-91.816	1.00	102.70	MOL2	N
ATOM	6415	C	ASN	D	57	-0.518	-47.216	-88.718	1.00	94.68	MOL2	C
ATOM	6416	O	ASN	D	57	0.530	-46.956	-88.128	1.00	94.60	MOL2	O
ATOM	6417	N	THR	D	58	-1.718	-46.993	-88.199	1.00	90.14	MOL2	N
ATOM	6418	CA	THR	D	58	-1.873	-46.442	-86.861	1.00	90.16	MOL2	C
ATOM	6419	CB	THR	D	58	-2.844	-45.271	-86.835	1.00	89.77	MOL2	C
ATOM	6420	OG1	THR	D	58	-4.171	-45.757	-87.075	1.00	86.89	MOL2	O
ATOM	6421	CG2	THR	D	58	-2.465	-44.246	-87.890	1.00	89.64	MOL2	C
ATOM	6422	C	THR	D	58	-2.457	-47.535	-85.992	1.00	91.44	MOL2	C
ATOM	6423	O	THR	D	58	-3.041	-48.484	-86.517	1.00	92.68	MOL2	O
ATOM	6424	N	TYR	D	59	-2.319	-47.419	-84.671	1.00	91.79	MOL2	N
ATOM	6425	CA	TYR	D	59	-2.869	-48.461	-83.822	1.00	92.64	MOL2	C
ATOM	6426	CB	TYR	D	59	-1.749	-49.320	-83.269	1.00	91.25	MOL2	C
ATOM	6427	CG	TYR	D	59	-1.160	-50.188	-84.359	1.00	94.38	MOL2	C
ATOM	6428	CD1	TYR	D	59	-0.217	-49.680	-85.243	1.00	95.77	MOL2	C
ATOM	6429	CE1	TYR	D	59	0.300	-50.450	-86.269	1.00	96.30	MOL2	C
ATOM	6430	CD2	TYR	D	59	-1.576	-51.501	-84.532	1.00	93.99	MOL2	C
ATOM	6431	CE2	TYR	D	59	-1.065	-52.281	-85.557	1.00	99.36	MOL2	C
ATOM	6432	CZ	TYR	D	59	-0.123	-51.749	-86.424	1.00	99.00	MOL2	C
ATOM	6433	OH	TYR	D	59	0.409	-52.514	-87.443	1.00	99.74	MOL2	O
ATOM	6434	C	TYR	D	59	-3.867	-48.102	-82.735	1.00	93.37	MOL2	C
ATOM	6435	O	TYR	D	59	-4.913	-48.750	-82.641	1.00	96.61	MOL2	O
ATOM	6436	N	TYR	D	60	-3.576	-47.099	-81.915	1.00	90.48	MOL2	N
ATOM	6437	CA	TYR	D	60	-4.528	-46.683	-80.866	1.00	89.79	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6438	CB	TYR	D	60	-5.837	-46.165	-81.493	1.00	77.88	MOL2	C
ATOM	6439	CG	TYR	D	60	-5.663	-45.067	-82.515	1.00	68.52	MOL2	C
ATOM	6440	CD1	TYR	D	60	-5.633	-45.354	-83.868	1.00	64.19	MOL2	C
ATOM	6441	CE1	TYR	D	60	-5.407	-44.366	-84.798	1.00	63.93	MOL2	C
ATOM	6442	CD2	TYR	D	60	-5.469	-43.749	-82.120	1.00	66.79	MOL2	C
ATOM	6443	CE2	TYR	D	60	-5.239	-42.752	-83.046	1.00	60.35	MOL2	C
ATOM	6444	CZ	TYR	D	60	-5.206	-43.068	-84.380	1.00	62.83	MOL2	C
ATOM	6445	OH	TYR	D	60	-4.941	-42.088	-85.304	1.00	62.53	MOL2	O
ATOM	6446	C	TYR	D	60	-4.910	-47.703	-79.776	1.00	91.68	MOL2	C
ATOM	6447	O	TYR	D	60	-4.931	-48.921	-79.983	1.00	94.46	MOL2	O
ATOM	6448	N	ARG	D	61	-5.247	-47.164	-78.614	1.00	90.81	MOL2	N
ATOM	6449	CA	ARG	D	61	-5.641	-47.944	-77.457	1.00	94.73	MOL2	C
ATOM	6450	CB	ARG	D	61	-5.288	-47.146	-76.213	1.00	95.67	MOL2	C
ATOM	6451	CG	ARG	D	61	-5.768	-47.721	-74.905	1.00	100.42	MOL2	C
ATOM	6452	CD	ARG	D	61	-5.581	-46.685	-73.814	1.00	100.21	MOL2	C
ATOM	6453	NE	ARG	D	61	-5.327	-47.288	-72.515	1.00	98.24	MOL2	N
ATOM	6454	CZ	ARG	D	61	-5.114	-46.582	-71.415	1.00	101.13	MOL2	C
ATOM	6455	NH1	ARG	D	61	-5.131	-45.257	-71.476	1.00	102.89	MOL2	N
ATOM	6456	NH2	ARG	D	61	-4.876	-47.194	-70.263	1.00	101.10	MOL2	N
ATOM	6457	C	ARG	D	61	-7.144	-48.157	-77.501	1.00	101.27	MOL2	C
ATOM	6458	O	ARG	D	61	-7.882	-47.234	-77.842	1.00	106.90	MOL2	O
ATOM	6459	N	ASP	D	62	-7.614	-49.354	-77.162	1.00	104.77	MOL2	N
ATOM	6460	CA	ASP	D	62	-9.060	-49.592	-77.167	1.00	102.92	MOL2	C
ATOM	6461	CB	ASP	D	62	-9.385	-51.071	-76.934	1.00	108.77	MOL2	C
ATOM	6462	CG	ASP	D	62	-9.107	-51.927	-78.159	1.00	118.71	MOL2	C
ATOM	6463	OD1	ASP	D	62	-9.686	-51.635	-79.231	1.00	121.33	MOL2	O
ATOM	6464	OD2	ASP	D	62	-8.312	-52.888	-78.054	1.00	122.02	MOL2	O
ATOM	6465	C	ASP	D	62	-9.693	-48.752	-76.074	1.00	97.24	MOL2	C
ATOM	6466	O	ASP	D	62	-10.092	-49.275	-75.042	1.00	98.94	MOL2	O
ATOM	6467	N	SER	D	63	-9.770	-47.447	-76.308	1.00	92.08	MOL2	N
ATOM	6468	CA	SER	D	63	-10.346	-46.514	-75.345	1.00	90.99	MOL2	C
ATOM	6469	CB	SER	D	63	-9.567	-46.522	-74.033	1.00	93.68	MOL2	C
ATOM	6470	OG	SER	D	63	-9.989	-45.447	-73.210	1.00	93.02	MOL2	O
ATOM	6471	C	SER	D	63	-10.358	-45.096	-75.880	1.00	90.23	MOL2	C
ATOM	6472	O	SER	D	63	-10.830	-44.174	-75.211	1.00	87.81	MOL2	O
ATOM	6473	N	VAL	D	64	-9.798	-44.919	-77.071	1.00	89.75	MOL2	N
ATOM	6474	CA	VAL	D	64	-9.780	-43.613	-77.718	1.00	88.97	MOL2	C
ATOM	6475	CB	VAL	D	64	-8.539	-42.757	-77.355	1.00	79.69	MOL2	C
ATOM	6476	CG1	VAL	D	64	-8.510	-42.484	-75.875	1.00	78.62	MOL2	C
ATOM	6477	CG2	VAL	D	64	-7.283	-43.444	-77.803	1.00	80.89	MOL2	C
ATOM	6478	C	VAL	D	64	-9.799	-43.810	-79.216	1.00	92.31	MOL2	C
ATOM	6479	O	VAL	D	64	-9.427	-42.912	-79.970	1.00	93.73	MOL2	O
ATOM	6480	N	LYS	D	65	-10.231	-44.991	-79.646	1.00	95.44	MOL2	N
ATOM	6481	CA	LYS	D	65	-10.302	-45.274	-81.068	1.00	104.70	MOL2	C
ATOM	6482	CB	LYS	D	65	-10.561	-46.767	-81.295	1.00	110.03	MOL2	C
ATOM	6483	CG	LYS	D	65	-10.427	-47.214	-82.750	1.00	120.86	MOL2	C
ATOM	6484	CD	LYS	D	65	-10.767	-48.697	-82.898	1.00	131.56	MOL2	C
ATOM	6485	CE	LYS	D	65	-10.699	-49.167	-84.351	1.00	134.98	MOL2	C
ATOM	6486	NZ	LYS	D	65	-11.066	-50.612	-84.486	1.00	134.04	MOL2	N
ATOM	6487	C	LYS	D	65	-11.423	-44.420	-81.677	1.00	107.60	MOL2	C
ATOM	6488	O	LYS	D	65	-12.437	-44.143	-81.025	1.00	106.75	MOL2	O
ATOM	6489	N	GLY	D	66	-11.227	-43.987	-82.920	1.00	108.89	MOL2	N
ATOM	6490	CA	GLY	D	66	-12.226	-43.163	-83.579	1.00	108.07	MOL2	C
ATOM	6491	C	GLY	D	66	-12.202	-41.732	-83.069	1.00	108.09	MOL2	C
ATOM	6492	O	GLY	D	66	-12.325	-40.778	-83.853	1.00	111.82	MOL2	O
ATOM	6493	N	ARG	D	67	-12.031	-41.583	-81.756	1.00	100.42	MOL2	N
ATOM	6494	CA	ARG	D	67	-11.997	-40.271	-81.119	1.00	96.02	MOL2	C
ATOM	6495	CB	ARG	D	67	-12.311	-40.427	-79.633	1.00	92.86	MOL2	C
ATOM	6496	CG	ARG	D	67	-12.980	-41.756	-79.325	1.00	93.72	MOL2	C
ATOM	6497	CD	ARG	D	67	-13.668	-41.794	-77.965	1.00	97.60	MOL2	C
ATOM	6498	NE	ARG	D	67	-12.752	-41.696	-76.830	1.00	100.96	MOL2	N
ATOM	6499	CZ	ARG	D	67	-12.272	-40.556	-76.340	1.00	102.31	MOL2	C
ATOM	6500	NH1	ARG	D	67	-11.443	-40.583	-75.301	1.00	95.79	MOL2	N
ATOM	6501	NH2	ARG	D	67	-12.624	-39.392	-76.879	1.00	99.79	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	6502	C	ARG	D	67	-10.643	-39.592	-81.313	1.00	97.11	MOL2	C
ATOM	6503	O	ARG	D	67	-10.574	-38.372	-81.491	1.00	96.74	MOL2	O
ATOM	6504	N	PHE	D	68	-9.573	-40.387	-81.280	1.00	95.76	MOL2	N
ATOM	6505	CA	PHE	D	68	-8.216	-39.876	-81.464	1.00	92.42	MOL2	C
ATOM	6506	CB	PHE	D	68	-7.263	-40.475	-80.427	1.00	91.66	MOL2	C
ATOM	6507	CG	PHE	D	68	-7.269	-39.756	-79.106	1.00	93.60	MOL2	C
ATOM	6508	CD1	PHE	D	68	-7.987	-38.589	-78.939	1.00	91.22	MOL2	C
ATOM	6509	CD2	PHE	D	68	-6.535	-40.239	-78.035	1.00	94.01	MOL2	C
ATOM	6510	CE1	PHE	D	68	-7.970	-37.924	-77.735	1.00	88.23	MOL2	C
ATOM	6511	CE2	PHE	D	68	-6.517	-39.571	-76.828	1.00	90.67	MOL2	C
ATOM	6512	CZ	PHE	D	68	-7.234	-38.413	-76.681	1.00	87.13	MOL2	C
ATOM	6513	C	PHE	D	68	-7.707	-40.204	-82.857	1.00	90.96	MOL2	C
ATOM	6514	O	PHE	D	68	-8.232	-41.104	-83.523	1.00	87.76	MOL2	O
ATOM	6515	N	THR	D	69	-6.675	-39.473	-83.279	1.00	90.57	MOL2	N
ATOM	6516	CA	THR	D	69	-6.069	-39.647	-84.595	1.00	91.01	MOL2	C
ATOM	6517	CB	THR	D	69	-6.830	-38.814	-85.658	1.00	102.06	MOL2	C
ATOM	6518	OG1	THR	D	69	-8.195	-39.262	-85.735	1.00	110.64	MOL2	O
ATOM	6519	CG2	THR	D	69	-6.166	-38.948	-87.030	1.00	104.69	MOL2	C
ATOM	6520	C	THR	D	69	-4.598	-39.222	-84.595	1.00	82.97	MOL2	C
ATOM	6521	O	THR	D	69	-4.284	-38.044	-84.439	1.00	75.27	MOL2	O
ATOM	6522	N	ILE	D	70	-3.705	-40.191	-84.779	1.00	80.23	MOL2	N
ATOM	6523	CA	ILE	D	70	-2.264	-39.944	-84.799	1.00	77.34	MOL2	C
ATOM	6524	CB	ILE	D	70	-1.502	-41.109	-84.119	1.00	79.22	MOL2	C
ATOM	6525	CG2	ILE	D	70	-1.609	-42.366	-84.980	1.00	75.94	MOL2	C
ATOM	6526	CG1	ILE	D	70	-0.040	-40.718	-83.864	1.00	78.09	MOL2	C
ATOM	6527	CD1	ILE	D	70	0.751	-41.757	-83.079	1.00	70.08	MOL2	C
ATOM	6528	C	ILE	D	70	-1.770	-39.790	-86.236	1.00	75.49	MOL2	C
ATOM	6529	O	ILE	D	70	-2.178	-40.531	-87.129	1.00	74.46	MOL2	O
ATOM	6530	N	SER	D	71	-0.875	-38.836	-86.455	1.00	74.47	MOL2	N
ATOM	6531	CA	SER	D	71	-0.372	-38.586	-87.799	1.00	76.63	MOL2	C
ATOM	6532	CB	SER	D	71	-1.278	-37.584	-88.484	1.00	82.72	MOL2	C
ATOM	6533	OG	SER	D	71	-1.178	-36.331	-87.812	1.00	80.06	MOL2	O
ATOM	6534	C	SER	D	71	1.019	-37.984	-87.776	1.00	77.66	MOL2	C
ATOM	6535	O	SER	D	71	1.397	-37.343	-86.793	1.00	76.58	MOL2	O
ATOM	6536	N	ARG	D	72	1.758	-38.153	-88.875	1.00	74.37	MOL2	N
ATOM	6537	CA	ARG	D	72	3.104	-37.591	-88.979	1.00	75.79	MOL2	C
ATOM	6538	CB	ARG	D	72	4.164	-38.665	-88.730	1.00	70.15	MOL2	C
ATOM	6539	CG	ARG	D	72	4.143	-39.800	-89.717	1.00	72.34	MOL2	C
ATOM	6540	CD	ARG	D	72	4.925	-40.991	-89.201	1.00	69.56	MOL2	C
ATOM	6541	NE	ARG	D	72	6.348	-40.709	-89.071	1.00	73.65	MOL2	N
ATOM	6542	CZ	ARG	D	72	7.192	-41.476	-88.388	1.00	77.79	MOL2	C
ATOM	6543	NH1	ARG	D	72	6.746	-42.565	-87.774	1.00	77.00	MOL2	N
ATOM	6544	NH2	ARG	D	72	8.479	-41.157	-88.316	1.00	77.02	MOL2	N
ATOM	6545	C	ARG	D	72	3.351	-36.924	-90.327	1.00	79.00	MOL2	C
ATOM	6546	O	ARG	D	72	2.566	-37.088	-91.267	1.00	80.72	MOL2	O
ATOM	6547	N	ASP	D	73	4.455	-36.183	-90.410	1.00	82.17	MOL2	N
ATOM	6548	CA	ASP	D	73	4.832	-35.450	-91.615	1.00	87.06	MOL2	C
ATOM	6549	CB	ASP	D	73	5.075	-33.983	-91.238	1.00	91.76	MOL2	C
ATOM	6550	CG	ASP	D	73	4.737	-33.015	-92.363	1.00	99.70	MOL2	C
ATOM	6551	OD1	ASP	D	73	4.754	-31.786	-92.108	1.00	100.05	MOL2	O
ATOM	6552	OD2	ASP	D	73	4.457	-33.476	-93.495	1.00	101.53	MOL2	O
ATOM	6553	C	ASP	D	73	6.084	-36.020	-92.290	1.00	87.31	MOL2	C
ATOM	6554	O	ASP	D	73	6.133	-36.178	-93.509	1.00	93.87	MOL2	O
ATOM	6555	N	ASN	D	74	7.094	-36.328	-91.487	1.00	84.23	MOL2	N
ATOM	6556	CA	ASN	D	74	8.351	-36.850	-91.999	1.00	79.42	MOL2	C
ATOM	6557	CB	ASN	D	74	8.115	-37.996	-92.963	1.00	72.75	MOL2	C
ATOM	6558	CG	ASN	D	74	7.733	-39.255	-92.251	1.00	73.16	MOL2	C
ATOM	6559	OD1	ASN	D	74	7.630	-40.318	-92.853	1.00	80.95	MOL2	O
ATOM	6560	ND2	ASN	D	74	7.519	-39.146	-90.948	1.00	68.82	MOL2	N
ATOM	6561	C	ASN	D	74	9.090	-35.723	-92.677	1.00	81.64	MOL2	C
ATOM	6562	O	ASN	D	74	10.296	-35.799	-92.909	1.00	87.26	MOL2	O
ATOM	6563	N	ALA	D	75	8.345	-34.681	-93.015	1.00	77.76	MOL2	N
ATOM	6564	CA	ALA	D	75	8.923	-33.491	-93.592	1.00	76.86	MOL2	C
ATOM	6565	CB	ALA	D	75	8.681	-33.800	-94.724	1.00	71.80	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6566	C	ALA	D	75	8.761	-32.611	-92.364	1.00	84.05	MOL2	C
ATOM	6567	O	ALA	D	75	7.855	-32.850	-91.554	1.00	81.14	MOL2	O
ATOM	6568	N	LYS	D	76	9.635	-31.626	-92.195	1.00	90.91	MOL2	N
ATOM	6569	CA	LYS	D	76	9.582	-30.745	-91.021	1.00	98.36	MOL2	C
ATOM	6570	CB	LYS	D	76	8.387	-29.779	-91.114	1.00	103.87	MOL2	C
ATOM	6571	CG	LYS	D	76	8.652	-28.418	-90.455	1.00	109.13	MOL2	C
ATOM	6572	CD	LYS	D	76	7.739	-27.316	-91.012	1.00	115.11	MOL2	C
ATOM	6573	CE	LYS	D	76	8.117	-25.936	-90.450	1.00	116.96	MOL2	C
ATOM	6574	NZ	LYS	D	76	7.366	-24.796	-91.063	1.00	109.06	MOL2	N
ATOM	6575	C	LYS	D	76	9.555	-31.533	-89.690	1.00	96.32	MOL2	C
ATOM	6576	O	LYS	D	76	9.290	-30.967	-88.622	1.00	97.98	MOL2	O
ATOM	6577	N	ASN	D	77	9.832	-32.837	-89.780	1.00	90.60	MOL2	N
ATOM	6578	CA	ASN	D	77	9.923	-33.741	-88.630	1.00	80.86	MOL2	C
ATOM	6579	CB	ASN	D	77	11.292	-33.577	-87.936	1.00	86.75	MOL2	C
ATOM	6580	CG	ASN	D	77	12.456	-33.342	-88.912	1.00	87.19	MOL2	C
ATOM	6581	OD1	ASN	D	77	13.420	-32.625	-88.588	1.00	78.03	MOL2	O
ATOM	6582	ND2	ASN	D	77	12.386	-33.959	-90.091	1.00	87.81	MOL2	N
ATOM	6583	C	ASN	D	77	8.868	-33.504	-87.565	1.00	73.53	MOL2	C
ATOM	6584	O	ASN	D	77	9.196	-32.963	-86.514	1.00	76.79	MOL2	O
ATOM	6585	N	SER	D	78	7.623	-33.897	-87.786	1.00	63.94	MOL2	N
ATOM	6586	CA	SER	D	78	6.628	-33.653	-86.743	1.00	56.85	MOL2	C
ATOM	6587	CB	SER	D	78	5.863	-32.354	-87.005	1.00	59.67	MOL2	C
ATOM	6588	OG	SER	D	78	6.551	-31.227	-86.488	1.00	63.76	MOL2	O
ATOM	6589	C	SER	D	78	5.644	-34.772	-86.520	1.00	50.99	MOL2	C
ATOM	6590	O	SER	D	78	5.284	-35.496	-87.443	1.00	48.98	MOL2	O
ATOM	6591	N	LEU	D	79	5.209	-34.885	-85.272	1.00	46.07	MOL2	N
ATOM	6592	CA	LEU	D	79	4.279	-35.912	-84.849	1.00	50.82	MOL2	C
ATOM	6593	CB	LEU	D	79	4.934	-36.741	-83.755	1.00	43.72	MOL2	C
ATOM	6594	CG	LEU	D	79	4.076	-37.885	-83.244	1.00	46.89	MOL2	C
ATOM	6595	CD1	LEU	D	79	3.956	-38.948	-84.311	1.00	36.23	MOL2	C
ATOM	6596	CD2	LEU	D	79	4.702	-38.440	-81.987	1.00	54.82	MOL2	C
ATOM	6597	C	LEU	D	79	3.042	-35.221	-84.297	1.00	57.32	MOL2	C
ATOM	6598	O	LEU	D	79	3.165	-34.319	-83.467	1.00	63.41	MOL2	O
ATOM	6599	N	TYR	D	80	1.855	-35.652	-84.725	1.00	59.14	MOL2	N
ATOM	6600	CA	TYR	D	80	0.620	-35.016	-84.274	1.00	58.02	MOL2	C
ATOM	6601	CB	TYR	D	80	-0.059	-34.341	-85.453	1.00	60.14	MOL2	C
ATOM	6602	CG	TYR	D	80	0.807	-33.393	-86.229	1.00	54.99	MOL2	C
ATOM	6603	CD1	TYR	D	80	1.178	-32.170	-85.683	1.00	52.64	MOL2	C
ATOM	6604	CE1	TYR	D	80	1.939	-31.278	-86.402	1.00	59.89	MOL2	C
ATOM	6605	CD2	TYR	D	80	1.228	-33.706	-87.523	1.00	47.37	MOL2	C
ATOM	6606	CE2	TYR	D	80	1.992	-32.821	-88.252	1.00	52.27	MOL2	C
ATOM	6607	CZ	TYR	D	80	2.344	-31.603	-87.686	1.00	59.50	MOL2	C
ATOM	6608	OH	TYR	D	80	3.098	-30.691	-88.391	1.00	64.84	MOL2	O
ATOM	6609	C	TYR	D	80	-0.396	-35.957	-83.665	1.00	59.54	MOL2	C
ATOM	6610	O	TYR	D	80	-0.469	-37.137	-84.037	1.00	58.51	MOL2	O
ATOM	6611	N	LEU	D	81	-1.195	-35.416	-82.744	1.00	60.10	MOL2	N
ATOM	6612	CA	LEU	D	81	-2.271	-36.185	-82.126	1.00	67.71	MOL2	C
ATOM	6613	CB	LEU	D	81	-1.956	-36.545	-80.669	1.00	62.82	MOL2	C
ATOM	6614	CG	LEU	D	81	-2.938	-37.601	-80.125	1.00	61.33	MOL2	C
ATOM	6615	CD1	LEU	D	81	-2.759	-38.913	-80.868	1.00	45.84	MOL2	C
ATOM	6616	CD2	LEU	D	81	-2.724	-37.810	-78.642	1.00	65.24	MOL2	C
ATOM	6617	C	LEU	D	81	-3.561	-35.360	-82.184	1.00	71.66	MOL2	C
ATOM	6618	O	LEU	D	81	-3.623	-34.248	-81.641	1.00	62.04	MOL2	O
ATOM	6619	N	GLN	D	82	-4.575	-35.905	-82.865	1.00	78.53	MOL2	N
ATOM	6620	CA	GLN	D	82	-5.869	-35.236	-82.999	1.00	82.97	MOL2	C
ATOM	6621	CB	GLN	D	82	-6.431	-35.399	-84.418	1.00	88.33	MOL2	C
ATOM	6622	CG	GLN	D	82	-7.588	-34.445	-84.723	1.00	84.59	MOL2	C
ATOM	6623	CD	GLN	D	82	-7.160	-32.983	-84.694	1.00	82.81	MOL2	C
ATOM	6624	OE1	GLN	D	82	-6.554	-32.483	-85.643	1.00	87.05	MOL2	O
ATOM	6625	NE2	GLN	D	82	-7.464	-32.298	-83.599	1.00	72.36	MOL2	N
ATOM	6626	C	GLN	D	82	-6.849	-35.823	-81.992	1.00	81.23	MOL2	C
ATOM	6627	O	GLN	D	82	-7.336	-36.948	-82.150	1.00	75.67	MOL2	O
ATOM	6628	N	MET	D	83	-7.130	-35.040	-80.959	1.00	82.00	MOL2	N
ATOM	6629	CA	MET	D	83	-8.024	-35.448	-79.890	1.00	86.17	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6630	CB	MET	D	83	-7.446	-34.980	-78.541	1.00	88.02	MOL2	C
ATOM	6631	CG	MET	D	83	-6.007	-35.464	-78.206	1.00	80.98	MOL2	C
ATOM	6632	SD	MET	D	83	-5.522	-35.280	-76.425	1.00	79.63	MOL2	S
ATOM	6633	CE	MET	D	83	-4.961	-33.553	-76.357	1.00	52.91	MOL2	C
ATOM	6634	C	MET	D	83	-9.443	-34.886	-80.061	1.00	91.51	MOL2	C
ATOM	6635	O	MET	D	83	-9.687	-33.714	-79.761	1.00	87.76	MOL2	O
ATOM	6636	N	ASN	D	84	-10.370	-35.726	-80.532	1.00	96.49	MOL2	N
ATOM	6637	CA	ASN	D	84	-11.769	-35.331	-80.739	1.00	99.14	MOL2	C
ATOM	6638	CB	ASN	D	84	-12.297	-35.848	-82.084	1.00	95.82	MOL2	C
ATOM	6639	CG	ASN	D	84	-11.383	-35.533	-83.243	1.00	93.42	MOL2	C
ATOM	6640	OD1	ASN	D	84	-10.973	-34.386	-83.436	1.00	86.04	MOL2	O
ATOM	6641	ND2	ASN	D	84	-11.072	-36.554	-84.040	1.00	94.89	MOL2	N
ATOM	6642	C	ASN	D	84	-12.653	-35.927	-79.649	1.00	103.46	MOL2	C
ATOM	6643	O	ASN	D	84	-12.306	-36.954	-79.062	1.00	107.51	MOL2	O
ATOM	6644	N	SER	D	85	-13.804	-35.305	-79.398	1.00	105.03	MOL2	N
ATOM	6645	CA	SER	D	85	-14.740	-35.813	-78.392	1.00	107.26	MOL2	C
ATOM	6646	CB	SER	D	85	-15.378	-37.132	-78.866	1.00	111.39	MOL2	C
ATOM	6647	OG	SER	D	85	-16.139	-36.967	-80.052	1.00	116.59	MOL2	O
ATOM	6648	C	SER	D	85	-14.032	-36.065	-77.067	1.00	104.93	MOL2	C
ATOM	6649	O	SER	D	85	-14.312	-37.052	-76.378	1.00	105.14	MOL2	O
ATOM	6650	N	LEU	D	86	-13.113	-35.174	-76.720	1.00	99.33	MOL2	N
ATOM	6651	CA	LEU	D	86	-12.354	-35.304	-75.486	1.00	98.56	MOL2	C
ATOM	6652	CB	LEU	D	86	-11.593	-34.007	-75.189	1.00	98.51	MOL2	C
ATOM	6653	CG	LEU	D	86	-10.273	-33.733	-75.920	1.00	99.69	MOL2	C
ATOM	6654	CD1	LEU	D	86	-9.790	-32.325	-75.618	1.00	96.54	MOL2	C
ATOM	6655	CD2	LEU	D	86	-9.231	-34.743	-75.481	1.00	98.93	MOL2	C
ATOM	6656	C	LEU	D	86	-13.202	-35.643	-74.272	1.00	98.72	MOL2	C
ATOM	6657	O	LEU	D	86	-13.931	-34.790	-73.778	1.00	98.95	MOL2	O
ATOM	6658	N	ARG	D	87	-13.111	-36.883	-73.794	1.00	101.21	MOL2	N
ATOM	6659	CA	ARG	D	87	-13.843	-37.291	-72.594	1.00	101.51	MOL2	C
ATOM	6660	CB	ARG	D	87	-13.814	-38.819	-72.419	1.00	105.31	MOL2	C
ATOM	6661	CG	ARG	D	87	-14.538	-39.626	-73.504	1.00	113.87	MOL2	C
ATOM	6662	CD	ARG	D	87	-16.036	-39.755	-73.237	1.00	125.62	MOL2	C
ATOM	6663	NE	ARG	D	87	-16.714	-40.567	-74.249	1.00	134.03	MOL2	N
ATOM	6664	CZ	ARG	D	87	-18.010	-40.878	-74.227	1.00	137.45	MOL2	C
ATOM	6665	NH1	ARG	D	87	-18.788	-40.449	-73.240	1.00	138.83	MOL2	N
ATOM	6666	NH2	ARG	D	87	-18.530	-41.622	-75.196	1.00	137.42	MOL2	N
ATOM	6667	C	ARG	D	87	-13.105	-36.621	-71.428	1.00	98.36	MOL2	C
ATOM	6668	O	ARG	D	87	-12.152	-35.875	-71.640	1.00	94.50	MOL2	O
ATOM	6669	N	ALA	D	88	-13.533	-36.885	-70.202	1.00	98.54	MOL2	N
ATOM	6670	CA	ALA	D	88	-12.891	-36.278	-69.044	1.00	100.19	MOL2	C
ATOM	6671	CB	ALA	D	88	-13.930	-36.014	-67.968	1.00	103.20	MOL2	C
ATOM	6672	C	ALA	D	88	-11.786	-37.181	-68.500	1.00	101.21	MOL2	C
ATOM	6673	O	ALA	D	88	-10.823	-36.717	-67.872	1.00	95.02	MOL2	O
ATOM	6674	N	GLU	D	89	-11.938	-38.478	-68.746	1.00	100.97	MOL2	N
ATOM	6675	CA	GLU	D	89	-10.964	-39.454	-68.290	1.00	101.58	MOL2	C
ATOM	6676	CB	GLU	D	89	-11.575	-40.863	-68.315	1.00	104.95	MOL2	C
ATOM	6677	CG	GLU	D	89	-11.812	-41.452	-69.702	1.00	111.56	MOL2	C
ATOM	6678	CD	GLU	D	89	-12.453	-42.838	-69.654	1.00	117.47	MOL2	C
ATOM	6679	OE1	GLU	D	89	-12.602	-43.472	-70.724	1.00	117.62	MOL2	O
ATOM	6680	OE2	GLU	D	89	-12.813	-43.294	-68.545	1.00	120.03	MOL2	O
ATOM	6681	C	GLU	D	89	-9.718	-39.404	-69.172	1.00	100.85	MOL2	C
ATOM	6682	O	GLU	D	89	-8.835	-40.258	-69.063	1.00	104.28	MOL2	O
ATOM	6683	N	ASP	D	90	-9.648	-38.398	-70.042	1.00	96.71	MOL2	N
ATOM	6684	CA	ASP	D	90	-8.510	-38.248	-70.941	1.00	88.61	MOL2	C
ATOM	6685	CB	ASP	D	90	-8.964	-37.840	-72.340	1.00	88.20	MOL2	C
ATOM	6686	CG	ASP	D	90	-9.630	-38.978	-73.087	1.00	94.26	MOL2	C
ATOM	6687	OD1	ASP	D	90	-9.246	-40.146	-72.846	1.00	97.45	MOL2	O
ATOM	6688	OD2	ASP	D	90	-10.522	-38.707	-73.923	1.00	88.46	MOL2	O
ATOM	6689	C	ASP	D	90	-7.506	-37.237	-70.443	1.00	84.13	MOL2	C
ATOM	6690	O	ASP	D	90	-6.471	-37.051	-71.072	1.00	82.84	MOL2	O
ATOM	6691	N	THR	D	91	-7.806	-36.577	-69.323	1.00	80.97	MOL2	N
ATOM	6692	CA	THR	D	91	-6.872	-35.588	-68.770	1.00	78.78	MOL2	C
ATOM	6693	CB	THR	D	91	-7.379	-34.903	-67.480	1.00	76.06	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6694	OG1	THR	D	91	-8.269	-33.836	-67.810	1.00	74.74	MOL2	O
ATOM	6695	CG2	THR	D	91	-6.198	-34.323	-66.690	1.00	67.86	MOL2	C
ATOM	6696	C	THR	D	91	-5.568	-36.264	-68.400	1.00	80.42	MOL2	C
ATOM	6697	O	THR	D	91	-5.576	-37.339	-67.798	1.00	85.81	MOL2	O
ATOM	6698	N	ALA	D	92	-4.453	-35.624	-68.740	1.00	77.33	MOL2	N
ATOM	6699	CA	ALA	D	92	-3.137	-36.179	-68.450	1.00	73.83	MOL2	C
ATOM	6700	CB	ALA	D	92	-3.067	-37.628	-68.946	1.00	69.79	MOL2	C
ATOM	6701	C	ALA	D	92	-2.025	-35.377	-69.111	1.00	72.09	MOL2	C
ATOM	6702	O	ALA	D	92	-2.260	-34.351	-69.749	1.00	72.25	MOL2	O
ATOM	6703	N	VAL	D	93	-0.797	-35.849	-68.935	1.00	70.26	MOL2	N
ATOM	6704	CA	VAL	D	93	0.334	-35.221	-69.585	1.00	65.02	MOL2	C
ATOM	6705	CB	VAL	D	93	1.548	-35.120	-68.688	1.00	61.28	MOL2	C
ATOM	6706	CG1	VAL	D	93	2.746	-34.691	-69.522	1.00	46.91	MOL2	C
ATOM	6707	CG2	VAL	D	93	1.272	-34.123	-67.562	1.00	60.55	MOL2	C
ATOM	6708	C	VAL	D	93	0.645	-36.152	-70.744	1.00	67.42	MOL2	C
ATOM	6709	O	VAL	D	93	0.847	-37.366	-70.559	1.00	64.71	MOL2	O
ATOM	6710	N	TYR	D	94	0.643	-35.584	-71.944	1.00	65.44	MOL2	N
ATOM	6711	CA	TYR	D	94	0.886	-36.368	-73.127	1.00	61.43	MOL2	C
ATOM	6712	CB	TYR	D	94	-0.046	-35.902	-74.241	1.00	63.00	MOL2	C
ATOM	6713	CG	TYR	D	94	-1.454	-36.380	-73.983	1.00	61.43	MOL2	C
ATOM	6714	CD1	TYR	D	94	-2.186	-35.883	-72.907	1.00	58.91	MOL2	C
ATOM	6715	CE1	TYR	D	94	-3.426	-36.398	-72.586	1.00	65.56	MOL2	C
ATOM	6716	CD2	TYR	D	94	-2.008	-37.405	-74.742	1.00	62.03	MOL2	C
ATOM	6717	CE2	TYR	D	94	-3.248	-37.929	-74.433	1.00	71.17	MOL2	C
ATOM	6718	CZ	TYR	D	94	-3.954	-37.425	-73.350	1.00	74.81	MOL2	C
ATOM	6719	OH	TYR	D	94	-5.178	-37.977	-73.017	1.00	83.02	MOL2	O
ATOM	6720	C	TYR	D	94	2.337	-36.321	-73.525	1.00	59.37	MOL2	C
ATOM	6721	O	TYR	D	94	2.927	-35.244	-73.661	1.00	56.47	MOL2	O
ATOM	6722	N	TYR	D	95	2.900	-37.521	-73.672	1.00	53.66	MOL2	N
ATOM	6723	CA	TYR	D	95	4.294	-37.713	-74.021	1.00	47.62	MOL2	C
ATOM	6724	CB	TYR	D	95	4.941	-38.698	-73.068	1.00	35.07	MOL2	C
ATOM	6725	CG	TYR	D	95	5.205	-38.152	-71.705	1.00	29.66	MOL2	C
ATOM	6726	CD1	TYR	D	95	4.568	-38.696	-70.588	1.00	29.99	MOL2	C
ATOM	6727	CE1	TYR	D	95	4.810	-38.205	-69.309	1.00	27.04	MOL2	C
ATOM	6728	CD2	TYR	D	95	6.093	-37.099	-71.519	1.00	20.23	MOL2	C
ATOM	6729	CE2	TYR	D	95	6.340	-36.601	-70.251	1.00	29.21	MOL2	C
ATOM	6730	CZ	TYR	D	95	5.696	-37.161	-69.147	1.00	31.88	MOL2	C
ATOM	6731	OH	TYR	D	95	5.936	-36.691	-67.878	1.00	39.95	MOL2	O
ATOM	6732	C	TYR	D	95	4.530	-38.223	-75.423	1.00	51.77	MOL2	C
ATOM	6733	O	TYR	D	95	3.817	-39.092	-75.924	1.00	57.51	MOL2	O
ATOM	6734	N	CYS	D	96	5.578	-37.693	-76.029	1.00	50.26	MOL2	N
ATOM	6735	CA	CYS	D	96	5.999	-38.064	-77.363	1.00	51.95	MOL2	C
ATOM	6736	C	CYS	D	96	7.170	-39.032	-77.135	1.00	50.54	MOL2	C
ATOM	6737	O	CYS	D	96	8.108	-38.704	-76.403	1.00	49.17	MOL2	O
ATOM	6738	CB	CYS	D	96	6.470	-36.799	-78.065	1.00	59.27	MOL2	C
ATOM	6739	SG	CYS	D	96	6.930	-36.942	-79.815	1.00	80.95	MOL2	S
ATOM	6740	N	ALA	D	97	7.133	-40.213	-77.747	1.00	45.76	MOL2	N
ATOM	6741	CA	ALA	D	97	8.209	-41.179	-77.532	1.00	41.80	MOL2	C
ATOM	6742	CB	ALA	D	97	7.745	-42.221	-76.546	1.00	46.21	MOL2	C
ATOM	6743	C	ALA	D	97	8.737	-41.873	-78.784	1.00	45.59	MOL2	C
ATOM	6744	O	ALA	D	97	7.963	-42.456	-79.565	1.00	46.25	MOL2	O
ATOM	6745	N	SER	D	98	10.063	-41.849	-78.946	1.00	42.44	MOL2	N
ATOM	6746	CA	SER	D	98	10.723	-42.464	-80.103	1.00	40.03	MOL2	C
ATOM	6747	CB	SER	D	98	11.696	-41.479	-80.693	1.00	42.55	MOL2	C
ATOM	6748	OG	SER	D	98	12.374	-40.862	-79.623	1.00	54.54	MOL2	O
ATOM	6749	C	SER	D	98	11.489	-43.703	-79.737	1.00	36.36	MOL2	C
ATOM	6750	O	SER	D	98	11.851	-43.895	-78.594	1.00	42.91	MOL2	O
ATOM	6751	N	PRO	D	99	11.761	-44.566	-80.709	1.00	37.36	MOL2	N
ATOM	6752	CD	PRO	D	99	11.268	-44.578	-82.092	1.00	34.42	MOL2	C
ATOM	6753	CA	PRO	D	99	12.510	-45.782	-80.401	1.00	42.07	MOL2	C
ATOM	6754	CB	PRO	D	99	12.008	-46.751	-81.457	1.00	39.85	MOL2	C
ATOM	6755	CG	PRO	D	99	11.850	-45.873	-82.636	1.00	38.08	MOL2	C
ATOM	6756	C	PRO	D	99	14.019	-45.483	-80.490	1.00	47.47	MOL2	C
ATOM	6757	O	PRO	D	99	14.419	-44.382	-80.884	1.00	49.75	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	6758	N	PRO	D	100	14.867	-46.455	-80.122	1.00	47.56	MOL2	N
ATOM	6759	CD	PRO	D	100	14.434	-47.833	-79.853	1.00	50.64	MOL2	C
ATOM	6760	CA	PRO	D	100	16.332	-46.377	-80.119	1.00	48.54	MOL2	C
ATOM	6761	CB	PRO	D	100	16.726	-47.700	-79.508	1.00	49.03	MOL2	C
ATOM	6762	CG	PRO	D	100	15.697	-48.606	-80.077	1.00	52.38	MOL2	C
ATOM	6763	C	PRO	D	100	16.981	-46.170	-81.482	1.00	50.59	MOL2	C
ATOM	6764	O	PRO	D	100	16.611	-46.807	-82.455	1.00	50.59	MOL2	O
ATOM	6765	N	GLN	D	101	17.964	-45.278	-81.522	1.00	56.02	MOL2	N
ATOM	6766	CA	GLN	D	101	18.681	-44.943	-82.736	1.00	52.49	MOL2	C
ATOM	6767	CB	GLN	D	101	19.703	-43.823	-82.468	1.00	66.20	MOL2	C
ATOM	6768	CG	GLN	D	101	19.377	-42.834	-81.318	1.00	81.01	MOL2	C
ATOM	6769	CD	GLN	D	101	19.949	-43.253	-79.927	1.00	90.03	MOL2	C
ATOM	6770	OE1	GLN	D	101	19.424	-44.154	-79.252	1.00	80.73	MOL2	O
ATOM	6771	NE2	GLN	D	101	21.027	-42.585	-79.509	1.00	89.51	MOL2	N
ATOM	6772	C	GLN	D	101	19.382	-46.181	-83.304	1.00	53.84	MOL2	C
ATOM	6773	O	GLN	D	101	19.583	-46.257	-84.512	1.00	56.95	MOL2	O
ATOM	6774	N	TYR	D	102	19.798	-47.138	-82.467	1.00	56.67	MOL2	N
ATOM	6775	CA	TYR	D	102	20.401	-48.368	-83.025	1.00	59.06	MOL2	C
ATOM	6776	CB	TYR	D	102	21.317	-49.135	-82.038	1.00	53.29	MOL2	C
ATOM	6777	CG	TYR	D	102	20.971	-49.019	-80.563	1.00	60.79	MOL2	C
ATOM	6778	CD1	TYR	D	102	20.040	-49.865	-79.978	1.00	58.44	MOL2	C
ATOM	6779	CE1	TYR	D	102	19.629	-49.684	-78.670	1.00	55.09	MOL2	C
ATOM	6780	CD2	TYR	D	102	21.500	-47.992	-79.781	1.00	57.34	MOL2	C
ATOM	6781	CE2	TYR	D	102	21.092	-47.803	-78.474	1.00	56.52	MOL2	C
ATOM	6782	CZ	TYR	D	102	20.147	-48.645	-77.927	1.00	57.97	MOL2	C
ATOM	6783	OH	TYR	D	102	19.644	-48.394	-76.666	1.00	64.12	MOL2	O
ATOM	6784	C	TYR	D	102	19.201	-49.217	-83.438	1.00	64.63	MOL2	C
ATOM	6785	O	TYR	D	102	18.190	-48.662	-83.878	1.00	76.43	MOL2	O
ATOM	6786	N	TYR	D	103	19.267	-50.534	-83.321	1.00	56.82	MOL2	N
ATOM	6787	CA	TYR	D	103	18.111	-51.346	-83.732	1.00	58.69	MOL2	C
ATOM	6788	CB	TYR	D	103	17.122	-51.458	-82.573	1.00	43.86	MOL2	C
ATOM	6789	CG	TYR	D	103	17.538	-52.461	-81.545	1.00	43.71	MOL2	C
ATOM	6790	CD1	TYR	D	103	17.591	-53.806	-81.845	1.00	44.13	MOL2	C
ATOM	6791	CE1	TYR	D	103	18.071	-54.717	-80.938	1.00	40.31	MOL2	C
ATOM	6792	CD2	TYR	D	103	17.967	-52.057	-80.304	1.00	49.09	MOL2	C
ATOM	6793	CE2	TYR	D	103	18.451	-52.956	-79.390	1.00	51.91	MOL2	C
ATOM	6794	CZ	TYR	D	103	18.503	-54.282	-79.716	1.00	47.11	MOL2	C
ATOM	6795	OH	TYR	D	103	19.030	-55.161	-78.812	1.00	55.04	MOL2	O
ATOM	6796	C	TYR	D	103	17.309	-50.967	-85.011	1.00	65.35	MOL2	C
ATOM	6797	O	TYR	D	103	17.717	-51.222	-86.151	1.00	63.13	MOL2	O
ATOM	6798	N	GLU	D	104	16.151	-50.358	-84.795	1.00	74.03	MOL2	N
ATOM	6799	CA	GLU	D	104	15.235	-49.998	-85.869	1.00	78.43	MOL2	C
ATOM	6800	CB	GLU	D	104	15.699	-48.817	-86.692	1.00	80.98	MOL2	C
ATOM	6801	CG	GLU	D	104	14.640	-48.463	-87.754	1.00	85.46	MOL2	C
ATOM	6802	CD	GLU	D	104	13.205	-48.758	-87.276	1.00	83.54	MOL2	C
ATOM	6803	OE1	GLU	D	104	12.792	-48.195	-86.246	1.00	88.99	MOL2	O
ATOM	6804	OE2	GLU	D	104	12.479	-49.545	-87.919	1.00	62.12	MOL2	O
ATOM	6805	C	GLU	D	104	15.016	-51.128	-86.831	1.00	79.96	MOL2	C
ATOM	6806	O	GLU	D	104	14.310	-52.078	-86.520	1.00	80.54	MOL2	O
ATOM	6807	N	GLY	D	105	15.634	-51.006	-88.005	1.00	85.01	MOL2	N
ATOM	6808	CA	GLY	D	105	15.476	-52.001	-89.050	1.00	93.60	MOL2	C
ATOM	6809	C	GLY	D	105	14.037	-52.024	-89.569	1.00	97.58	MOL2	C
ATOM	6810	O	GLY	D	105	13.798	-52.401	-90.722	1.00	102.45	MOL2	O
ATOM	6811	N	SER	D	106	13.100	-51.610	-88.705	1.00	92.53	MOL2	N
ATOM	6812	CA	SER	D	106	11.654	-51.559	-88.954	1.00	79.31	MOL2	C
ATOM	6813	CB	SER	D	106	11.248	-52.469	-90.112	1.00	78.55	MOL2	C
ATOM	6814	CG	SER	D	106	11.367	-53.835	-89.753	1.00	70.96	MOL2	C
ATOM	6815	C	SER	D	106	10.973	-52.057	-87.682	1.00	75.84	MOL2	C
ATOM	6816	O	SER	D	106	9.836	-51.701	-87.409	1.00	76.84	MOL2	O
ATOM	6817	N	ILE	D	107	11.696	-52.889	-86.928	1.00	70.17	MOL2	N
ATOM	6818	CA	ILE	D	107	11.257	-53.508	-85.675	1.00	67.60	MOL2	C
ATOM	6819	CB	ILE	D	107	12.397	-53.559	-84.655	1.00	65.73	MOL2	C
ATOM	6820	CG2	ILE	D	107	11.908	-54.227	-83.395	1.00	68.97	MOL2	C
ATOM	6821	CG1	ILE	D	107	13.584	-54.342	-85.207	1.00	64.47	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	6822	CD1	ILE	D	107	13.335	-55.820	-85.356	1.00	70.08	MOL2	C
ATOM	6823	C	ILE	D	107	10.086	-52.832	-84.975	1.00	73.93	MOL2	C
ATOM	6824	O	ILE	D	107	10.231	-51.739	-84.425	1.00	76.91	MOL2	O
ATOM	6825	N	TYR	D	108	8.940	-53.506	-84.942	1.00	75.99	MOL2	N
ATOM	6826	CA	TYR	D	108	7.739	-52.937	-84.329	1.00	73.60	MOL2	C
ATOM	6827	CB	TYR	D	108	6.497	-53.680	-84.859	1.00	78.84	MOL2	C
ATOM	6828	CG	TYR	D	108	5.187	-53.283	-84.201	1.00	84.09	MOL2	C
ATOM	6829	CD1	TYR	D	108	4.714	-51.975	-84.259	1.00	81.93	MOL2	C
ATOM	6830	CE1	TYR	D	108	3.547	-51.600	-83.595	1.00	80.60	MOL2	C
ATOM	6831	CD2	TYR	D	108	4.451	-54.211	-83.470	1.00	88.09	MOL2	C
ATOM	6832	CE2	TYR	D	108	3.288	-53.846	-82.806	1.00	87.51	MOL2	C
ATOM	6833	CZ	TYR	D	108	2.844	-52.541	-82.865	1.00	84.81	MOL2	C
ATOM	6834	OH	TYR	D	108	1.725	-52.183	-82.144	1.00	82.26	MOL2	O
ATOM	6835	C	TYR	D	108	7.736	-52.936	-82.800	1.00	69.77	MOL2	C
ATOM	6836	O	TYR	D	108	7.526	-51.887	-82.172	1.00	66.35	MOL2	O
ATOM	6837	N	ARG	D	109	7.976	-54.113	-82.222	1.00	63.80	MOL2	N
ATOM	6838	CA	ARG	D	109	7.986	-54.324	-80.771	1.00	59.44	MOL2	C
ATOM	6839	CB	ARG	D	109	8.273	-55.796	-80.497	1.00	66.44	MOL2	C
ATOM	6840	CG	ARG	D	109	7.355	-56.764	-81.229	1.00	76.80	MOL2	C
ATOM	6841	CD	ARG	D	109	5.919	-56.612	-80.765	1.00	85.59	MOL2	C
ATOM	6842	NE	ARG	D	109	5.202	-57.885	-80.769	1.00	96.62	MOL2	N
ATOM	6843	CZ	ARG	D	109	4.776	-58.508	-81.864	1.00	104.01	MOL2	C
ATOM	6844	NH1	ARG	D	109	4.988	-57.976	-83.062	1.00	107.13	MOL2	N
ATOM	6845	NH2	ARG	D	109	4.136	-59.668	-81.759	1.00	107.22	MOL2	N
ATOM	6846	C	ARG	D	109	8.958	-53.469	-79.946	1.00	53.98	MOL2	C
ATOM	6847	O	ARG	D	109	9.020	-53.580	-78.729	1.00	51.15	MOL2	O
ATOM	6848	N	LEU	D	110	9.706	-52.611	-80.619	1.00	56.29	MOL2	N
ATOM	6849	CA	LEU	D	110	10.696	-51.731	-79.996	1.00	49.13	MOL2	C
ATOM	6850	CB	LEU	D	110	11.282	-50.813	-81.063	1.00	48.52	MOL2	C
ATOM	6851	CG	LEU	D	110	12.788	-50.737	-81.240	1.00	47.52	MOL2	C
ATOM	6852	CD1	LEU	D	110	13.380	-52.115	-81.438	1.00	50.99	MOL2	C
ATOM	6853	CD2	LEU	D	110	13.061	-49.876	-82.436	1.00	40.58	MOL2	C
ATOM	6854	C	LEU	D	110	10.200	-50.874	-78.840	1.00	47.05	MOL2	C
ATOM	6855	O	LEU	D	110	9.189	-50.191	-78.940	1.00	50.30	MOL2	O
ATOM	6856	N	TRP	D	111	10.940	-50.900	-77.741	1.00	49.64	MOL2	N
ATOM	6857	CA	TRP	D	111	10.608	-50.104	-76.558	1.00	45.27	MOL2	C
ATOM	6858	CB	TRP	D	111	11.531	-50.467	-75.405	1.00	39.40	MOL2	C
ATOM	6859	CG	TRP	D	111	12.966	-50.319	-75.783	1.00	41.28	MOL2	C
ATOM	6860	CD2	TRP	D	111	13.743	-51.256	-76.511	1.00	42.25	MOL2	C
ATOM	6861	CE2	TRP	D	111	15.020	-50.694	-76.697	1.00	43.24	MOL2	C
ATOM	6862	CE3	TRP	D	111	13.483	-52.521	-77.030	1.00	47.78	MOL2	C
ATOM	6863	CD1	TRP	D	111	13.778	-49.246	-75.557	1.00	49.49	MOL2	C
ATOM	6864	NE1	TRP	D	111	15.024	-49.463	-76.102	1.00	45.39	MOL2	N
ATOM	6865	CZ2	TRP	D	111	16.021	-51.353	-77.377	1.00	48.26	MOL2	C
ATOM	6866	CZ3	TRP	D	111	14.476	-53.170	-77.704	1.00	50.24	MOL2	C
ATOM	6867	CH2	TRP	D	111	15.730	-52.591	-77.874	1.00	49.52	MOL2	C
ATOM	6868	C	TRP	D	111	10.913	-48.692	-76.965	1.00	42.86	MOL2	C
ATOM	6869	O	TRP	D	111	11.050	-48.401	-78.157	1.00	46.45	MOL2	O
ATOM	6870	N	PHE	D	112	11.029	-47.799	-75.995	1.00	39.79	MOL2	N
ATOM	6871	CA	PHE	D	112	11.379	-46.446	-76.367	1.00	42.21	MOL2	C
ATOM	6872	CB	PHE	D	112	10.157	-45.626	-76.846	1.00	53.83	MOL2	C
ATOM	6873	CG	PHE	D	112	8.855	-45.936	-76.150	1.00	52.89	MOL2	C
ATOM	6874	CD1	PHE	D	112	7.745	-46.333	-76.900	1.00	51.25	MOL2	C
ATOM	6875	CD2	PHE	D	112	8.733	-45.838	-74.782	1.00	49.56	MOL2	C
ATOM	6876	CE1	PHE	D	112	6.548	-46.632	-76.306	1.00	48.12	MOL2	C
ATOM	6877	CE2	PHE	D	112	7.532	-46.137	-74.182	1.00	55.71	MOL2	C
ATOM	6878	CZ	PHE	D	112	6.435	-46.537	-74.952	1.00	54.08	MOL2	C
ATOM	6879	C	PHE	D	112	12.162	-45.598	-75.414	1.00	39.35	MOL2	C
ATOM	6880	O	PHE	D	112	11.717	-45.330	-74.294	1.00	33.59	MOL2	O
ATOM	6881	N	ALA	D	113	13.342	-45.193	-75.901	1.00	37.45	MOL2	N
ATOM	6882	CA	ALA	D	113	14.262	-44.290	-75.208	1.00	36.05	MOL2	C
ATOM	6883	CB	ALA	D	113	15.657	-44.522	-75.627	1.00	23.09	MOL2	C
ATOM	6884	C	ALA	D	113	13.822	-42.978	-75.768	1.00	39.33	MOL2	C
ATOM	6885	O	ALA	D	113	13.131	-42.946	-76.769	1.00	47.39	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	6886	N	HIS	D	114	14.208	-41.884	-75.150	1.00	46.27	MOL2	N
ATOM	6887	CA	HIS	D	114	13.787	-40.590	-75.673	1.00	48.63	MOL2	C
ATOM	6888	CB	HIS	D	114	14.269	-40.458	-77.111	1.00	50.91	MOL2	C
ATOM	6889	CG	HIS	D	114	15.692	-40.869	-77.294	1.00	56.10	MOL2	C
ATOM	6890	CD2	HIS	D	114	16.829	-40.421	-76.712	1.00	60.79	MOL2	C
ATOM	6891	ND1	HIS	D	114	16.068	-41.875	-78.158	1.00	57.90	MOL2	N
ATOM	6892	CE1	HIS	D	114	17.379	-42.029	-78.102	1.00	64.05	MOL2	C
ATOM	6893	NE2	HIS	D	114	17.865	-41.159	-77.232	1.00	69.07	MOL2	N
ATOM	6894	C	HIS	D	114	12.267	-40.337	-75.583	1.00	45.81	MOL2	C
ATOM	6895	O	HIS	D	114	11.447	-40.878	-76.346	1.00	35.80	MOL2	O
ATOM	6896	N	TRP	D	115	11.933	-39.494	-74.612	1.00	46.75	MOL2	N
ATOM	6897	CA	TRP	D	115	10.586	-39.062	-74.316	1.00	44.18	MOL2	C
ATOM	6898	CB	TRP	D	115	10.226	-39.439	-72.876	1.00	48.59	MOL2	C
ATOM	6899	CG	TRP	D	115	10.103	-40.894	-72.609	1.00	47.04	MOL2	C
ATOM	6900	CD2	TRP	D	115	8.908	-41.589	-72.242	1.00	47.75	MOL2	C
ATOM	6901	CE2	TRP	D	115	9.228	-42.958	-72.174	1.00	47.16	MOL2	C
ATOM	6902	CE3	TRP	D	115	7.598	-41.185	-71.972	1.00	41.48	MOL2	C
ATOM	6903	CD1	TRP	D	115	11.070	-41.832	-72.732	1.00	45.40	MOL2	C
ATOM	6904	NE1	TRP	D	115	10.555	-43.081	-72.478	1.00	48.57	MOL2	N
ATOM	6905	CZ2	TRP	D	115	8.287	-43.929	-71.851	1.00	46.86	MOL2	C
ATOM	6906	CZ3	TRP	D	115	6.663	-42.148	-71.653	1.00	47.51	MOL2	C
ATOM	6907	CH2	TRP	D	115	7.011	-43.507	-71.596	1.00	50.61	MOL2	C
ATOM	6908	C	TRP	D	115	10.659	-37.539	-74.411	1.00	43.89	MOL2	C
ATOM	6909	O	TRP	D	115	11.731	-36.944	-74.245	1.00	36.86	MOL2	O
ATOM	6910	N	GLY	D	116	9.532	-36.902	-74.682	1.00	47.55	MOL2	N
ATOM	6911	CA	GLY	D	116	9.535	-35.453	-74.728	1.00	52.44	MOL2	C
ATOM	6912	C	GLY	D	116	9.308	-34.980	-73.306	1.00	52.89	MOL2	C
ATOM	6913	O	GLY	D	116	9.311	-35.776	-72.382	1.00	54.01	MOL2	O
ATOM	6914	N	GLN	D	117	9.120	-33.690	-73.109	1.00	54.85	MOL2	N
ATOM	6915	CA	GLN	D	117	8.871	-33.202	-71.768	1.00	57.81	MOL2	C
ATOM	6916	CB	GLN	D	117	9.264	-31.729	-71.701	1.00	65.05	MOL2	C
ATOM	6917	CG	GLN	D	117	9.732	-31.160	-73.051	1.00	77.65	MOL2	C
ATOM	6918	CD	GLN	D	117	8.725	-30.196	-73.683	1.00	84.05	MOL2	C
ATOM	6919	OE1	GLN	D	117	8.417	-29.144	-73.120	1.00	85.67	MOL2	O
ATOM	6920	NE2	GLN	D	117	8.214	-30.554	-74.858	1.00	87.61	MOL2	N
ATOM	6921	C	GLN	D	117	7.375	-33.402	-71.489	1.00	58.38	MOL2	C
ATOM	6922	O	GLN	D	117	6.953	-33.530	-70.339	1.00	59.78	MOL2	O
ATOM	6923	N	GLY	D	118	6.589	-33.441	-72.566	1.00	58.82	MOL2	N
ATOM	6924	CA	GLY	D	118	5.151	-33.637	-72.471	1.00	54.19	MOL2	C
ATOM	6925	C	GLY	D	118	4.357	-32.363	-72.263	1.00	55.02	MOL2	C
ATOM	6926	O	GLY	D	118	4.900	-31.358	-71.793	1.00	51.92	MOL2	O
ATOM	6927	N	THR	D	119	3.074	-32.396	-72.633	1.00	56.36	MOL2	N
ATOM	6928	CA	THR	D	119	2.177	-31.244	-72.439	1.00	54.88	MOL2	C
ATOM	6929	CB	THR	D	119	1.655	-30.628	-73.744	1.00	52.27	MOL2	C
ATOM	6930	OG1	THR	D	119	1.567	-31.644	-74.751	1.00	44.54	MOL2	O
ATOM	6931	CG2	THR	D	119	2.522	-29.450	-74.171	1.00	50.75	MOL2	C
ATOM	6932	C	THR	D	119	0.945	-31.655	-71.666	1.00	54.33	MOL2	C
ATOM	6933	O	THR	D	119	0.402	-32.747	-71.867	1.00	55.03	MOL2	O
ATOM	6934	N	LEU	D	120	0.488	-30.757	-70.803	1.00	54.06	MOL2	N
ATOM	6935	CA	LEU	D	120	-0.682	-31.039	-69.995	0.50	59.28	MOL2	C
ATOM	6936	CB	LEU	D	120	-0.639	-30.219	-68.709	1.00	65.21	MOL2	C
ATOM	6937	CG	LEU	D	120	-1.719	-30.637	-67.710	1.00	72.15	MOL2	C
ATOM	6938	CD1	LEU	D	120	-2.020	-32.134	-67.835	1.00	72.95	MOL2	C
ATOM	6939	CD2	LEU	D	120	-1.248	-30.282	-66.310	1.00	75.68	MOL2	C
ATOM	6940	C	LEU	D	120	-1.981	-30.776	-70.740	1.00	58.18	MOL2	C
ATOM	6941	O	LEU	D	120	-2.146	-29.750	-71.393	1.00	58.09	MOL2	O
ATOM	6942	N	VAL	D	121	-2.905	-31.717	-70.623	1.00	58.63	MOL2	N
ATOM	6943	CA	VAL	D	121	-4.189	-31.625	-71.291	1.00	65.61	MOL2	C
ATOM	6944	CB	VAL	D	121	-4.259	-32.665	-72.409	1.00	66.65	MOL2	C
ATOM	6945	CG1	VAL	D	121	-5.471	-32.437	-73.273	1.00	72.47	MOL2	C
ATOM	6946	CG2	VAL	D	121	-2.998	-32.605	-73.221	1.00	71.38	MOL2	C
ATOM	6947	C	VAL	D	121	-5.290	-31.912	-70.278	1.00	72.09	MOL2	C
ATOM	6948	O	VAL	D	121	-5.499	-33.070	-69.900	1.00	75.73	MOL2	O
ATOM	6949	N	THR	D	122	-5.994	-30.864	-69.845	1.00	76.78	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	6950	CA	THR	D	122	-7.074	-31.009	-68.860	1.00	77.46	MOL2	C
ATOM	6951	CB	THR	D	122	-6.846	-30.073	-67.652	1.00	72.23	MOL2	C
ATOM	6952	OG1	THR	D	122	-6.042	-28.956	-68.051	1.00	62.85	MOL2	O
ATOM	6953	CG2	THR	D	122	-6.144	-30.819	-66.532	1.00	81.85	MOL2	C
ATOM	6954	C	THR	D	122	-8.500	-30.790	-69.382	1.00	79.79	MOL2	C
ATOM	6955	O	THR	D	122	-8.916	-29.669	-69.675	1.00	82.67	MOL2	O
ATOM	6956	N	VAL	D	123	-9.241	-31.882	-69.491	1.00	81.95	MOL2	N
ATOM	6957	CA	VAL	D	123	-10.623	-31.848	-69.947	1.00	87.80	MOL2	C
ATOM	6958	CB	VAL	D	123	-10.998	-33.178	-70.658	1.00	87.08	MOL2	C
ATOM	6959	CG1	VAL	D	123	-10.485	-34.360	-69.862	1.00	90.66	MOL2	C
ATOM	6960	CG2	VAL	D	123	-12.494	-33.294	-70.794	1.00	87.68	MOL2	C
ATOM	6961	C	VAL	D	123	-11.567	-31.638	-68.753	1.00	92.45	MOL2	C
ATOM	6962	O	VAL	D	123	-11.915	-32.595	-68.053	1.00	92.78	MOL2	O
ATOM	6963	N	SER	D	124	-11.970	-30.389	-68.521	1.00	96.50	MOL2	N
ATOM	6964	CA	SER	D	124	-12.876	-30.053	-67.419	1.00101.35		MOL2	C
ATOM	6965	CB	SER	D	124	-12.083	-29.484	-66.233	1.00104.48		MOL2	C
ATOM	6966	OG	SER	D	124	-12.917	-29.260	-65.104	1.00108.20		MOL2	O
ATOM	6967	C	SER	D	124	-13.926	-29.030	-67.871	1.00101.90		MOL2	C
ATOM	6968	O	SER	D	124	-13.644	-28.163	-68.701	1.00102.22		MOL2	O
ATOM	6969	N	SER	D	125	-15.131	-29.133	-67.316	1.00100.56		MOL2	N
ATOM	6970	CA	SER	D	125	-16.221	-28.225	-67.660	1.00	95.36	MOL2	C
ATOM	6971	CB	SER	D	125	-17.568	-28.925	-67.473	1.00	98.73	MOL2	C
ATOM	6972	OG	SER	D	125	-17.762	-29.293	-66.116	1.00104.20		MOL2	O
ATOM	6973	C	SER	D	125	-16.194	-26.959	-66.814	1.00	89.46	MOL2	C
ATOM	6974	O	SER	D	125	-16.840	-25.974	-67.148	1.00	86.33	MOL2	O
ATOM	6975	N	ALA	D	126	-15.450	-26.993	-65.717	1.00	87.90	MOL2	N
ATOM	6976	CA	ALA	D	126	-15.351	-25.842	-64.828	1.00	89.29	MOL2	C
ATOM	6977	CB	ALA	D	126	-14.423	-26.151	-63.674	1.00	94.78	MOL2	C
ATOM	6978	C	ALA	D	126	-14.855	-24.614	-65.566	1.00	89.69	MOL2	C
ATOM	6979	O	ALA	D	126	-14.252	-24.718	-66.632	1.00	92.07	MOL2	O
ATOM	6980	N	LYS	D	127	-15.100	-23.451	-64.975	1.00	90.14	MOL2	N
ATOM	6981	CA	LYS	D	127	-14.708	-22.176	-65.564	1.00	92.16	MOL2	C
ATOM	6982	CB	LYS	D	127	-15.944	-21.289	-65.763	1.00104.26		MOL2	C
ATOM	6983	CG	LYS	D	127	-15.652	-19.877	-66.292	1.00114.56		MOL2	C
ATOM	6984	CD	LYS	D	127	-15.048	-19.903	-67.702	1.00119.37		MOL2	C
ATOM	6985	CE	LYS	D	127	-14.849	-18.500	-68.257	1.00116.80		MOL2	C
ATOM	6986	NZ	LYS	D	127	-14.183	-18.545	-69.584	1.00117.75		MOL2	N
ATOM	6987	C	LYS	D	127	-13.724	-21.440	-64.679	1.00	86.37	MOL2	C
ATOM	6988	O	LYS	D	127	-13.770	-21.548	-63.462	1.00	81.01	MOL2	O
ATOM	6989	N	THR	D	128	-12.850	-20.668	-65.306	1.00	86.45	MOL2	N
ATOM	6990	CA	THR	D	128	-11.845	-19.898	-64.587	1.00	88.78	MOL2	C
ATOM	6991	CB	THR	D	128	-11.136	-18.903	-65.555	1.00	94.01	MOL2	C
ATOM	6992	OG1	THR	D	128	-12.100	-17.997	-66.106	1.00102.80		MOL2	O
ATOM	6993	CG2	THR	D	128	-10.464	-19.658	-66.712	1.00	92.70	MOL2	C
ATOM	6994	C	THR	D	128	-12.436	-19.125	-63.403	1.00	82.79	MOL2	C
ATOM	6995	O	THR	D	128	-13.214	-18.206	-63.594	1.00	86.68	MOL2	O
ATOM	6996	N	THR	D	129	-12.063	-19.506	-62.185	1.00	80.34	MOL2	N
ATOM	6997	CA	THR	D	129	-12.541	-18.847	-60.958	1.00	81.32	MOL2	C
ATOM	6998	CB	THR	D	129	-13.413	-19.789	-60.086	1.00	76.32	MOL2	C
ATOM	6999	OG1	THR	D	129	-14.608	-20.155	-60.783	1.00	72.46	MOL2	O
ATOM	7000	CG2	THR	D	129	-13.753	-19.111	-58.767	1.00	66.69	MOL2	C
ATOM	7001	C	THR	D	129	-11.366	-18.439	-60.059	1.00	88.41	MOL2	C
ATOM	7002	O	THR	D	129	-10.451	-19.233	-59.823	1.00	95.15	MOL2	O
ATOM	7003	N	PRO	D	130	-11.372	-17.208	-59.529	1.00	89.99	MOL2	N
ATOM	7004	CD	PRO	D	130	-12.421	-16.177	-59.487	1.00	94.23	MOL2	C
ATOM	7005	CA	PRO	D	130	-10.248	-16.835	-58.665	1.00	91.27	MOL2	C
ATOM	7006	CB	PRO	D	130	-10.413	-15.335	-58.519	1.00	89.62	MOL2	C
ATOM	7007	CG	PRO	D	130	-11.896	-15.225	-58.394	1.00	96.63	MOL2	C
ATOM	7008	C	PRO	D	130	-10.455	-17.558	-57.339	1.00	93.88	MOL2	C
ATOM	7009	O	PRO	D	130	-11.553	-18.047	-57.051	1.00	88.45	MOL2	O
ATOM	7010	N	PRO	D	131	-9.413	-17.600	-56.498	1.00	98.43	MOL2	N
ATOM	7011	CD	PRO	D	131	-8.148	-16.857	-56.658	1.00102.54		MOL2	C
ATOM	7012	CA	PRO	D	131	-9.435	-18.260	-55.195	1.00	98.47	MOL2	C
ATOM	7013	CB	PRO	D	131	-7.975	-18.575	-54.977	1.00102.75		MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7014	CG	PRO	D	131	-7.361	-17.243	-55.378	1.00	102.15	MOL2	C
ATOM	7015	C	PRO	D	131	-9.944	-17.357	-54.087	1.00	97.59	MOL2	C
ATOM	7016	O	PRO	D	131	-9.760	-16.137	-54.131	1.00	97.03	MOL2	O
ATOM	7017	N	SER	D	132	-10.564	-17.980	-53.088	1.00	95.89	MOL2	N
ATOM	7018	CA	SER	D	132	-11.072	-17.293	-51.898	1.00	93.25	MOL2	C
ATOM	7019	CB	SER	D	132	-12.403	-17.915	-51.454	1.00	93.74	MOL2	C
ATOM	7020	OG	SER	D	132	-13.239	-18.221	-52.562	1.00	91.87	MOL2	O
ATOM	7021	C	SER	D	132	-9.993	-17.599	-50.852	1.00	91.14	MOL2	C
ATOM	7022	O	SER	D	132	-9.657	-18.769	-50.643	1.00	93.07	MOL2	O
ATOM	7023	N	VAL	D	133	-9.451	-16.578	-50.196	1.00	84.88	MOL2	N
ATOM	7024	CA	VAL	D	133	-8.382	-16.810	-49.231	1.00	82.43	MOL2	C
ATOM	7025	CB	VAL	D	133	-7.166	-15.975	-49.561	1.00	84.02	MOL2	C
ATOM	7026	CG1	VAL	D	133	-6.151	-16.108	-48.442	1.00	88.68	MOL2	C
ATOM	7027	CG2	VAL	D	133	-6.592	-16.402	-50.898	1.00	87.42	MOL2	C
ATOM	7028	C	VAL	D	133	-8.687	-16.523	-47.780	1.00	81.22	MOL2	C
ATOM	7029	O	VAL	D	133	-8.857	-15.376	-47.402	1.00	83.29	MOL2	O
ATOM	7030	N	TYR	D	134	-8.725	-17.557	-46.951	1.00	84.52	MOL2	N
ATOM	7031	CA	TYR	D	134	-8.992	-17.351	-45.531	1.00	86.30	MOL2	C
ATOM	7032	CB	TYR	D	134	-10.159	-18.220	-45.022	1.00	85.81	MOL2	C
ATOM	7033	CG	TYR	D	134	-11.338	-18.401	-45.964	1.00	90.17	MOL2	C
ATOM	7034	CD1	TYR	D	134	-11.781	-17.377	-46.794	1.00	92.10	MOL2	C
ATOM	7035	CE1	TYR	D	134	-12.865	-17.568	-47.653	1.00	94.29	MOL2	C
ATOM	7036	CD2	TYR	D	134	-12.011	-19.615	-46.015	1.00	94.78	MOL2	C
ATOM	7037	CE2	TYR	D	134	-13.089	-19.815	-46.865	1.00	96.04	MOL2	C
ATOM	7038	CZ	TYR	D	134	-13.513	-18.796	-47.680	1.00	96.73	MOL2	C
ATOM	7039	OH	TYR	D	134	-14.584	-19.032	-48.518	1.00	95.03	MOL2	O
ATOM	7040	C	TYR	D	134	-7.734	-17.696	-44.739	1.00	89.37	MOL2	C
ATOM	7041	O	TYR	D	134	-6.965	-18.587	-45.117	1.00	93.82	MOL2	O
ATOM	7042	N	PRO	D	135	-7.509	-16.986	-43.625	1.00	89.74	MOL2	N
ATOM	7043	CD	PRO	D	135	-8.262	-15.768	-43.276	1.00	91.40	MOL2	C
ATOM	7044	CA	PRO	D	135	-6.360	-17.156	-42.725	1.00	89.81	MOL2	C
ATOM	7045	CB	PRO	D	135	-6.175	-15.754	-42.159	1.00	92.08	MOL2	C
ATOM	7046	CG	PRO	D	135	-7.592	-15.324	-41.973	1.00	93.53	MOL2	C
ATOM	7047	C	PRO	D	135	-6.570	-18.181	-41.610	1.00	87.93	MOL2	C
ATOM	7048	O	PRO	D	135	-7.551	-18.111	-40.879	1.00	88.59	MOL2	O
ATOM	7049	N	LEU	D	136	-5.645	-19.125	-41.471	1.00	88.40	MOL2	N
ATOM	7050	CA	LEU	D	136	-5.754	-20.126	-40.415	1.00	87.79	MOL2	C
ATOM	7051	CB	LEU	D	136	-5.094	-21.449	-40.823	1.00	88.32	MOL2	C
ATOM	7052	CG	LEU	D	136	-5.763	-22.371	-41.841	1.00	87.50	MOL2	C
ATOM	7053	CD1	LEU	D	136	-7.157	-22.734	-41.345	1.00	88.15	MOL2	C
ATOM	7054	CD2	LEU	D	136	-5.832	-21.693	-43.191	1.00	84.04	MOL2	C
ATOM	7055	C	LEU	D	136	-5.045	-19.603	-39.181	1.00	90.22	MOL2	C
ATOM	7056	O	LEU	D	136	-3.813	-19.621	-39.116	1.00	93.68	MOL2	O
ATOM	7057	N	ALA	D	137	-5.819	-19.135	-38.207	1.00	91.57	MOL2	N
ATOM	7058	CA	ALA	D	137	-5.253	-18.616	-36.962	1.00	91.47	MOL2	C
ATOM	7059	CB	ALA	D	137	-5.798	-17.226	-36.677	1.00	95.97	MOL2	C
ATOM	7060	C	ALA	D	137	-5.573	-19.558	-35.800	1.00	89.69	MOL2	C
ATOM	7061	O	ALA	D	137	-6.616	-20.224	-35.785	1.00	81.02	MOL2	O
ATOM	7062	N	PRO	D	138	-4.680	-19.604	-34.798	1.00	91.96	MOL2	N
ATOM	7063	CD	PRO	D	138	-3.585	-18.637	-34.624	1.00	92.07	MOL2	C
ATOM	7064	CA	PRO	D	138	-4.805	-20.449	-33.605	1.00	96.61	MOL2	C
ATOM	7065	CB	PRO	D	138	-3.639	-19.992	-32.720	1.00	90.39	MOL2	C
ATOM	7066	CG	PRO	D	138	-2.680	-19.366	-33.673	1.00	91.23	MOL2	C
ATOM	7067	C	PRO	D	138	-6.122	-20.247	-32.888	1.00	101.66	MOL2	C
ATOM	7068	O	PRO	D	138	-6.863	-19.318	-33.185	1.00	105.65	MOL2	O
ATOM	7069	N	GLY	D	139	-6.402	-21.125	-31.936	1.00	107.92	MOL2	N
ATOM	7070	CA	GLY	D	139	-7.608	-20.995	-31.147	1.00	118.65	MOL2	C
ATOM	7071	C	GLY	D	139	-7.190	-20.365	-29.832	1.00	127.42	MOL2	C
ATOM	7072	O	GLY	D	139	-6.011	-20.041	-29.646	1.00	127.52	MOL2	O
ATOM	7073	N	SER	D	140	-8.141	-20.185	-28.920	1.00	135.65	MOL2	N
ATOM	7074	CA	SER	D	140	-7.851	-19.596	-27.615	1.00	143.05	MOL2	C
ATOM	7075	CB	SER	D	140	-9.124	-18.992	-27.011	1.00	139.74	MOL2	C
ATOM	7076	OG	SER	D	140	-10.098	-19.993	-26.759	1.00	131.79	MOL2	O
ATOM	7077	C	SER	D	140	-7.310	-20.665	-26.667	1.00	150.39	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7078	O	SER D 140	-7.655	-20.675	-25.485	1.00152.05	MOL2 O
ATOM	7079	N	ALA D 141	-6.474	-21.564	-27.190	1.00156.60	MOL2 N
ATOM	7080	CA	ALA D 141	-5.892	-22.647	-26.394	1.00160.16	MOL2 C
ATOM	7081	CB	ALA D 141	-5.860	-23.938	-27.212	1.00159.05	MOL2 C
ATOM	7082	C	ALA D 141	-4.487	-22.313	-25.884	1.00163.47	MOL2 C
ATOM	7083	O	ALA D 141	-3.603	-23.176	-25.851	1.00162.83	MOL2 O
ATOM	7084	N	ALA D 142	-4.299	-21.053	-25.490	1.00166.92	MOL2 N
ATOM	7085	CA	ALA D 142	-3.030	-20.551	-24.958	1.00169.09	MOL2 C
ATOM	7086	CB	ALA D 142	-2.801	-21.105	-23.550	1.00169.18	MOL2 C
ATOM	7087	C	ALA D 142	-1.805	-20.829	-25.834	1.00170.10	MOL2 C
ATOM	7088	O	ALA D 142	-1.919	-21.350	-26.947	1.00170.73	MOL2 O
ATOM	7089	N	GLN D 143	-0.633	-20.472	-25.313	1.00169.73	MOL2 N
ATOM	7090	CA	GLN D 143	0.630	-20.657	-26.025	1.00169.60	MOL2 C
ATOM	7091	CB	GLN D 143	1.345	-19.304	-26.175	1.00171.11	MOL2 C
ATOM	7092	CG	GLN D 143	2.808	-19.384	-26.651	1.00174.47	MOL2 C
ATOM	7093	CD	GLN D 143	2.960	-19.853	-28.099	1.00176.58	MOL2 C
ATOM	7094	OE1	GLN D 143	2.457	-19.213	-29.029	1.00176.14	MOL2 O
ATOM	7095	NE2	GLN D 143	3.666	-20.969	-28.294	1.00175.36	MOL2 N
ATOM	7096	C	GLN D 143	1.576	-21.666	-25.362	1.00168.61	MOL2 C
ATOM	7097	O	GLN D 143	2.253	-21.353	-24.374	1.00168.76	MOL2 O
ATOM	7098	N	THR D 144	1.617	-22.875	-25.917	1.00165.57	MOL2 N
ATOM	7099	CA	THR D 144	2.493	-23.927	-25.417	1.00162.67	MOL2 C
ATOM	7100	CB	THR D 144	1.749	-25.280	-25.304	1.00163.46	MOL2 C
ATOM	7101	OG1	THR D 144	0.558	-25.108	-24.525	1.00164.15	MOL2 O
ATOM	7102	CG2	THR D 144	2.638	-26.330	-24.633	1.00161.04	MOL2 C
ATOM	7103	C	THR D 144	3.641	-24.067	-26.420	1.00160.35	MOL2 C
ATOM	7104	O	THR D 144	3.468	-23.802	-27.612	1.00159.06	MOL2 O
ATOM	7105	N	ASN D 145	4.806	-24.477	-25.926	1.00157.50	MOL2 N
ATOM	7106	CA	ASN D 145	6.007	-24.656	-26.744	1.00151.64	MOL2 C
ATOM	7107	CB	ASN D 145	5.756	-25.672	-27.878	1.00155.26	MOL2 C
ATOM	7108	CG	ASN D 145	7.047	-26.346	-28.370	1.00156.04	MOL2 C
ATOM	7109	OD1	ASN D 145	7.834	-26.869	-27.575	1.00156.83	MOL2 O
ATOM	7110	ND2	ASN D 145	7.254	-26.345	-29.683	1.00155.28	MOL2 N
ATOM	7111	C	ASN D 145	6.497	-23.322	-27.312	1.00144.30	MOL2 C
ATOM	7112	O	ASN D 145	5.791	-22.309	-27.274	1.00139.79	MOL2 O
ATOM	7113	N	SER D 146	7.721	-23.336	-27.827	1.00138.02	MOL2 N
ATOM	7114	CA	SER D 146	8.340	-22.143	-28.379	1.00132.73	MOL2 C
ATOM	7115	CB	SER D 146	9.865	-22.288	-28.356	1.00131.99	MOL2 C
ATOM	7116	OG	SER D 146	10.355	-22.370	-27.030	1.00132.70	MOL2 O
ATOM	7117	C	SER D 146	7.899	-21.800	-29.794	1.00129.36	MOL2 C
ATOM	7118	O	SER D 146	8.140	-20.688	-30.258	1.00133.00	MOL2 O
ATOM	7119	N	MET D 147	7.249	-22.733	-30.481	1.00122.87	MOL2 N
ATOM	7120	CA	MET D 147	6.831	-22.467	-31.851	1.00116.75	MOL2 C
ATOM	7121	CB	MET D 147	7.433	-23.516	-32.789	1.00120.71	MOL2 C
ATOM	7122	CG	MET D 147	8.942	-23.699	-32.641	1.00125.86	MOL2 C
ATOM	7123	SD	MET D 147	9.939	-22.254	-33.097	1.00130.92	MOL2 S
ATOM	7124	CE	MET D 147	10.431	-22.679	-34.789	1.00132.60	MOL2 C
ATOM	7125	C	MET D 147	5.326	-22.418	-32.046	1.00112.57	MOL2 C
ATOM	7126	O	MET D 147	4.564	-23.045	-31.306	1.00111.57	MOL2 O
ATOM	7127	N	VAL D 148	4.905	-21.661	-33.053	1.00108.32	MOL2 N
ATOM	7128	CA	VAL D 148	3.490	-21.535	-33.365	1.00106.32	MOL2 C
ATOM	7129	CB	VAL D 148	2.960	-20.149	-33.012	1.00110.34	MOL2 C
ATOM	7130	CG1	VAL D 148	1.446	-20.208	-32.891	1.00111.40	MOL2 C
ATOM	7131	CG2	VAL D 148	3.602	-19.657	-31.723	1.00111.14	MOL2 C
ATOM	7132	C	VAL D 148	3.269	-21.774	-34.848	1.00103.55	MOL2 C
ATOM	7133	O	VAL D 148	4.022	-21.280	-35.692	1.00104.24	MOL2 O
ATOM	7134	N	THR D 149	2.231	-22.536	-35.164	1.00 98.66	MOL2 N
ATOM	7135	CA	THR D 149	1.935	-22.851	-36.549	1.00 96.52	MOL2 C
ATOM	7136	CB	THR D 149	1.669	-24.363	-36.713	1.00 98.96	MOL2 C
ATOM	7137	OG1	THR D 149	2.910	-25.080	-36.671	1.00 93.78	MOL2 O
ATOM	7138	CG2	THR D 149	0.951	-24.638	-38.020	1.00100.27	MOL2 C
ATOM	7139	C	THR D 149	0.724	-22.082	-37.049	1.00 93.42	MOL2 C
ATOM	7140	O	THR D 149	-0.354	-22.158	-36.454	1.00 91.24	MOL2 O
ATOM	7141	N	LEU D 150	0.907	-21.333	-38.132	1.00 89.17	MOL2 N

ES 2 548 452 T3

ATOM	7142	CA	LEU	D	150	-0.193	-20.578	-38.715	1.00	86.07	MOL2	C
ATOM	7143	CB	LEU	D	150	0.136	-19.087	-38.777	1.00	90.77	MOL2	C
ATOM	7144	CG	LEU	D	150	-0.033	-18.397	-37.427	1.00	88.03	MOL2	C
ATOM	7145	CD1	LEU	D	150	-1.311	-18.924	-36.788	1.00	82.95	MOL2	C
ATOM	7146	CD2	LEU	D	150	1.159	-18.679	-36.532	1.00	90.89	MOL2	C
ATOM	7147	C	LEU	D	150	-0.477	-21.120	-40.101	1.00	83.75	MOL2	C
ATOM	7148	O	LEU	D	150	0.377	-21.775	-40.705	1.00	81.69	MOL2	O
ATOM	7149	N	GLY	D	151	-1.677	-20.853	-40.605	1.00	79.74	MOL2	N
ATOM	7150	CA	GLY	D	151	-2.031	-21.370	-41.908	1.00	82.13	MOL2	C
ATOM	7151	C	GLY	D	151	-2.755	-20.401	-42.809	1.00	83.28	MOL2	C
ATOM	7152	O	GLY	D	151	-3.049	-19.271	-42.433	1.00	84.80	MOL2	O
ATOM	7153	N	CYS	D	152	-3.050	-20.861	-44.014	1.00	83.96	MOL2	N
ATOM	7154	CA	CYS	D	152	-3.731	-20.038	-44.984	1.00	84.35	MOL2	C
ATOM	7155	C	CYS	D	152	-4.481	-20.952	-45.943	1.00	82.11	MOL2	C
ATOM	7156	O	CYS	D	152	-3.868	-21.646	-46.759	1.00	86.66	MOL2	O
ATOM	7157	CB	CYS	D	152	-2.708	-19.191	-45.731	1.00	94.24	MOL2	C
ATOM	7158	SG	CYS	D	152	-3.447	-18.069	-46.950	1.00	115.85	MOL2	S
ATOM	7159	N	LEU	D	153	-5.806	-20.974	-45.828	1.00	73.20	MOL2	N
ATOM	7160	CA	LEU	D	153	-6.622	-21.816	-46.694	1.00	70.35	MOL2	C
ATOM	7161	CB	LEU	D	153	-7.883	-22.280	-45.950	1.00	64.70	MOL2	C
ATOM	7162	CG	LEU	D	153	-8.887	-23.091	-46.786	1.00	68.18	MOL2	C
ATOM	7163	CD1	LEU	D	153	-8.173	-24.268	-47.414	1.00	73.13	MOL2	C
ATOM	7164	CD2	LEU	D	153	-10.045	-23.583	-45.929	1.00	64.94	MOL2	C
ATOM	7165	C	LEU	D	153	-7.005	-21.088	-47.992	1.00	71.66	MOL2	C
ATOM	7166	O	LEU	D	153	-7.522	-19.980	-47.967	1.00	76.30	MOL2	O
ATOM	7167	N	VAL	D	154	-6.734	-21.716	-49.127	1.00	69.81	MOL2	N
ATOM	7168	CA	VAL	D	154	-7.047	-21.137	-50.421	1.00	65.94	MOL2	C
ATOM	7169	CB	VAL	D	154	-5.778	-21.102	-51.301	1.00	68.33	MOL2	C
ATOM	7170	CG1	VAL	D	154	-6.106	-20.627	-52.707	1.00	68.34	MOL2	C
ATOM	7171	CG2	VAL	D	154	-4.747	-20.179	-50.651	1.00	67.27	MOL2	C
ATOM	7172	C	VAL	D	154	-8.140	-21.999	-51.033	1.00	67.13	MOL2	C
ATOM	7173	O	VAL	D	154	-7.877	-23.061	-51.616	1.00	68.63	MOL2	O
ATOM	7174	N	LYS	D	155	-9.378	-21.536	-50.892	1.00	66.86	MOL2	N
ATOM	7175	CA	LYS	D	155	-10.525	-22.293	-51.390	1.00	74.83	MOL2	C
ATOM	7176	CB	LYS	D	155	-11.660	-22.258	-50.354	1.00	78.06	MOL2	C
ATOM	7177	CG	LYS	D	155	-12.702	-23.379	-50.523	1.00	82.35	MOL2	C
ATOM	7178	CD	LYS	D	155	-13.491	-23.616	-49.227	1.00	82.38	MOL2	C
ATOM	7179	CE	LYS	D	155	-14.386	-24.856	-49.318	1.00	81.12	MOL2	C
ATOM	7180	NZ	LYS	D	155	-15.380	-24.801	-50.442	1.00	79.53	MOL2	N
ATOM	7181	C	LYS	D	155	-11.096	-21.928	-52.761	1.00	77.15	MOL2	C
ATOM	7182	O	LYS	D	155	-10.905	-20.813	-53.270	1.00	76.18	MOL2	O
ATOM	7183	N	GLY	D	156	-11.800	-22.905	-53.339	1.00	78.12	MOL2	N
ATOM	7184	CA	GLY	D	156	-12.443	-22.766	-54.638	1.00	81.40	MOL2	C
ATOM	7185	C	GLY	D	156	-11.833	-21.890	-55.726	1.00	83.33	MOL2	C
ATOM	7186	O	GLY	D	156	-12.312	-20.784	-55.986	1.00	87.51	MOL2	O
ATOM	7187	N	TYR	D	157	-10.783	-22.377	-56.375	1.00	81.41	MOL2	N
ATOM	7188	CA	TYR	D	157	-10.164	-21.622	-57.450	1.00	79.33	MOL2	C
ATOM	7189	CB	TYR	D	157	-8.839	-21.031	-57.000	1.00	80.57	MOL2	C
ATOM	7190	CG	TYR	D	157	-7.844	-22.078	-56.617	1.00	91.76	MOL2	C
ATOM	7191	CD1	TYR	D	157	-7.775	-22.559	-55.320	1.00	97.13	MOL2	C
ATOM	7192	CE1	TYR	D	157	-6.878	-23.548	-54.980	1.00	100.61	MOL2	C
ATOM	7193	CD2	TYR	D	157	-6.991	-22.615	-57.562	1.00	96.42	MOL2	C
ATOM	7194	CE2	TYR	D	157	-6.096	-23.601	-57.235	1.00	99.83	MOL2	C
ATOM	7195	CZ	TYR	D	157	-6.040	-24.063	-55.948	1.00	100.07	MOL2	C
ATOM	7196	OH	TYR	D	157	-5.125	-25.035	-55.638	1.00	102.18	MOL2	O
ATOM	7197	C	TYR	D	157	-9.954	-22.585	-58.606	1.00	79.39	MOL2	C
ATOM	7198	O	TYR	D	157	-9.916	-23.804	-58.404	1.00	77.77	MOL2	O
ATOM	7199	N	PHE	D	158	-9.821	-22.032	-59.810	1.00	80.14	MOL2	N
ATOM	7200	CA	PHE	D	158	-9.658	-22.829	-61.022	1.00	82.87	MOL2	C
ATOM	7201	CB	PHE	D	158	-11.019	-23.382	-61.454	1.00	78.27	MOL2	C
ATOM	7202	CG	PHE	D	158	-10.950	-24.358	-62.583	1.00	77.77	MOL2	C
ATOM	7203	CD1	PHE	D	158	-11.146	-25.710	-62.356	1.00	82.81	MOL2	C
ATOM	7204	CD2	PHE	D	158	-10.703	-23.928	-63.872	1.00	74.35	MOL2	C
ATOM	7205	CE1	PHE	D	158	-11.098	-26.618	-63.400	1.00	85.17	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7206	CE2	PHE	D	158	-10.652	-24.823	-64.919	1.00	77.99	MOL2	C
ATOM	7207	CZ	PHE	D	158	-10.851	-26.172	-64.685	1.00	81.90	MOL2	C
ATOM	7208	C	PHE	D	158	-9.104	-21.956	-62.133	1.00	85.00	MOL2	C
ATOM	7209	O	PHE	D	158	-9.521	-20.828	-62.307	1.00	88.25	MOL2	O
ATOM	7210	N	PRO	D	159	-8.150	-22.472	-62.897	1.00	89.94	MOL2	N
ATOM	7211	CD	PRO	D	159	-7.851	-21.969	-64.249	1.00	92.24	MOL2	C
ATOM	7212	CA	PRO	D	159	-7.627	-23.822	-62.700	1.00	93.46	MOL2	C
ATOM	7213	CB	PRO	D	159	-7.566	-24.358	-64.115	1.00	99.28	MOL2	C
ATOM	7214	CG	PRO	D	159	-7.094	-23.128	-64.881	1.00	102.81	MOL2	C
ATOM	7215	C	PRO	D	159	-6.246	-23.737	-62.051	1.00	93.51	MOL2	C
ATOM	7216	O	PRO	D	159	-5.829	-22.671	-61.582	1.00	87.00	MOL2	O
ATOM	7217	N	GLU	D	160	-5.551	-24.866	-62.018	1.00	94.34	MOL2	N
ATOM	7218	CA	GLU	D	160	-4.214	-24.906	-61.465	1.00	94.97	MOL2	C
ATOM	7219	CB	GLU	D	160	-3.640	-26.307	-61.643	1.00	102.82	MOL2	C
ATOM	7220	CG	GLU	D	160	-4.451	-27.404	-60.983	1.00	104.68	MOL2	C
ATOM	7221	CD	GLU	D	160	-4.126	-27.551	-59.516	1.00	107.82	MOL2	C
ATOM	7222	OE1	GLU	D	160	-4.149	-26.529	-58.792	1.00	106.91	MOL2	O
ATOM	7223	OE2	GLU	D	160	-3.843	-28.693	-59.094	1.00	109.05	MOL2	O
ATOM	7224	C	GLU	D	160	-3.441	-23.926	-62.330	1.00	94.31	MOL2	C
ATOM	7225	O	GLU	D	160	-3.754	-23.751	-63.500	1.00	97.38	MOL2	O
ATOM	7226	N	PRO	D	161	-2.402	-23.303	-61.785	1.00	93.91	MOL2	N
ATOM	7227	CD	PRO	D	161	-1.293	-22.753	-62.584	1.00	99.05	MOL2	C
ATOM	7228	CA	PRO	D	161	-1.973	-23.515	-60.413	1.00	96.35	MOL2	C
ATOM	7229	CB	PRO	D	161	-0.544	-23.974	-60.601	1.00	105.77	MOL2	C
ATOM	7230	CG	PRO	D	161	-0.067	-22.959	-61.658	1.00	104.99	MOL2	C
ATOM	7231	C	PRO	D	161	-2.016	-22.201	-59.663	1.00	93.78	MOL2	C
ATOM	7232	O	PRO	D	161	-2.131	-21.139	-60.265	1.00	91.29	MOL2	O
ATOM	7233	N	VAL	D	162	-1.916	-22.287	-58.344	1.00	91.79	MOL2	N
ATOM	7234	CA	VAL	D	162	-1.883	-21.109	-57.493	1.00	87.39	MOL2	C
ATOM	7235	CB	VAL	D	162	-2.845	-21.211	-56.278	1.00	90.09	MOL2	C
ATOM	7236	CG1	VAL	D	162	-2.479	-20.146	-55.241	1.00	87.38	MOL2	C
ATOM	7237	CG2	VAL	D	162	-4.283	-21.031	-56.715	1.00	87.82	MOL2	C
ATOM	7238	C	VAL	D	162	-0.481	-21.118	-56.938	1.00	85.24	MOL2	C
ATOM	7239	O	VAL	D	162	0.134	-22.181	-56.827	1.00	89.31	MOL2	O
ATOM	7240	N	THR	D	163	0.030	-19.950	-56.588	1.00	80.88	MOL2	N
ATOM	7241	CA	THR	D	163	1.361	-19.885	-56.014	1.00	85.73	MOL2	C
ATOM	7242	CB	THR	D	163	2.342	-19.078	-56.916	1.00	88.94	MOL2	C
ATOM	7243	OG1	THR	D	163	2.954	-18.025	-56.154	1.00	87.05	MOL2	O
ATOM	7244	CG2	THR	D	163	1.609	-18.498	-58.123	1.00	90.22	MOL2	C
ATOM	7245	C	THR	D	163	1.272	-19.231	-54.650	1.00	83.87	MOL2	C
ATOM	7246	O	THR	D	163	0.841	-18.092	-54.543	1.00	82.71	MOL2	O
ATOM	7247	N	VAL	D	164	1.655	-19.956	-53.603	1.00	85.61	MOL2	N
ATOM	7248	CA	VAL	D	164	1.619	-19.373	-52.270	1.00	85.22	MOL2	C
ATOM	7249	CB	VAL	D	164	0.825	-20.216	-51.277	1.00	81.96	MOL2	C
ATOM	7250	CG1	VAL	D	164	0.810	-19.517	-49.918	1.00	72.46	MOL2	C
ATOM	7251	CG2	VAL	D	164	-0.592	-20.415	-51.792	1.00	77.75	MOL2	C
ATOM	7252	C	VAL	D	164	3.009	-19.142	-51.712	1.00	89.12	MOL2	C
ATOM	7253	O	VAL	D	164	3.959	-19.864	-52.029	1.00	92.47	MOL2	O
ATOM	7254	N	THR	D	165	3.113	-18.113	-50.882	1.00	91.76	MOL2	N
ATOM	7255	CA	THR	D	165	4.377	-17.723	-50.275	1.00	99.22	MOL2	C
ATOM	7256	CB	THR	D	165	5.179	-16.788	-51.205	1.00	106.57	MOL2	C
ATOM	7257	OG1	THR	D	165	5.686	-15.683	-50.439	1.00	108.68	MOL2	O
ATOM	7258	CG2	THR	D	165	4.292	-16.259	-52.343	1.00	106.51	MOL2	C
ATOM	7259	C	THR	D	165	4.115	-16.958	-48.989	1.00	97.95	MOL2	C
ATOM	7260	O	THR	D	165	3.040	-16.400	-48.812	1.00	95.05	MOL2	O
ATOM	7261	N	TRP	D	166	5.094	-16.929	-48.091	1.00	100.90	MOL2	N
ATOM	7262	CA	TRP	D	166	4.923	-16.198	-46.842	1.00	105.67	MOL2	C
ATOM	7263	CB	TRP	D	166	5.028	-17.136	-45.626	1.00	109.45	MOL2	C
ATOM	7264	CG	TRP	D	166	3.847	-18.088	-45.503	1.00	114.29	MOL2	C
ATOM	7265	CD2	TRP	D	166	2.735	-17.973	-44.605	1.00	116.27	MOL2	C
ATOM	7266	CE2	TRP	D	166	1.847	-19.031	-44.899	1.00	117.82	MOL2	C
ATOM	7267	CE3	TRP	D	166	2.401	-17.076	-43.586	1.00	119.27	MOL2	C
ATOM	7268	CD1	TRP	D	166	3.594	-19.188	-46.277	1.00	117.59	MOL2	C
ATOM	7269	NE1	TRP	D	166	2.395	-19.759	-45.921	1.00	115.70	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	7270	CZ2	TRP	D	166	0.648	-19.214	-44.213	1.00120.98	MOL2	C
ATOM	7271	CZ3	TRP	D	166	1.207	-17.259	-42.905	1.00122.60	MOL2	C
ATOM	7272	CH2	TRP	D	166	0.345	-18.319	-43.223	1.00123.26	MOL2	C
ATOM	7273	C	TRP	D	166	5.910	-15.038	-46.728	1.00109.48	MOL2	C
ATOM	7274	O	TRP	D	166	7.126	-15.207	-46.875	1.00109.46	MOL2	O
ATOM	7275	N	ASN	D	167	5.353	-13.856	-46.466	1.00113.38	MOL2	N
ATOM	7276	CA	ASN	D	167	6.104	-12.608	-46.352	1.00114.54	MOL2	C
ATOM	7277	CB	ASN	D	167	6.947	-12.600	-45.078	1.00118.94	MOL2	C
ATOM	7278	CG	ASN	D	167	6.109	-12.324	-43.834	1.00124.05	MOL2	C
ATOM	7279	OD1	ASN	D	167	4.937	-12.710	-43.760	1.00122.77	MOL2	O
ATOM	7280	ND2	ASN	D	167	6.711	-11.663	-42.847	1.00127.26	MOL2	N
ATOM	7281	C	ASN	D	167	6.952	-12.374	-47.594	1.00114.51	MOL2	C
ATOM	7282	O	ASN	D	167	8.093	-11.908	-47.529	1.00112.51	MOL2	O
ATOM	7283	N	SER	D	168	6.349	-12.713	-48.729	1.00114.88	MOL2	N
ATOM	7284	CA	SER	D	168	6.948	-12.559	-50.046	1.00117.71	MOL2	C
ATOM	7285	CB	SER	D	168	7.043	-11.068	-50.384	1.00120.77	MOL2	C
ATOM	7286	OG	SER	D	168	5.760	-10.461	-50.326	1.00120.73	MOL2	O
ATOM	7287	C	SER	D	168	8.308	-13.240	-50.236	1.00118.45	MOL2	C
ATOM	7288	O	SER	D	168	9.033	-12.940	-51.190	1.00119.88	MOL2	O
ATOM	7289	N	GLY	D	169	8.647	-14.167	-49.345	1.00116.49	MOL2	N
ATOM	7290	CA	GLY	D	169	9.916	-14.863	-49.470	1.00115.34	MOL2	C
ATOM	7291	C	GLY	D	169	10.733	-14.831	-48.196	1.00116.67	MOL2	C
ATOM	7292	O	GLY	D	169	11.731	-15.547	-48.068	1.00116.08	MOL2	O
ATOM	7293	N	SER	D	170	10.305	-13.991	-47.257	1.00117.66	MOL2	N
ATOM	7294	CA	SER	D	170	10.968	-13.838	-45.962	1.00118.92	MOL2	C
ATOM	7295	CB	SER	D	170	10.208	-12.789	-45.123	1.00118.48	MOL2	C
ATOM	7296	OG	SER	D	170	10.823	-12.535	-43.870	1.00117.76	MOL2	O
ATOM	7297	C	SER	D	170	11.005	-15.193	-45.236	1.00118.99	MOL2	C
ATOM	7298	O	SER	D	170	12.025	-15.567	-44.638	1.00120.02	MOL2	O
ATOM	7299	N	LEU	D	171	9.890	-15.922	-45.299	1.00114.98	MOL2	N
ATOM	7300	CA	LEU	D	171	9.788	-17.233	-44.664	1.00111.28	MOL2	C
ATOM	7301	CB	LEU	D	171	8.481	-17.377	-43.885	1.00106.75	MOL2	C
ATOM	7302	CG	LEU	D	171	8.112	-16.341	-42.832	1.00104.87	MOL2	C
ATOM	7303	CD1	LEU	D	171	9.349	-15.874	-42.057	1.00102.21	MOL2	C
ATOM	7304	CD2	LEU	D	171	7.458	-15.196	-43.537	1.00104.02	MOL2	C
ATOM	7305	C	LEU	D	171	9.815	-18.323	-45.712	1.00112.63	MOL2	C
ATOM	7306	O	LEU	D	171	8.872	-18.450	-46.488	1.00113.84	MOL2	O
ATOM	7307	N	SER	D	172	10.885	-19.114	-45.734	1.00116.51	MOL2	N
ATOM	7308	CA	SER	D	172	10.991	-20.211	-46.699	1.00120.66	MOL2	C
ATOM	7309	CB	SER	D	172	12.198	-20.009	-47.633	1.00122.80	MOL2	C
ATOM	7310	OG	SER	D	172	13.427	-19.984	-46.924	1.00128.10	MOL2	O
ATOM	7311	C	SER	D	172	11.115	-21.546	-45.966	1.00120.50	MOL2	C
ATOM	7312	O	SER	D	172	10.645	-22.582	-46.451	1.00117.91	MOL2	O
ATOM	7313	N	SER	D	173	11.737	-21.494	-44.787	1.00120.00	MOL2	N
ATOM	7314	CA	SER	D	173	11.958	-22.666	-43.943	1.00117.46	MOL2	C
ATOM	7315	CB	SER	D	173	13.241	-22.490	-43.119	1.00119.76	MOL2	C
ATOM	7316	OG	SER	D	173	13.086	-21.472	-42.140	1.00120.60	MOL2	O
ATOM	7317	C	SER	D	173	10.791	-22.871	-42.988	1.00113.90	MOL2	C
ATOM	7318	O	SER	D	173	10.213	-21.907	-42.487	1.00111.94	MOL2	O
ATOM	7319	N	GLY	D	174	10.460	-24.129	-42.724	1.00111.91	MOL2	N
ATOM	7320	CA	GLY	D	174	9.361	-24.417	-41.819	1.00109.17	MOL2	C
ATOM	7321	C	GLY	D	174	8.008	-24.127	-42.447	1.00105.52	MOL2	C
ATOM	7322	O	GLY	D	174	7.022	-23.867	-41.753	1.00 99.48	MOL2	O
ATOM	7323	N	VAL	D	175	7.961	-24.171	-43.773	1.00103.61	MOL2	N
ATOM	7324	CA	VAL	D	175	6.718	-23.913	-44.481	1.00 99.51	MOL2	C
ATOM	7325	CB	VAL	D	175	6.875	-22.731	-45.459	1.00105.14	MOL2	C
ATOM	7326	CG1	VAL	D	175	5.512	-22.351	-46.038	1.00105.60	MOL2	C
ATOM	7327	CG2	VAL	D	175	7.528	-21.549	-44.742	1.00101.57	MOL2	C
ATOM	7328	C	VAL	D	175	6.264	-25.151	-45.245	1.00 94.61	MOL2	C
ATOM	7329	O	VAL	D	175	7.066	-25.840	-45.888	1.00 96.65	MOL2	O
ATOM	7330	N	HIS	D	176	4.971	-25.434	-45.156	1.00 87.43	MOL2	N
ATOM	7331	CA	HIS	D	176	4.397	-26.587	-45.834	1.00 86.07	MOL2	C
ATOM	7332	CB	HIS	D	176	3.950	-27.650	-44.827	1.00 86.41	MOL2	C
ATOM	7333	CG	HIS	D	176	5.073	-28.275	-44.049	1.00 88.28	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7334	CD2	HIS	D	176	5.081	-28.931	-42.864	1.00	88.64	MOL2	C
ATOM	7335	ND1	HIS	D	176	6.380	-28.259	-44.487	1.00	88.23	MOL2	N
ATOM	7336	CE1	HIS	D	176	7.146	-28.875	-43.604	1.00	88.02	MOL2	C
ATOM	7337	NE2	HIS	D	176	6.382	-29.292	-42.610	1.00	89.74	MOL2	N
ATOM	7338	C	HIS	D	176	3.190	-26.170	-46.646	1.00	81.52	MOL2	C
ATOM	7339	O	HIS	D	176	2.136	-25.899	-46.086	1.00	80.11	MOL2	O
ATOM	7340	N	THR	D	177	3.340	-26.116	-47.962	1.00	76.57	MOL2	N
ATOM	7341	CA	THR	D	177	2.224	-25.754	-48.816	1.00	72.97	MOL2	C
ATOM	7342	CB	THR	D	177	2.662	-24.744	-49.877	1.00	80.82	MOL2	C
ATOM	7343	OG1	THR	D	177	3.372	-23.671	-49.242	1.00	85.30	MOL2	O
ATOM	7344	CG2	THR	D	177	1.450	-24.183	-50.599	1.00	83.37	MOL2	C
ATOM	7345	C	THR	D	177	1.772	-27.051	-49.467	1.00	67.91	MOL2	C
ATOM	7346	O	THR	D	177	2.470	-27.619	-50.313	1.00	70.89	MOL2	O
ATOM	7347	N	PHE	D	178	0.601	-27.513	-49.056	1.00	60.03	MOL2	N
ATOM	7348	CA	PHE	D	178	0.041	-28.771	-49.527	1.00	61.67	MOL2	C
ATOM	7349	CB	PHE	D	178	-1.032	-29.216	-48.529	1.00	68.29	MOL2	C
ATOM	7350	CG	PHE	D	178	-0.528	-29.307	-47.100	1.00	73.75	MOL2	C
ATOM	7351	CD1	PHE	D	178	-0.041	-30.499	-46.590	1.00	72.53	MOL2	C
ATOM	7352	CD2	PHE	D	178	-0.482	-28.183	-46.293	1.00	75.98	MOL2	C
ATOM	7353	CE1	PHE	D	178	0.481	-30.564	-45.314	1.00	71.77	MOL2	C
ATOM	7354	CE2	PHE	D	178	0.041	-28.247	-45.013	1.00	76.50	MOL2	C
ATOM	7355	CZ	PHE	D	178	0.523	-29.436	-44.527	1.00	73.58	MOL2	C
ATOM	7356	C	PHE	D	178	-0.531	-28.770	-50.931	1.00	60.36	MOL2	C
ATOM	7357	O	PHE	D	178	-0.891	-27.736	-51.465	1.00	62.95	MOL2	O
ATOM	7358	N	PRO	D	179	-0.579	-29.944	-51.561	1.00	63.42	MOL2	N
ATOM	7359	CD	PRO	D	179	0.313	-31.052	-51.192	1.00	71.38	MOL2	C
ATOM	7360	CA	PRO	D	179	-1.104	-30.153	-52.908	1.00	68.95	MOL2	C
ATOM	7361	CB	PRO	D	179	-0.856	-31.636	-53.137	1.00	70.55	MOL2	C
ATOM	7362	CG	PRO	D	179	0.475	-31.800	-52.516	1.00	74.91	MOL2	C
ATOM	7363	C	PRO	D	179	-2.577	-29.813	-52.968	1.00	70.15	MOL2	C
ATOM	7364	O	PRO	D	179	-3.340	-30.171	-52.072	1.00	70.16	MOL2	O
ATOM	7365	N	ALA	D	180	-2.980	-29.115	-54.018	1.00	72.73	MOL2	N
ATOM	7366	CA	ALA	D	180	-4.382	-28.767	-54.157	1.00	74.70	MOL2	C
ATOM	7367	CB	ALA	D	180	-4.580	-27.830	-55.315	1.00	76.02	MOL2	C
ATOM	7368	C	ALA	D	180	-5.172	-30.038	-54.388	1.00	78.51	MOL2	C
ATOM	7369	O	ALA	D	180	-4.664	-31.013	-54.952	1.00	80.95	MOL2	O
ATOM	7370	N	VAL	D	181	-6.415	-30.040	-53.935	1.00	83.08	MOL2	N
ATOM	7371	CA	VAL	D	181	-7.260	-31.205	-54.138	1.00	86.75	MOL2	C
ATOM	7372	CB	VAL	D	181	-7.495	-31.978	-52.812	1.00	89.63	MOL2	C
ATOM	7373	CG1	VAL	D	181	-8.201	-31.098	-51.794	1.00	92.37	MOL2	C
ATOM	7374	CG2	VAL	D	181	-8.286	-33.244	-53.096	1.00	91.56	MOL2	C
ATOM	7375	C	VAL	D	181	-8.579	-30.763	-54.771	1.00	85.95	MOL2	C
ATOM	7376	O	VAL	D	181	-9.027	-29.629	-54.586	1.00	82.58	MOL2	O
ATOM	7377	N	LEU	D	182	-9.188	-31.652	-55.542	1.00	89.33	MOL2	N
ATOM	7378	CA	LEU	D	182	-10.438	-31.319	-56.213	1.00	99.47	MOL2	C
ATOM	7379	CB	LEU	D	182	-10.663	-32.212	-57.438	1.00	103.48	MOL2	C
ATOM	7380	CG	LEU	D	182	-9.979	-31.802	-58.741	1.00	104.61	MOL2	C
ATOM	7381	CD1	LEU	D	182	-10.465	-30.434	-59.175	1.00	101.89	MOL2	C
ATOM	7382	CD2	LEU	D	182	-8.479	-31.803	-58.533	1.00	111.01	MOL2	C
ATOM	7383	C	LEU	D	182	-11.675	-31.397	-55.337	1.00	105.64	MOL2	C
ATOM	7384	O	LEU	D	182	-12.117	-32.487	-54.957	1.00	106.49	MOL2	O
ATOM	7385	N	GLN	D	183	-12.244	-30.234	-55.038	1.00	111.66	MOL2	N
ATOM	7386	CA	GLN	D	183	-13.452	-30.167	-54.228	1.00	117.55	MOL2	C
ATOM	7387	CB	GLN	D	183	-13.296	-29.107	-53.134	1.00	121.80	MOL2	C
ATOM	7388	CG	GLN	D	183	-14.429	-29.097	-52.125	1.00	127.48	MOL2	C
ATOM	7389	CD	GLN	D	183	-14.151	-28.176	-50.956	1.00	134.62	MOL2	C
ATOM	7390	OE1	GLN	D	183	-13.935	-26.976	-51.136	1.00	137.26	MOL2	O
ATOM	7391	NE2	GLN	D	183	-14.154	-28.735	-49.745	1.00	136.36	MOL2	N
ATOM	7392	C	GLN	D	183	-14.642	-29.828	-55.132	1.00	117.41	MOL2	C
ATOM	7393	O	GLN	D	183	-15.074	-28.674	-55.206	1.00	115.92	MOL2	O
ATOM	7394	N	SER	D	184	-15.153	-30.848	-55.821	1.00	117.21	MOL2	N
ATOM	7395	CA	SER	D	184	-16.284	-30.695	-56.735	1.00	116.49	MOL2	C
ATOM	7396	CB	SER	D	184	-17.567	-30.374	-55.952	1.00	118.76	MOL2	C
ATOM	7397	OG	SER	D	184	-18.715	-30.434	-56.785	1.00	117.15	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	7398	C	SER	D	184	-16.001	-29.599	-57.766	1.00114.43	MOL2	C
ATOM	7399	O	SER	D	184	-16.331	-28.423	-57.566	1.00113.94	MOL2	O
ATOM	7400	N	ASP	D	185	-15.373	-30.003	-58.866	1.00109.97	MOL2	N
ATOM	7401	CA	ASP	D	185	-15.027	-29.092	-59.953	1.00106.35	MOL2	C
ATOM	7402	CB	ASP	D	185	-16.276	-28.756	-60.778	1.00109.89	MOL2	C
ATOM	7403	CG	ASP	D	185	-16.703	-29.900	-61.688	1.00114.04	MOL2	C
ATOM	7404	OD1	ASP	D	185	-16.865	-31.031	-61.181	1.00116.14	MOL2	O
ATOM	7405	OD2	ASP	D	185	-16.879	-29.666	-62.908	1.00111.22	MOL2	O
ATOM	7406	C	ASP	D	185	-14.362	-27.800	-59.491	1.00101.63	MOL2	C
ATOM	7407	O	ASP	D	185	-14.626	-26.734	-60.036	1.00101.10	MOL2	O
ATOM	7408	N	LEU	D	186	-13.497	-27.894	-58.489	1.00 97.57	MOL2	N
ATOM	7409	CA	LEU	D	186	-12.804	-26.719	-57.982	1.00 94.35	MOL2	C
ATOM	7410	CB	LEU	D	186	-13.771	-25.834	-57.206	1.00 97.44	MOL2	C
ATOM	7411	CG	LEU	D	186	-13.994	-24.493	-57.894	1.00 98.32	MOL2	C
ATOM	7412	CD1	LEU	D	186	-14.678	-23.525	-56.955	1.00101.00	MOL2	C
ATOM	7413	CD2	LEU	D	186	-12.656	-23.944	-58.309	1.00 96.21	MOL2	C
ATOM	7414	C	LEU	D	186	-11.629	-27.089	-57.093	1.00 91.57	MOL2	C
ATOM	7415	O	LEU	D	186	-11.710	-28.030	-56.298	1.00 87.44	MOL2	O
ATOM	7416	N	TYR	D	187	-10.545	-26.329	-57.220	1.00 88.85	MOL2	N
ATOM	7417	CA	TYR	D	187	-9.332	-26.589	-56.452	1.00 89.15	MOL2	C
ATOM	7418	CB	TYR	D	187	-8.094	-26.188	-57.270	1.00 90.53	MOL2	C
ATOM	7419	CG	TYR	D	187	-7.915	-26.965	-58.560	1.00 97.55	MOL2	C
ATOM	7420	CD1	TYR	D	187	-7.866	-28.353	-58.568	1.00 98.39	MOL2	C
ATOM	7421	CE1	TYR	D	187	-7.693	-29.055	-59.747	1.00100.52	MOL2	C
ATOM	7422	CD2	TYR	D	187	-7.786	-26.308	-59.772	1.00103.60	MOL2	C
ATOM	7423	CE2	TYR	D	187	-7.615	-27.007	-60.957	1.00106.54	MOL2	C
ATOM	7424	CZ	TYR	D	187	-7.569	-28.378	-60.936	1.00105.62	MOL2	C
ATOM	7425	OH	TYR	D	187	-7.388	-29.067	-62.112	1.00112.90	MOL2	O
ATOM	7426	C	TYR	D	187	-9.278	-25.893	-55.098	1.00 84.84	MOL2	C
ATOM	7427	O	TYR	D	187	-9.577	-24.710	-54.989	1.00 81.67	MOL2	O
ATOM	7428	N	THR	D	188	-8.889	-26.645	-54.072	1.00 83.80	MOL2	N
ATOM	7429	CA	THR	D	188	-8.757	-26.120	-52.716	1.00 82.80	MOL2	C
ATOM	7430	CB	THR	D	188	-9.873	-26.626	-51.790	1.00 86.64	MOL2	C
ATOM	7431	OG1	THR	D	188	-11.155	-26.274	-52.327	1.00 92.13	MOL2	O
ATOM	7432	CG2	THR	D	188	-9.715	-26.012	-50.412	1.00 85.38	MOL2	C
ATOM	7433	C	THR	D	188	-7.432	-26.618	-52.149	1.00 80.21	MOL2	C
ATOM	7434	O	THR	D	188	-7.135	-27.816	-52.213	1.00 77.53	MOL2	O
ATOM	7435	N	LEU	D	189	-6.638	-25.703	-51.601	1.00 75.75	MOL2	N
ATOM	7436	CA	LEU	D	189	-5.344	-26.068	-51.036	1.00 71.42	MOL2	C
ATOM	7437	CB	LEU	D	189	-4.214	-25.786	-52.035	1.00 67.24	MOL2	C
ATOM	7438	CG	LEU	D	189	-3.627	-24.369	-52.109	1.00 63.69	MOL2	C
ATOM	7439	CD1	LEU	D	189	-2.736	-24.067	-50.915	1.00 55.23	MOL2	C
ATOM	7440	CD2	LEU	D	189	-2.802	-24.260	-53.371	1.00 68.68	MOL2	C
ATOM	7441	C	LEU	D	189	-5.093	-25.264	-49.780	1.00 69.79	MOL2	C
ATOM	7442	O	LEU	D	189	-5.613	-24.168	-49.625	1.00 69.82	MOL2	O
ATOM	7443	N	SER	D	190	-4.268	-25.810	-48.899	1.00 70.07	MOL2	N
ATOM	7444	CA	SER	D	190	-3.926	-25.157	-47.643	1.00 66.76	MOL2	C
ATOM	7445	CB	SER	D	190	-4.446	-26.000	-46.478	1.00 67.94	MOL2	C
ATOM	7446	OG	SER	D	190	-4.713	-27.343	-46.889	1.00 68.93	MOL2	O
ATOM	7447	C	SER	D	190	-2.418	-25.006	-47.541	1.00 65.99	MOL2	C
ATOM	7448	O	SER	D	190	-1.666	-25.640	-48.285	1.00 71.65	MOL2	O
ATOM	7449	N	SER	D	191	-1.966	-24.168	-46.625	1.00 61.24	MOL2	N
ATOM	7450	CA	SER	D	191	-0.535	-23.979	-46.463	1.00 67.78	MOL2	C
ATOM	7451	CB	SER	D	191	-0.012	-22.949	-47.461	1.00 64.40	MOL2	C
ATOM	7452	OG	SER	D	191	1.351	-22.654	-47.200	1.00 64.07	MOL2	O
ATOM	7453	C	SER	D	191	-0.201	-23.527	-45.055	1.00 71.33	MOL2	C
ATOM	7454	O	SER	D	191	-0.644	-22.475	-44.614	1.00 72.50	MOL2	O
ATOM	7455	N	SER	D	192	0.592	-24.329	-44.357	1.00 74.03	MOL2	N
ATOM	7456	CA	SER	D	192	0.984	-24.018	-43.003	1.00 76.14	MOL2	C
ATOM	7457	CB	SER	D	192	0.948	-25.274	-42.154	1.00 78.39	MOL2	C
ATOM	7458	OG	SER	D	192	1.638	-25.057	-40.940	1.00 88.40	MOL2	O
ATOM	7459	C	SER	D	192	2.378	-23.420	-42.940	1.00 81.28	MOL2	C
ATOM	7460	O	SER	D	192	3.200	-23.601	-43.848	1.00 81.58	MOL2	O
ATOM	7461	N	VAL	D	193	2.631	-22.716	-41.842	1.00 84.79	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	7462	CA	VAL	D	193	3.910	-22.069	-41.591	1.00	87.41	MOL2	C
ATOM	7463	CB	VAL	D	193	3.912	-20.611	-42.080	1.00	88.21	MOL2	C
ATOM	7464	CG1	VAL	D	193	2.707	-19.880	-41.523	1.00	87.93	MOL2	C
ATOM	7465	CG2	VAL	D	193	5.186	-19.919	-41.616	1.00	89.40	MOL2	C
ATOM	7466	C	VAL	D	193	4.176	-22.046	-40.088	1.00	87.14	MOL2	C
ATOM	7467	O	VAL	D	193	3.368	-21.529	-39.310	1.00	76.15	MOL2	O
ATOM	7468	N	THR	D	194	5.305	-22.617	-39.685	1.00	90.79	MOL2	N
ATOM	7469	CA	THR	D	194	5.677	-22.636	-38.281	1.00	94.76	MOL2	C
ATOM	7470	CB	THR	D	194	6.478	-23.898	-37.926	1.00	102.47	MOL2	C
ATOM	7471	OG1	THR	D	194	5.656	-25.054	-38.129	1.00	113.20	MOL2	O
ATOM	7472	CG2	THR	D	194	6.933	-23.850	-36.469	1.00	104.71	MOL2	C
ATOM	7473	C	THR	D	194	6.540	-21.416	-38.016	1.00	93.94	MOL2	C
ATOM	7474	O	THR	D	194	7.185	-20.889	-38.929	1.00	91.41	MOL2	O
ATOM	7475	N	VAL	D	195	6.560	-20.977	-36.763	1.00	94.99	MOL2	N
ATOM	7476	CA	VAL	D	195	7.321	-19.793	-36.391	1.00	96.41	MOL2	C
ATOM	7477	CB	VAL	D	195	6.609	-18.518	-36.904	1.00	99.17	MOL2	C
ATOM	7478	CG1	VAL	D	195	5.292	-18.323	-36.148	1.00	93.52	MOL2	C
ATOM	7479	CG2	VAL	D	195	7.510	-17.300	-36.744	1.00	102.91	MOL2	C
ATOM	7480	C	VAL	D	195	7.448	-19.672	-34.879	1.00	97.60	MOL2	C
ATOM	7481	O	VAL	D	195	6.560	-20.091	-34.129	1.00	91.61	MOL2	O
ATOM	7482	N	PRO	D	196	8.561	-19.088	-34.410	1.00	101.67	MOL2	N
ATOM	7483	CD	PRO	D	196	9.788	-18.768	-35.166	1.00	103.43	MOL2	C
ATOM	7484	CA	PRO	D	196	8.774	-18.918	-32.970	1.00	105.47	MOL2	C
ATOM	7485	CB	PRO	D	196	10.160	-18.277	-32.900	1.00	106.21	MOL2	C
ATOM	7486	CG	PRO	D	196	10.857	-18.870	-34.100	1.00	107.54	MOL2	C
ATOM	7487	C	PRO	D	196	7.687	-18.046	-32.331	1.00	107.87	MOL2	C
ATOM	7488	O	PRO	D	196	7.369	-16.965	-32.831	1.00	107.05	MOL2	O
ATOM	7489	N	SER	D	197	7.119	-18.533	-31.230	1.00	111.25	MOL2	N
ATOM	7490	CA	SER	D	197	6.068	-17.822	-30.501	1.00	114.37	MOL2	C
ATOM	7491	CB	SER	D	197	5.747	-18.555	-29.201	1.00	114.73	MOL2	C
ATOM	7492	OG	SER	D	197	4.997	-17.719	-28.336	1.00	117.18	MOL2	O
ATOM	7493	C	SER	D	197	6.426	-16.376	-30.160	1.00	115.72	MOL2	C
ATOM	7494	O	SER	D	197	5.548	-15.517	-30.029	1.00	112.73	MOL2	O
ATOM	7495	N	SER	D	198	7.718	-16.117	-30.001	1.00	118.69	MOL2	N
ATOM	7496	CA	SER	D	198	8.196	-14.782	-29.668	1.00	119.63	MOL2	C
ATOM	7497	CB	SER	D	198	9.660	-14.843	-29.212	1.00	121.19	MOL2	C
ATOM	7498	OG	SER	D	198	9.826	-15.760	-28.143	1.00	123.39	MOL2	O
ATOM	7499	C	SER	D	198	8.076	-13.823	-30.848	1.00	119.24	MOL2	C
ATOM	7500	O	SER	D	198	7.943	-12.619	-30.650	1.00	120.42	MOL2	O
ATOM	7501	N	THR	D	199	8.123	-14.355	-32.070	1.00	119.47	MOL2	N
ATOM	7502	CA	THR	D	199	8.033	-13.521	-33.269	1.00	119.49	MOL2	C
ATOM	7503	CB	THR	D	199	9.011	-14.010	-34.391	1.00	122.39	MOL2	C
ATOM	7504	OG1	THR	D	199	8.584	-15.281	-34.899	1.00	120.61	MOL2	O
ATOM	7505	CG2	THR	D	199	10.443	-14.133	-33.842	1.00	121.02	MOL2	C
ATOM	7506	C	THR	D	199	6.614	-13.423	-33.840	1.00	117.74	MOL2	C
ATOM	7507	O	THR	D	199	6.429	-13.194	-35.036	1.00	118.98	MOL2	O
ATOM	7508	N	TRP	D	200	5.620	-13.593	-32.971	1.00	115.27	MOL2	N
ATOM	7509	CA	TRP	D	200	4.214	-13.498	-33.358	1.00	115.29	MOL2	C
ATOM	7510	CB	TRP	D	200	3.794	-14.690	-34.209	1.00	112.54	MOL2	C
ATOM	7511	CG	TRP	D	200	2.404	-14.547	-34.760	1.00	112.93	MOL2	C
ATOM	7512	CD2	TRP	D	200	1.199	-15.076	-34.195	1.00	111.49	MOL2	C
ATOM	7513	CE2	TRP	D	200	0.133	-14.685	-35.039	1.00	111.78	MOL2	C
ATOM	7514	CE3	TRP	D	200	0.916	-15.840	-33.058	1.00	108.68	MOL2	C
ATOM	7515	CD1	TRP	D	200	2.031	-13.872	-35.893	1.00	113.78	MOL2	C
ATOM	7516	NE1	TRP	D	200	0.667	-13.953	-36.067	1.00	111.33	MOL2	N
ATOM	7517	CZ2	TRP	D	200	-1.192	-15.036	-34.780	1.00	111.08	MOL2	C
ATOM	7518	CH3	TRP	D	200	-0.402	-16.188	-32.803	1.00	110.71	MOL2	C
ATOM	7519	CH2	TRP	D	200	-1.438	-15.787	-33.661	1.00	110.41	MOL2	C
ATOM	7520	C	TRP	D	200	3.348	-13.462	-32.101	1.00	118.97	MOL2	C
ATOM	7521	O	TRP	D	200	3.570	-14.241	-31.171	1.00	119.87	MOL2	O
ATOM	7522	N	PRO	D	201	2.337	-12.570	-32.061	1.00	121.33	MOL2	N
ATOM	7523	CD	PRO	D	201	1.373	-12.527	-30.948	1.00	120.64	MOL2	C
ATOM	7524	CA	PRO	D	201	1.952	-11.607	-33.103	1.00	120.57	MOL2	C
ATOM	7525	CB	PRO	D	201	0.572	-11.119	-32.643	1.00	120.36	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7526	CG	PRO	D	201	0.101	-12.181	-31.666	1.00119.61	MOL2	C
ATOM	7527	C	PRO	D	201	2.925	-10.440	-33.249	1.00120.32	MOL2	C
ATOM	7528	O	PRO	D	201	2.673	-9.522	-34.031	1.00118.99	MOL2	O
ATOM	7529	N	SER	D	202	4.017	-10.478	-32.482	1.00121.83	MOL2	N
ATOM	7530	CA	SER	D	202	5.046	-9.433	-32.501	1.00123.93	MOL2	C
ATOM	7531	CB	SER	D	202	6.362	-9.976	-31.927	1.00120.25	MOL2	C
ATOM	7532	OG	SER	D	202	7.385	-8.992	-31.938	1.00112.87	MOL2	O
ATOM	7533	C	SER	D	202	5.283	-8.901	-33.913	1.00127.62	MOL2	C
ATOM	7534	O	SER	D	202	4.783	-7.829	-34.275	1.00129.11	MOL2	O
ATOM	7535	N	GLU	D	203	6.057	-9.640	-34.704	1.00128.68	MOL2	N
ATOM	7536	CA	GLU	D	203	6.317	-9.244	-36.083	1.00129.64	MOL2	C
ATOM	7537	CB	GLU	D	203	7.517	-10.005	-36.649	1.00129.05	MOL2	C
ATOM	7538	CG	GLU	D	203	8.854	-9.554	-36.090	1.00132.77	MOL2	C
ATOM	7539	CD	GLU	D	203	10.022	-10.330	-36.671	1.00134.26	MOL2	C
ATOM	7540	OE1	GLU	D	203	10.046	-10.528	-37.906	1.00133.87	MOL2	O
ATOM	7541	OE2	GLU	D	203	10.917	-10.732	-35.895	1.00134.13	MOL2	O
ATOM	7542	C	GLU	D	203	5.067	-9.578	-36.886	1.00131.08	MOL2	C
ATOM	7543	O	GLU	D	203	4.026	-9.920	-36.316	1.00130.66	MOL2	O
ATOM	7544	N	THR	D	204	5.156	-9.488	-38.207	1.00132.69	MOL2	N
ATOM	7545	CA	THR	D	204	3.995	-9.792	-39.035	1.00132.69	MOL2	C
ATOM	7546	CB	THR	D	204	3.553	-8.550	-39.863	1.00134.41	MOL2	C
ATOM	7547	OG1	THR	D	204	3.013	-7.557	-38.978	1.00133.83	MOL2	O
ATOM	7548	CG2	THR	D	204	2.495	-8.931	-40.899	1.00132.04	MOL2	C
ATOM	7549	C	THR	D	204	4.204	-10.988	-39.964	1.00130.56	MOL2	C
ATOM	7550	O	THR	D	204	5.324	-11.295	-40.391	1.00130.19	MOL2	O
ATOM	7551	N	VAL	D	205	3.104	-11.668	-40.252	1.00126.51	MOL2	N
ATOM	7552	CA	VAL	D	205	3.125	-12.827	-41.118	1.00121.52	MOL2	C
ATOM	7553	CB	VAL	D	205	3.030	-14.114	-40.276	1.00124.28	MOL2	C
ATOM	7554	CG1	VAL	D	205	4.268	-14.228	-39.378	1.00121.43	MOL2	C
ATOM	7555	CG2	VAL	D	205	1.757	-14.090	-39.427	1.00122.84	MOL2	C
ATOM	7556	C	VAL	D	205	1.945	-12.713	-42.073	1.00117.56	MOL2	C
ATOM	7557	O	VAL	D	205	0.802	-12.528	-41.649	1.00115.24	MOL2	O
ATOM	7558	N	THR	D	206	2.219	-12.802	-43.367	1.00112.79	MOL2	N
ATOM	7559	CA	THR	D	206	1.141	-12.691	-44.325	1.00111.02	MOL2	C
ATOM	7560	CB	THR	D	206	1.084	-11.265	-44.917	1.00114.63	MOL2	C
ATOM	7561	OG1	THR	D	206	0.963	-10.313	-43.849	1.00109.86	MOL2	O
ATOM	7562	CG2	THR	D	206	-0.111	-11.114	-45.849	1.00113.16	MOL2	C
ATOM	7563	C	THR	D	206	1.221	-13.726	-45.435	1.00109.15	MOL2	C
ATOM	7564	O	THR	D	206	2.305	-14.134	-45.863	1.00108.58	MOL2	O
ATOM	7565	N	CYS	D	207	0.043	-14.156	-45.867	1.00104.94	MOL2	N
ATOM	7566	CA	CYS	D	207	-0.124	-15.136	-46.924	1.00103.36	MOL2	C
ATOM	7567	C	CYS	D	207	0.015	-14.415	-48.274	1.00 99.64	MOL2	C
ATOM	7568	O	CYS	D	207	-0.456	-13.294	-48.429	1.00 97.98	MOL2	O
ATOM	7569	CB	CYS	D	207	-1.517	-15.744	-46.782	1.00105.15	MOL2	C
ATOM	7570	SG	CYS	D	207	-1.843	-17.186	-47.834	1.00123.02	MOL2	S
ATOM	7571	N	ASN	D	208	0.659	-15.044	-49.248	1.00 97.46	MOL2	N
ATOM	7572	CA	ASN	D	208	0.831	-14.404	-50.544	1.00 97.44	MOL2	C
ATOM	7573	CB	ASN	D	208	2.301	-14.067	-50.755	1.00105.34	MOL2	C
ATOM	7574	CG	ASN	D	208	2.936	-13.463	-49.517	1.00111.70	MOL2	C
ATOM	7575	OD1	ASN	D	208	2.369	-12.562	-48.890	1.00114.09	MOL2	O
ATOM	7576	ND2	ASN	D	208	4.120	-13.956	-49.157	1.00111.26	MOL2	N
ATOM	7577	C	ASN	D	208	0.317	-15.293	-51.665	1.00 96.87	MOL2	C
ATOM	7578	O	ASN	D	208	1.089	-15.943	-52.381	1.00 99.33	MOL2	O
ATOM	7579	N	VAL	D	209	-1.004	-15.290	-51.803	1.00 90.22	MOL2	N
ATOM	7580	CA	VAL	D	209	-1.737	-16.073	-52.789	1.00 86.47	MOL2	C
ATOM	7581	CB	VAL	D	209	-3.190	-16.114	-52.361	1.00 79.39	MOL2	C
ATOM	7582	CG1	VAL	D	209	-3.849	-17.395	-52.824	1.00 82.38	MOL2	C
ATOM	7583	CG2	VAL	D	209	-3.257	-15.935	-50.859	1.00 73.42	MOL2	C
ATOM	7584	C	VAL	D	209	-1.682	-15.443	-54.179	1.00 88.23	MOL2	C
ATOM	7585	O	VAL	D	209	-1.900	-14.252	-54.306	1.00 88.62	MOL2	O
ATOM	7586	N	ALA	D	210	-1.411	-16.227	-55.219	1.00 90.91	MOL2	N
ATOM	7587	CA	ALA	D	210	-1.374	-15.670	-56.567	1.00 93.72	MOL2	C
ATOM	7588	CB	ALA	D	210	0.059	-15.320	-56.958	1.00 96.40	MOL2	C
ATOM	7589	C	ALA	D	210	-1.993	-16.637	-57.575	1.00 99.43	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7590	O	ALA	D	210	-1.615	-17.815	-57.642	1.00106.33	MOL2	O
ATOM	7591	N	HIS	D	211	-2.943	-16.125	-58.357	1.00 98.35	MOL2	N
ATOM	7592	CA	HIS	D	211	-3.667	-16.907	-59.359	1.00 98.05	MOL2	C
ATOM	7593	CB	HIS	D	211	-5.168	-16.816	-59.043	1.00 87.59	MOL2	C
ATOM	7594	CG	HIS	D	211	-6.012	-17.859	-59.714	1.00 88.25	MOL2	C
ATOM	7595	CD2	HIS	D	211	-7.155	-18.469	-59.315	1.00 87.50	MOL2	C
ATOM	7596	ND1	HIS	D	211	-5.730	-18.364	-60.965	1.00 91.95	MOL2	N
ATOM	7597	CE1	HIS	D	211	-6.660	-19.242	-61.305	1.00 89.03	MOL2	C
ATOM	7598	NE2	HIS	D	211	-7.537	-19.324	-60.321	1.00 83.10	MOL2	N
ATOM	7599	C	HIS	D	211	-3.403	-16.370	-60.779	1.00104.17	MOL2	C
ATOM	7600	O	HIS	D	211	-4.120	-15.495	-61.253	1.00104.17	MOL2	O
ATOM	7601	N	PRO	D	212	-2.364	-16.876	-61.468	1.00111.35	MOL2	N
ATOM	7602	CD	PRO	D	212	-1.230	-17.666	-60.952	1.00117.49	MOL2	C
ATOM	7603	CA	PRO	D	212	-2.080	-16.395	-62.825	1.00115.33	MOL2	C
ATOM	7604	CB	PRO	D	212	-0.877	-17.242	-63.242	1.00120.03	MOL2	C
ATOM	7605	CG	PRO	D	212	-0.114	-17.342	-61.952	1.00120.33	MOL2	C
ATOM	7606	C	PRO	D	212	-3.267	-16.532	-63.777	1.00114.41	MOL2	C
ATOM	7607	O	PRO	D	212	-3.687	-15.553	-64.393	1.00113.77	MOL2	O
ATOM	7608	N	ALA	D	213	-3.809	-17.741	-63.885	1.00113.04	MOL2	N
ATOM	7609	CA	ALA	D	213	-4.946	-18.001	-64.764	1.00115.76	MOL2	C
ATOM	7610	CB	ALA	D	213	-5.530	-19.385	-64.440	1.00115.79	MOL2	C
ATOM	7611	C	ALA	D	213	-6.041	-16.919	-64.664	1.00115.30	MOL2	C
ATOM	7612	O	ALA	D	213	-6.790	-16.675	-65.622	1.00117.39	MOL2	O
ATOM	7613	N	SER	D	214	-6.125	-16.272	-63.506	1.00110.64	MOL2	N
ATOM	7614	CA	SER	D	214	-7.123	-15.234	-63.275	1.00109.17	MOL2	C
ATOM	7615	CB	SER	D	214	-8.030	-15.629	-62.104	1.00108.82	MOL2	C
ATOM	7616	OG	SER	D	214	-8.768	-14.523	-61.618	1.00103.35	MOL2	O
ATOM	7617	C	SER	D	214	-6.451	-13.906	-62.976	1.00111.11	MOL2	C
ATOM	7618	O	SER	D	214	-7.110	-12.935	-62.605	1.00110.06	MOL2	O
ATOM	7619	N	SER	D	215	-5.133	-13.875	-63.137	1.00114.63	MOL2	N
ATOM	7620	CA	SER	D	215	-4.337	-12.673	-62.888	1.00118.87	MOL2	C
ATOM	7621	CB	SER	D	215	-4.591	-11.626	-63.989	1.00120.23	MOL2	C
ATOM	7622	OG	SER	D	215	-3.463	-10.778	-64.168	1.00116.07	MOL2	O
ATOM	7623	C	SER	D	215	-4.609	-12.067	-61.501	1.00119.10	MOL2	C
ATOM	7624	O	SER	D	215	-4.390	-10.872	-61.277	1.00119.46	MOL2	O
ATOM	7625	N	THR	D	216	-5.091	-12.892	-60.574	1.00118.68	MOL2	N
ATOM	7626	CA	THR	D	216	-5.354	-12.426	-59.216	1.00116.60	MOL2	C
ATOM	7627	CB	THR	D	216	-6.481	-13.216	-58.532	1.00116.16	MOL2	C
ATOM	7628	OG1	THR	D	216	-7.666	-13.150	-59.335	1.00114.80	MOL2	O
ATOM	7629	CG2	THR	D	216	-6.767	-12.635	-57.145	1.00110.81	MOL2	C
ATOM	7630	C	THR	D	216	-4.081	-12.600	-58.397	1.00117.22	MOL2	C
ATOM	7631	O	THR	D	216	-3.238	-13.450	-58.708	1.00119.85	MOL2	O
ATOM	7632	N	LYS	D	217	-3.943	-11.792	-57.354	1.00114.88	MOL2	N
ATOM	7633	CA	LYS	D	217	-2.765	-11.846	-56.497	1.00115.84	MOL2	C
ATOM	7634	CB	LYS	D	217	-1.620	-11.055	-57.141	1.00118.61	MOL2	C
ATOM	7635	CG	LYS	D	217	-2.046	-9.699	-57.675	1.00123.65	MOL2	C
ATOM	7636	CD	LYS	D	217	-1.064	-9.156	-58.700	1.00124.05	MOL2	C
ATOM	7637	CE	LYS	D	217	-1.624	-7.903	-59.354	1.00124.41	MOL2	C
ATOM	7638	NZ	LYS	D	217	-3.007	-8.134	-59.873	1.00119.34	MOL2	N
ATOM	7639	C	LYS	D	217	-3.108	-11.271	-55.128	1.00113.12	MOL2	C
ATOM	7640	O	LYS	D	217	-2.713	-10.152	-54.795	1.00108.06	MOL2	O
ATOM	7641	N	VAL	D	218	-3.840	-12.056	-54.337	1.00112.90	MOL2	N
ATOM	7642	CA	VAL	D	218	-4.269	-11.637	-53.004	1.00110.59	MOL2	C
ATOM	7643	CB	VAL	D	218	-5.656	-12.250	-52.645	1.00107.90	MOL2	C
ATOM	7644	CG1	VAL	D	218	-6.068	-11.833	-51.233	1.00100.83	MOL2	C
ATOM	7645	CG2	VAL	D	218	-6.700	-11.803	-53.664	1.00103.53	MOL2	C
ATOM	7646	C	VAL	D	218	-3.293	-11.935	-51.863	1.00112.13	MOL2	C
ATOM	7647	O	VAL	D	218	-2.633	-12.984	-51.833	1.00113.22	MOL2	O
ATOM	7648	N	ASP	D	219	-3.212	-10.983	-50.934	1.00112.43	MOL2	N
ATOM	7649	CA	ASP	D	219	-2.355	-11.072	-49.749	1.00115.90	MOL2	C
ATOM	7650	CB	ASP	D	219	-1.429	-9.846	-49.618	1.00124.25	MOL2	C
ATOM	7651	CG	ASP	D	219	-0.305	-9.822	-50.643	1.00134.23	MOL2	C
ATOM	7652	OD1	ASP	D	219	0.555	-10.733	-50.624	1.00137.14	MOL2	O
ATOM	7653	OD2	ASP	D	219	-0.275	-8.874	-51.461	1.00140.38	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	7654	C	ASP	D	219	-3.289	-11.031	-48.555	1.00113.75	MOL2	C
ATOM	7655	O	ASP	D	219	-4.150	-10.161	-48.493	1.00112.98	MOL2	O
ATOM	7656	N	LYS	D	220	-3.125	-11.948	-47.608	1.00114.33	MOL2	N
ATOM	7657	CA	LYS	D	220	-3.967	-11.942	-46.415	1.00112.98	MOL2	C
ATOM	7658	CB	LYS	D	220	-4.909	-13.149	-46.405	1.00113.88	MOL2	C
ATOM	7659	CG	LYS	D	220	-6.128	-13.003	-45.484	1.00119.26	MOL2	C
ATOM	7660	CD	LYS	D	220	-7.269	-12.211	-46.153	1.00124.16	MOL2	C
ATOM	7661	CE	LYS	D	220	-8.589	-12.281	-45.354	1.00122.46	MOL2	C
ATOM	7662	NZ	LYS	D	220	-9.769	-11.697	-46.077	1.00114.42	MOL2	N
ATOM	7663	C	LYS	D	220	-3.064	-11.980	-45.186	1.00113.40	MOL2	C
ATOM	7664	O	LYS	D	220	-2.262	-12.901	-45.016	1.00115.05	MOL2	O
ATOM	7665	N	LYS	D	221	-3.175	-10.962	-44.342	1.00114.57	MOL2	N
ATOM	7666	CA	LYS	D	221	-2.372	-10.896	-43.128	1.00116.68	MOL2	C
ATOM	7667	CB	LYS	D	221	-2.352	-9.463	-42.571	1.00123.35	MOL2	C
ATOM	7668	CG	LYS	D	221	-1.714	-9.334	-41.178	1.00128.89	MOL2	C
ATOM	7669	CD	LYS	D	221	-1.555	-7.875	-40.736	1.00130.70	MOL2	C
ATOM	7670	CE	LYS	D	221	-0.842	-7.770	-39.386	1.00131.81	MOL2	C
ATOM	7671	NZ	LYS	D	221	-0.531	-6.361	-39.001	1.00131.94	MOL2	N
ATOM	7672	C	LYS	D	221	-2.980	-11.836	-42.095	1.00114.90	MOL2	C
ATOM	7673	O	LYS	D	221	-4.204	-11.909	-41.964	1.00111.76	MOL2	O
ATOM	7674	N	ILE	D	222	-2.124	-12.559	-41.376	1.00115.97	MOL2	N
ATOM	7675	CA	ILE	D	222	-2.582	-13.491	-40.345	1.00118.06	MOL2	C
ATOM	7676	CB	ILE	D	222	-1.621	-14.705	-40.190	1.00121.25	MOL2	C
ATOM	7677	CG2	ILE	D	222	-1.821	-15.356	-38.823	1.00122.94	MOL2	C
ATOM	7678	CG1	ILE	D	222	-1.895	-15.743	-41.281	1.00121.04	MOL2	C
ATOM	7679	CD1	ILE	D	222	-3.209	-16.481	-41.092	1.00118.43	MOL2	C
ATOM	7680	C	ILE	D	222	-2.680	-12.790	-38.998	1.00116.34	MOL2	C
ATOM	7681	O	ILE	D	222	-1.666	-12.516	-38.352	1.00114.18	MOL2	O
ATOM	7682	N	VAL	D	223	-3.908	-12.505	-38.578	1.00117.55	MOL2	N
ATOM	7683	CA	VAL	D	223	-4.140	-11.830	-37.310	1.00120.95	MOL2	C
ATOM	7684	CB	VAL	D	223	-4.933	-10.521	-37.512	1.00128.80	MOL2	C
ATOM	7685	CG1	VAL	D	223	-4.119	-9.537	-38.358	1.00130.83	MOL2	C
ATOM	7686	CG2	VAL	D	223	-6.279	-10.830	-38.173	1.00132.56	MOL2	C
ATOM	7687	C	VAL	D	223	-4.918	-12.716	-36.349	1.00118.69	MOL2	C
ATOM	7688	O	VAL	D	223	-5.879	-13.385	-36.741	1.00115.68	MOL2	O
ATOM	7689	N	PRO	D	224	-4.515	-12.709	-35.068	1.00118.99	MOL2	N
ATOM	7690	CD	PRO	D	224	-3.433	-11.836	-34.576	1.00119.65	MOL2	C
ATOM	7691	CA	PRO	D	224	-5.100	-13.475	-33.963	1.00121.19	MOL2	C
ATOM	7692	CB	PRO	D	224	-4.166	-13.156	-32.792	1.00120.92	MOL2	C
ATOM	7693	CG	PRO	D	224	-3.721	-11.767	-33.091	1.00119.21	MOL2	C
ATOM	7694	C	PRO	D	224	-6.550	-13.137	-33.636	1.00124.07	MOL2	C
ATOM	7695	O	PRO	D	224	-7.150	-12.242	-34.239	1.00122.61	MOL2	O
ATOM	7696	N	ARG	D	225	-7.095	-13.875	-32.671	1.00130.19	MOL2	N
ATOM	7697	CA	ARG	D	225	-8.465	-13.698	-32.196	1.00139.13	MOL2	C
ATOM	7698	CB	ARG	D	225	-9.151	-15.061	-32.026	1.00137.87	MOL2	C
ATOM	7699	CG	ARG	D	225	-9.317	-15.887	-33.291	1.00134.46	MOL2	C
ATOM	7700	CD	ARG	D	225	-10.057	-17.175	-32.961	1.00134.51	MOL2	C
ATOM	7701	NE	ARG	D	225	-10.826	-17.679	-34.095	1.00138.46	MOL2	N
ATOM	7702	CZ	ARG	D	225	-11.841	-18.534	-33.989	1.00139.86	MOL2	C
ATOM	7703	NH1	ARG	D	225	-12.488	-18.939	-35.077	1.00136.69	MOL2	N
ATOM	7704	NH2	ARG	D	225	-12.215	-18.981	-32.793	1.00142.11	MOL2	N
ATOM	7705	C	ARG	D	225	-8.404	-13.006	-30.828	1.00145.80	MOL2	C
ATOM	7706	O	ARG	D	225	-7.409	-13.143	-30.107	1.00146.28	MOL2	O
ATOM	7707	N	ASP	D	226	-9.469	-12.290	-30.466	1.00152.47	MOL2	N
ATOM	7708	CA	ASP	D	226	-9.529	-11.571	-29.188	1.00158.98	MOL2	C
ATOM	7709	CB	ASP	D	226	-10.587	-10.454	-29.262	1.00161.05	MOL2	C
ATOM	7710	CG	ASP	D	226	-10.243	-9.372	-30.288	1.00161.69	MOL2	C
ATOM	7711	OD1	ASP	D	226	-9.174	-8.733	-30.159	1.00160.52	MOL2	O
ATOM	7712	OD2	ASP	D	226	-11.050	-9.157	-31.220	1.00160.76	MOL2	O
ATOM	7713	C	ASP	D	226	-9.814	-12.459	-27.963	1.00161.54	MOL2	C
ATOM	7714	O	ASP	D	226	-8.927	-13.160	-27.469	1.00159.48	MOL2	O
ATOM	7715	N	CYS	D	227	-11.055	-12.410	-27.475	1.00166.54	MOL2	N
ATOM	7716	CA	CYS	D	227	-11.473	-13.187	-26.301	1.00171.26	MOL2	C
ATOM	7717	CB	CYS	D	227	-12.784	-12.616	-25.715	1.00173.22	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7718	SG	CYS	D	227	-14.355	-13.267	-26.401	1.00176.60	MOL2	S
ATOM	7719	C	CYS	D	227	-11.657	-14.679	-26.608	1.00172.68	MOL2	C
ATOM	7720	O	CYS	D	227	-11.457	-15.078	-27.777	1.00172.11	MOL2	O
ATOM	7721	OXT	CYS	D	227	-11.994	-15.439	-25.669	1.00173.46	MOL2	O
ATOM	7722	CB	GLU	E	15	51.662	-25.120	-64.599	1.00165.76	MOL2	C
ATOM	7723	CG	GLU	E	15	50.846	-24.875	-63.330	1.00164.41	MOL2	C
ATOM	7724	CD	GLU	E	15	51.155	-25.879	-62.227	1.00162.45	MOL2	C
ATOM	7725	OE1	GLU	E	15	52.286	-25.854	-61.695	1.00160.73	MOL2	O
ATOM	7726	OE2	GLU	E	15	50.268	-26.697	-61.897	1.00158.74	MOL2	O
ATOM	7727	C	GLU	E	15	51.943	-22.740	-65.385	1.00163.50	MOL2	C
ATOM	7728	O	GLU	E	15	51.249	-21.928	-64.759	1.00160.46	MOL2	O
ATOM	7729	N	GLU	E	15	52.006	-24.644	-67.006	1.00163.87	MOL2	N
ATOM	7730	CA	GLU	E	15	51.393	-24.131	-65.743	1.00164.49	MOL2	C
ATOM	7731	N	SER	E	16	53.188	-22.472	-65.782	1.00162.49	MOL2	N
ATOM	7732	CA	SER	E	16	53.814	-21.180	-65.514	1.00160.48	MOL2	C
ATOM	7733	CB	SER	E	16	54.848	-21.321	-64.390	1.00155.37	MOL2	C
ATOM	7734	OG	SER	E	16	55.761	-22.369	-64.652	1.00146.87	MOL2	O
ATOM	7735	C	SER	E	16	54.465	-20.572	-66.762	1.00162.64	MOL2	C
ATOM	7736	O	SER	E	16	54.681	-19.361	-66.835	1.00162.08	MOL2	O
ATOM	7737	N	CYS	E	17	54.764	-21.418	-67.743	1.00165.84	MOL2	N
ATOM	7738	CA	CYS	E	17	55.385	-20.984	-68.994	1.00169.05	MOL2	C
ATOM	7739	CB	CYS	E	17	55.466	-22.178	-69.959	1.00170.47	MOL2	C
ATOM	7740	SG	CYS	E	17	54.361	-23.581	-69.559	1.00170.59	MOL2	S
ATOM	7741	C	CYS	E	17	54.644	-19.813	-69.659	1.00169.88	MOL2	C
ATOM	7742	O	CYS	E	17	53.450	-19.617	-69.426	1.00168.81	MOL2	O
ATOM	7743	N	PRO	E	18	55.356	-19.011	-70.480	1.00171.24	MOL2	N
ATOM	7744	CD	PRO	E	18	56.821	-19.037	-70.640	1.00172.22	MOL2	C
ATOM	7745	CA	PRO	E	18	54.787	-17.857	-71.191	1.00171.55	MOL2	C
ATOM	7746	CB	PRO	E	18	55.972	-17.326	-71.991	1.00170.97	MOL2	C
ATOM	7747	CG	PRO	E	18	57.121	-17.617	-71.089	1.00172.24	MOL2	C
ATOM	7748	C	PRO	E	18	53.626	-18.273	-72.086	1.00172.56	MOL2	C
ATOM	7749	O	PRO	E	18	53.825	-18.782	-73.193	1.00172.11	MOL2	O
ATOM	7750	N	PRO	E	19	52.393	-18.047	-71.612	1.00174.22	MOL2	N
ATOM	7751	CD	PRO	E	19	52.130	-17.333	-70.347	1.00174.01	MOL2	C
ATOM	7752	CA	PRO	E	19	51.134	-18.369	-72.290	1.00176.12	MOL2	C
ATOM	7753	CB	PRO	E	19	50.105	-17.576	-71.482	1.00175.32	MOL2	C
ATOM	7754	CG	PRO	E	19	50.666	-17.640	-70.096	1.00173.61	MOL2	C
ATOM	7755	C	PRO	E	19	51.048	-18.080	-73.795	1.00177.67	MOL2	C
ATOM	7756	O	PRO	E	19	51.959	-17.505	-74.403	1.00176.41	MOL2	O
ATOM	7757	N	VAL	E	20	49.928	-18.506	-74.377	1.00178.75	MOL2	N
ATOM	7758	CA	VAL	E	20	49.634	-18.333	-75.795	1.00178.94	MOL2	C
ATOM	7759	CB	VAL	E	20	49.264	-19.683	-76.448	1.00177.15	MOL2	C
ATOM	7760	CG1	VAL	E	20	50.459	-20.621	-76.422	1.00175.05	MOL2	C
ATOM	7761	CG2	VAL	E	20	48.081	-20.303	-75.712	1.00174.69	MOL2	C
ATOM	7762	C	VAL	E	20	48.434	-17.392	-75.915	1.00180.62	MOL2	C
ATOM	7763	O	VAL	E	20	47.744	-17.133	-74.926	1.00179.57	MOL2	O
ATOM	7764	N	PRO	E	21	48.164	-16.877	-77.129	1.00182.24	MOL2	N
ATOM	7765	CD	PRO	E	21	48.847	-17.196	-78.399	1.00182.86	MOL2	C
ATOM	7766	CA	PRO	E	21	47.038	-15.963	-77.362	1.00182.34	MOL2	C
ATOM	7767	CB	PRO	E	21	46.858	-16.030	-78.878	1.00182.71	MOL2	C
ATOM	7768	CG	PRO	E	21	48.270	-16.164	-79.359	1.00182.86	MOL2	C
ATOM	7769	C	PRO	E	21	45.758	-16.336	-76.602	1.00181.69	MOL2	C
ATOM	7770	O	PRO	E	21	45.037	-15.459	-76.114	1.00181.15	MOL2	O
ATOM	7771	N	GLY	E	22	45.476	-17.634	-76.507	1.00180.67	MOL2	N
ATOM	7772	CA	GLY	E	22	44.287	-18.075	-75.797	1.00179.02	MOL2	C
ATOM	7773	C	GLY	E	22	43.492	-19.189	-76.460	1.00176.89	MOL2	C
ATOM	7774	O	GLY	E	22	43.083	-19.075	-77.618	1.00176.38	MOL2	O
ATOM	7775	N	GLY	E	23	43.271	-20.269	-75.715	1.00174.14	MOL2	N
ATOM	7776	CA	GLY	E	23	42.512	-21.395	-76.231	1.00169.82	MOL2	C
ATOM	7777	C	GLY	E	23	43.125	-22.093	-77.431	1.00166.75	MOL2	C
ATOM	7778	O	GLY	E	23	42.496	-22.190	-78.484	1.00167.74	MOL2	O
ATOM	7779	N	SER	E	24	44.352	-22.580	-77.276	1.00162.62	MOL2	N
ATOM	7780	CA	SER	E	24	45.051	-23.287	-78.349	1.00157.52	MOL2	C
ATOM	7781	CB	SER	E	24	45.517	-22.311	-79.438	1.00156.73	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7782	OG	SER	E	24	44.455	-21.948	-80.306	1.00153.24	MOL2	O
ATOM	7783	C	SER	E	24	46.252	-24.052	-77.802	1.00154.76	MOL2	C
ATOM	7784	O	SER	E	24	46.885	-23.619	-76.839	1.00156.52	MOL2	O
ATOM	7785	N	MET	E	25	46.555	-25.189	-78.425	1.00149.50	MOL2	N
ATOM	7786	CA	MET	E	25	47.674	-26.038	-78.017	1.00143.87	MOL2	C
ATOM	7787	CB	MET	E	25	47.157	-27.224	-77.198	1.00144.07	MOL2	C
ATOM	7788	CG	MET	E	25	46.428	-26.844	-75.912	1.00147.06	MOL2	C
ATOM	7789	SD	MET	E	25	47.499	-26.726	-74.455	1.00149.22	MOL2	S
ATOM	7790	CE	MET	E	25	46.918	-28.149	-73.463	1.00146.97	MOL2	C
ATOM	7791	C	MET	E	25	48.413	-26.562	-79.248	1.00140.29	MOL2	C
ATOM	7792	O	MET	E	25	47.906	-26.485	-80.367	1.00138.37	MOL2	O
ATOM	7793	N	LYS	E	26	49.607	-27.106	-79.037	1.00137.30	MOL2	N
ATOM	7794	CA	LYS	E	26	50.398	-27.635	-80.142	1.00134.87	MOL2	C
ATOM	7795	CB	LYS	E	26	51.885	-27.670	-79.765	1.00139.86	MOL2	C
ATOM	7796	CG	LYS	E	26	52.739	-26.527	-80.345	1.00144.54	MOL2	C
ATOM	7797	CD	LYS	E	26	52.323	-25.143	-79.831	1.00148.51	MOL2	C
ATOM	7798	CE	LYS	E	26	51.285	-24.461	-80.732	1.00150.28	MOL2	C
ATOM	7799	NZ	LYS	E	26	51.826	-24.051	-82.065	1.00147.62	MOL2	N
ATOM	7800	C	LYS	E	26	49.954	-29.022	-80.606	1.00129.54	MOL2	C
ATOM	7801	O	LYS	E	26	50.030	-29.998	-79.861	1.00126.97	MOL2	O
ATOM	7802	N	LEU	E	27	49.483	-29.097	-81.846	1.00124.85	MOL2	N
ATOM	7803	CA	LEU	E	27	49.060	-30.365	-82.423	1.00120.35	MOL2	C
ATOM	7804	CB	LEU	E	27	47.589	-30.328	-82.829	1.00116.49	MOL2	C
ATOM	7805	CG	LEU	E	27	47.133	-31.589	-83.575	1.00112.14	MOL2	C
ATOM	7806	CD1	LEU	E	27	47.115	-32.755	-82.613	1.00110.03	MOL2	C
ATOM	7807	CD2	LEU	E	27	45.759	-31.385	-84.188	1.00106.67	MOL2	C
ATOM	7808	C	LEU	E	27	49.906	-30.661	-83.652	1.00121.58	MOL2	C
ATOM	7809	O	LEU	E	27	49.665	-30.120	-84.729	1.00120.63	MOL2	O
ATOM	7810	N	ASP	E	28	50.902	-31.521	-83.483	1.00124.70	MOL2	N
ATOM	7811	CA	ASP	E	28	51.780	-31.887	-84.584	1.00128.71	MOL2	C
ATOM	7812	CB	ASP	E	28	52.836	-32.900	-84.130	1.00133.78	MOL2	C
ATOM	7813	CG	ASP	E	28	53.636	-32.421	-82.934	1.00140.19	MOL2	C
ATOM	7814	OD1	ASP	E	28	54.226	-31.320	-83.006	1.00144.46	MOL2	O
ATOM	7815	OD2	ASP	E	28	53.681	-33.154	-81.920	1.00141.62	MOL2	O
ATOM	7816	C	ASP	E	28	50.985	-32.497	-85.726	1.00130.05	MOL2	C
ATOM	7817	O	ASP	E	28	50.007	-33.216	-85.516	1.00128.49	MOL2	O
ATOM	7818	N	ILE	E	29	51.417	-32.202	-86.942	1.00133.66	MOL2	N
ATOM	7819	CA	ILE	E	29	50.776	-32.729	-88.133	1.00135.62	MOL2	C
ATOM	7820	CB	ILE	E	29	51.201	-31.912	-89.369	1.00138.97	MOL2	C
ATOM	7821	CG2	ILE	E	29	50.452	-30.583	-89.395	1.00136.61	MOL2	C
ATOM	7822	CG1	ILE	E	29	52.719	-31.683	-89.338	1.00139.95	MOL2	C
ATOM	7823	CD1	ILE	E	29	53.226	-30.690	-90.368	1.00139.38	MOL2	C
ATOM	7824	C	ILE	E	29	51.207	-34.186	-88.286	1.00134.73	MOL2	C
ATOM	7825	O	ILE	E	29	52.165	-34.626	-87.644	1.00136.22	MOL2	O
ATOM	7826	N	GLY	E	30	50.499	-34.934	-89.124	1.00131.08	MOL2	N
ATOM	7827	CA	GLY	E	30	50.846	-36.329	-89.314	1.00127.61	MOL2	C
ATOM	7828	C	GLY	E	30	50.227	-37.232	-88.261	1.00124.18	MOL2	C
ATOM	7829	O	GLY	E	30	50.530	-37.129	-87.066	1.00121.16	MOL2	O
ATOM	7830	N	ILE	E	31	49.349	-38.123	-88.710	1.00120.51	MOL2	N
ATOM	7831	CA	ILE	E	31	48.679	-39.055	-87.816	1.00112.52	MOL2	C
ATOM	7832	CB	ILE	E	31	47.232	-39.338	-88.257	1.00108.57	MOL2	C
ATOM	7833	CG2	ILE	E	31	46.681	-40.502	-87.476	1.00106.81	MOL2	C
ATOM	7834	CG1	ILE	E	31	46.355	-38.106	-88.042	1.00109.85	MOL2	C
ATOM	7835	CD1	ILE	E	31	46.629	-36.976	-89.010	1.00115.80	MOL2	C
ATOM	7836	C	ILE	E	31	49.420	-40.376	-87.778	1.00110.19	MOL2	C
ATOM	7837	O	ILE	E	31	49.772	-40.932	-88.815	1.00113.42	MOL2	O
ATOM	7838	N	ILE	E	32	49.654	-40.873	-86.574	1.00108.04	MOL2	N
ATOM	7839	CA	ILE	E	32	50.344	-42.140	-86.374	1.00107.81	MOL2	C
ATOM	7840	CB	ILE	E	32	50.661	-42.340	-84.890	1.00 98.99	MOL2	C
ATOM	7841	CG2	ILE	E	32	50.986	-43.783	-84.619	1.00 96.09	MOL2	C
ATOM	7842	CG1	ILE	E	32	51.796	-41.407	-84.480	1.00 95.71	MOL2	C
ATOM	7843	CD1	ILE	E	32	52.151	-41.478	-83.021	1.00 98.06	MOL2	C
ATOM	7844	C	ILE	E	32	49.505	-43.326	-86.851	1.00112.29	MOL2	C
ATOM	7845	O	ILE	E	32	48.386	-43.512	-86.391	1.00115.51	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	7846	N	ASN	E	33	50.052	-44.121	-87.766	1.00117.06	MOL2	N
ATOM	7847	CA	ASN	E	33	49.363	-45.295	-88.304	1.00122.38	MOL2	C
ATOM	7848	CB	ASN	E	33	48.759	-46.133	-87.177	1.00118.52	MOL2	C
ATOM	7849	CG	ASN	E	33	49.795	-46.927	-86.418	1.00119.07	MOL2	C
ATOM	7850	OD1	ASN	E	33	50.413	-47.841	-86.961	1.00119.36	MOL2	O
ATOM	7851	ND2	ASN	E	33	49.993	-46.584	-85.150	1.00121.47	MOL2	N
ATOM	7852	C	ASN	E	33	48.262	-44.968	-89.299	1.00128.50	MOL2	C
ATOM	7853	O	ASN	E	33	47.304	-45.727	-89.428	1.00132.14	MOL2	O
ATOM	7854	N	GLU	E	34	48.402	-43.855	-90.013	1.00134.94	MOL2	N
ATOM	7855	CA	GLU	E	34	47.396	-43.438	-90.991	1.00141.44	MOL2	C
ATOM	7856	CB	GLU	E	34	47.833	-42.128	-91.670	1.00139.56	MOL2	C
ATOM	7857	CG	GLU	E	34	46.690	-41.309	-92.283	1.00136.65	MOL2	C
ATOM	7858	CD	GLU	E	34	47.143	-39.952	-92.820	1.00134.53	MOL2	C
ATOM	7859	OE1	GLU	E	34	47.775	-39.183	-92.060	1.00129.99	MOL2	O
ATOM	7860	OE2	GLU	E	34	46.858	-39.652	-94.003	1.00133.64	MOL2	O
ATOM	7861	C	GLU	E	34	47.168	-44.525	-92.042	1.00146.34	MOL2	C
ATOM	7862	O	GLU	E	34	46.245	-44.440	-92.852	1.00146.31	MOL2	O
ATOM	7863	N	ASN	E	35	48.008	-45.554	-92.003	1.00153.14	MOL2	N
ATOM	7864	CA	ASN	E	35	47.939	-46.663	-92.947	1.00159.76	MOL2	C
ATOM	7865	CB	ASN	E	35	49.347	-47.222	-93.180	1.00164.22	MOL2	C
ATOM	7866	CG	ASN	E	35	50.070	-47.551	-91.880	1.00167.00	MOL2	C
ATOM	7867	OD1	ASN	E	35	50.435	-46.656	-91.116	1.00168.89	MOL2	O
ATOM	7868	ND2	ASN	E	35	50.275	-48.841	-91.623	1.00167.83	MOL2	N
ATOM	7869	C	ASN	E	35	47.005	-47.811	-92.551	1.00160.59	MOL2	C
ATOM	7870	O	ASN	E	35	46.604	-48.605	-93.404	1.00163.30	MOL2	O
ATOM	7871	N	GLN	E	36	46.666	-47.916	-91.271	1.00159.41	MOL2	N
ATOM	7872	CA	GLN	E	36	45.784	-48.993	-90.842	1.00159.83	MOL2	C
ATOM	7873	CB	GLN	E	36	45.512	-48.899	-89.339	1.00152.95	MOL2	C
ATOM	7874	CG	GLN	E	36	46.776	-49.016	-88.494	1.00141.32	MOL2	C
ATOM	7875	CD	GLN	E	36	46.548	-49.745	-87.184	1.00132.84	MOL2	C
ATOM	7876	OE1	GLN	E	36	46.144	-50.905	-87.172	1.00127.00	MOL2	O
ATOM	7877	NE2	GLN	E	36	46.814	-49.070	-86.075	1.00129.59	MOL2	N
ATOM	7878	C	GLN	E	36	44.485	-48.951	-91.642	1.00165.05	MOL2	C
ATOM	7879	O	GLN	E	36	43.716	-47.989	-91.557	1.00165.30	MOL2	O
ATOM	7880	N	ARG	E	37	44.259	-50.004	-92.428	1.00169.69	MOL2	N
ATOM	7881	CA	ARG	E	37	43.080	-50.105	-93.287	1.00173.53	MOL2	C
ATOM	7882	CB	ARG	E	37	43.319	-51.146	-94.398	1.00172.93	MOL2	C
ATOM	7883	CG	ARG	E	37	42.164	-51.309	-95.410	1.00171.95	MOL2	C
ATOM	7884	CD	ARG	E	37	42.470	-52.411	-96.442	1.00169.85	MOL2	C
ATOM	7885	NE	ARG	E	37	41.321	-52.815	-97.266	1.00167.65	MOL2	N
ATOM	7886	CZ	ARG	E	37	40.895	-52.178	-98.357	1.00165.79	MOL2	C
ATOM	7887	NH1	ARG	E	37	41.516	-51.086	-98.778	1.00166.96	MOL2	N
ATOM	7888	NH2	ARG	E	37	39.852	-52.643	-99.041	1.00159.83	MOL2	N
ATOM	7889	C	ARG	E	37	41.790	-50.436	-92.542	1.00175.83	MOL2	C
ATOM	7890	O	ARG	E	37	41.790	-51.190	-91.566	1.00174.15	MOL2	O
ATOM	7891	N	VAL	E	38	40.695	-49.856	-93.031	1.00179.53	MOL2	N
ATOM	7892	CA	VAL	E	38	39.364	-50.045	-92.462	1.00181.52	MOL2	C
ATOM	7893	CB	VAL	E	38	38.281	-49.336	-93.332	1.00182.97	MOL2	C
ATOM	7894	CG1	VAL	E	38	36.956	-49.274	-92.577	1.00183.06	MOL2	C
ATOM	7895	CG2	VAL	E	38	38.751	-47.934	-93.725	1.00182.19	MOL2	C
ATOM	7896	C	VAL	E	38	39.023	-51.533	-92.366	1.00180.77	MOL2	C
ATOM	7897	O	VAL	E	38	38.405	-52.099	-93.270	1.00180.76	MOL2	O
ATOM	7898	N	SER	E	39	39.432	-52.164	-91.268	1.00178.92	MOL2	N
ATOM	7899	CA	SER	E	39	39.163	-53.582	-91.066	1.00177.53	MOL2	C
ATOM	7900	CB	SER	E	39	39.867	-54.092	-89.809	1.00178.45	MOL2	C
ATOM	7901	OG	SER	E	39	39.526	-55.447	-89.561	1.00177.85	MOL2	O
ATOM	7902	C	SER	E	39	37.667	-53.835	-90.937	1.00176.25	MOL2	C
ATOM	7903	O	SER	E	39	37.117	-53.823	-89.834	1.00175.39	MOL2	O
ATOM	7904	N	MET	E	40	37.020	-54.070	-92.074	1.00174.10	MOL2	N
ATOM	7905	CA	MET	E	40	35.584	-54.322	-92.117	1.00168.67	MOL2	C
ATOM	7906	CB	MET	E	40	34.868	-53.068	-92.635	1.00167.61	MOL2	C
ATOM	7907	CG	MET	E	40	33.356	-53.067	-92.501	1.00164.71	MOL2	C
ATOM	7908	SD	MET	E	40	32.661	-51.506	-93.099	1.00158.86	MOL2	S
ATOM	7909	CE	MET	E	40	33.038	-50.424	-91.726	1.00156.43	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7910	C	MET	E	40	35.309	-55.508	-93.044	1.00164.36	MOL2	C
ATOM	7911	O	MET	E	40	34.901	-55.318	-94.193	1.00163.95	MOL2	O
ATOM	7912	N	SER	E	41	35.556	-56.722	-92.554	1.00156.89	MOL2	N
ATOM	7913	CA	SER	E	41	35.316	-57.914	-93.356	1.00150.06	MOL2	C
ATOM	7914	CB	SER	E	41	35.521	-59.183	-92.528	1.00150.16	MOL2	C
ATOM	7915	OG	SER	E	41	35.292	-60.342	-93.315	1.00149.67	MOL2	O
ATOM	7916	C	SER	E	41	33.875	-57.821	-93.826	1.00146.92	MOL2	C
ATOM	7917	O	SER	E	41	32.944	-58.146	-93.092	1.00147.48	MOL2	O
ATOM	7918	N	ARG	E	42	33.699	-57.359	-95.057	1.00142.70	MOL2	N
ATOM	7919	CA	ARG	E	42	32.371	-57.178	-95.620	1.00136.00	MOL2	C
ATOM	7920	CB	ARG	E	42	32.482	-56.781	-97.096	1.00134.72	MOL2	C
ATOM	7921	CG	ARG	E	42	33.169	-55.432	-97.297	1.00136.79	MOL2	C
ATOM	7922	CD	ARG	E	42	33.201	-55.032	-98.763	1.00143.02	MOL2	C
ATOM	7923	NE	ARG	E	42	33.765	-53.698	-98.969	1.00146.55	MOL2	N
ATOM	7924	CZ	ARG	E	42	33.867	-53.103	-100.157	1.00148.75	MOL2	C
ATOM	7925	NH1	ARG	E	42	33.442	-53.721	-101.253	1.00148.61	MOL2	N
ATOM	7926	NH2	ARG	E	42	34.393	-51.887	-100.251	1.00147.55	MOL2	N
ATOM	7927	C	ARG	E	42	31.409	-58.351	-95.450	1.00130.16	MOL2	C
ATOM	7928	O	ARG	E	42	31.809	-59.513	-95.312	1.00126.81	MOL2	O
ATOM	7929	N	ASN	E	43	30.128	-57.995	-95.431	1.00124.14	MOL2	N
ATOM	7930	CA	ASN	E	43	29.007	-58.916	-95.297	1.00115.62	MOL2	C
ATOM	7931	CB	ASN	E	43	28.922	-59.817	-96.534	1.00119.35	MOL2	C
ATOM	7932	CG	ASN	E	43	28.530	-59.042	-97.791	1.00122.58	MOL2	C
ATOM	7933	OD1	ASN	E	43	29.253	-58.141	-98.232	1.00121.38	MOL2	O
ATOM	7934	ND2	ASN	E	43	27.379	-59.388	-98.368	1.00121.45	MOL2	N
ATOM	7935	C	ASN	E	43	28.878	-59.759	-94.029	1.00106.29	MOL2	C
ATOM	7936	O	ASN	E	43	27.872	-60.455	-93.867	1.00105.11	MOL2	O
ATOM	7937	N	ILE	E	44	29.851	-59.705	-93.120	1.00 92.85	MOL2	N
ATOM	7938	CA	ILE	E	44	29.698	-60.503	-91.909	1.00 80.61	MOL2	C
ATOM	7939	CB	ILE	E	44	30.965	-60.545	-91.049	1.00 73.95	MOL2	C
ATOM	7940	CG2	ILE	E	44	32.186	-60.582	-91.942	1.00 83.11	MOL2	C
ATOM	7941	CG1	ILE	E	44	31.001	-59.360	-90.100	1.00 61.18	MOL2	C
ATOM	7942	CD1	ILE	E	44	32.077	-59.492	-89.073	1.00 44.22	MOL2	C
ATOM	7943	C	ILE	E	44	28.576	-59.893	-91.099	1.00 75.70	MOL2	C
ATOM	7944	O	ILE	E	44	28.028	-60.518	-90.203	1.00 72.48	MOL2	O
ATOM	7945	N	GLU	E	45	28.233	-58.658	-91.431	1.00 73.35	MOL2	N
ATOM	7946	CA	GLU	E	45	27.153	-57.979	-90.750	1.00 72.10	MOL2	C
ATOM	7947	CB	GLU	E	45	27.115	-56.515	-91.191	1.00 71.82	MOL2	C
ATOM	7948	CG	GLU	E	45	27.688	-56.282	-92.573	1.00 72.25	MOL2	C
ATOM	7949	CD	GLU	E	45	26.624	-56.339	-93.639	1.00 78.46	MOL2	C
ATOM	7950	OE1	GLU	E	45	25.671	-57.128	-93.465	1.00 84.47	MOL2	O
ATOM	7951	OE2	GLU	E	45	26.738	-55.607	-94.650	1.00 80.02	MOL2	O
ATOM	7952	C	GLU	E	45	25.858	-58.706	-91.088	1.00 72.10	MOL2	C
ATOM	7953	O	GLU	E	45	24.812	-58.465	-90.485	1.00 76.04	MOL2	O
ATOM	7954	N	SER	E	46	25.938	-59.624	-92.042	1.00 70.43	MOL2	N
ATOM	7955	CA	SER	E	46	24.763	-60.368	-92.441	1.00 70.92	MOL2	C
ATOM	7956	CB	SER	E	46	24.453	-60.116	-93.901	1.00 70.73	MOL2	C
ATOM	7957	OG	SER	E	46	23.185	-60.661	-94.198	1.00 83.10	MOL2	O
ATOM	7958	C	SER	E	46	24.912	-61.859	-92.215	1.00 70.22	MOL2	C
ATOM	7959	O	SER	E	46	23.942	-62.609	-92.324	1.00 73.24	MOL2	O
ATOM	7960	N	ARG	E	47	26.129	-62.288	-91.908	1.00 67.88	MOL2	N
ATOM	7961	CA	ARG	E	47	26.399	-63.700	-91.651	1.00 65.71	MOL2	C
ATOM	7962	CB	ARG	E	47	27.822	-64.065	-92.117	1.00 67.97	MOL2	C
ATOM	7963	CG	ARG	E	47	28.027	-64.302	-93.629	1.00 66.34	MOL2	C
ATOM	7964	CD	ARG	E	47	29.511	-64.178	-94.016	1.00 61.33	MOL2	C
ATOM	7965	NE	ARG	E	47	30.383	-64.894	-93.081	1.00 71.70	MOL2	N
ATOM	7966	CZ	ARG	E	47	31.634	-64.538	-92.769	1.00 75.39	MOL2	C
ATOM	7967	NH1	ARG	E	47	32.195	-63.462	-93.314	1.00 70.80	MOL2	N
ATOM	7968	NH2	ARG	E	47	32.326	-65.254	-91.888	1.00 77.23	MOL2	N
ATOM	7969	C	ARG	E	47	26.257	-63.997	-90.148	1.00 65.68	MOL2	C
ATOM	7970	O	ARG	E	47	26.263	-65.151	-89.736	1.00 68.35	MOL2	O
ATOM	7971	N	SER	E	48	26.129	-62.957	-89.331	1.00 60.86	MOL2	N
ATOM	7972	CA	SER	E	48	26.007	-63.144	-87.891	1.00 57.17	MOL2	C
ATOM	7973	CB	SER	E	48	26.350	-61.844	-87.162	1.00 56.06	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	7974	OG	SER	E	48	26.119	-61.967	-85.767	1.00	56.81	MOL2	O
ATOM	7975	C	SER	E	48	24.615	-63.601	-87.468	1.00	58.73	MOL2	C
ATOM	7976	O	SER	E	48	23.625	-63.316	-88.141	1.00	57.30	MOL2	O
ATOM	7977	N	THR	E	49	24.544	-64.320	-86.351	1.00	58.32	MOL2	N
ATOM	7978	CA	THR	E	49	23.261	-64.780	-85.845	1.00	55.76	MOL2	C
ATOM	7979	CB	THR	E	49	23.404	-65.832	-84.720	1.00	60.87	MOL2	C
ATOM	7980	OG1	THR	E	49	24.360	-65.388	-83.753	1.00	66.62	MOL2	O
ATOM	7981	CG2	THR	E	49	23.839	-67.162	-85.286	1.00	63.93	MOL2	C
ATOM	7982	C	THR	E	49	22.517	-63.577	-85.300	1.00	53.59	MOL2	C
ATOM	7983	O	THR	E	49	21.354	-63.666	-84.952	1.00	58.38	MOL2	O
ATOM	7984	N	SER	E	50	23.212	-62.451	-85.223	1.00	54.20	MOL2	N
ATOM	7985	CA	SER	E	50	22.642	-61.199	-84.745	1.00	51.98	MOL2	C
ATOM	7986	CB	SER	E	50	23.176	-60.870	-83.343	1.00	60.19	MOL2	C
ATOM	7987	OG	SER	E	50	24.595	-60.942	-83.265	1.00	60.82	MOL2	O
ATOM	7988	C	SER	E	50	23.083	-60.142	-85.745	1.00	49.67	MOL2	C
ATOM	7989	O	SER	E	50	23.962	-59.337	-85.464	1.00	51.17	MOL2	O
ATOM	7990	N	PRO	E	51	22.484	-60.159	-86.943	1.00	47.99	MOL2	N
ATOM	7991	CD	PRO	E	51	21.442	-61.162	-87.202	1.00	45.73	MOL2	C
ATOM	7992	CA	PRO	E	51	22.679	-59.294	-88.118	1.00	43.36	MOL2	C
ATOM	7993	CB	PRO	E	51	21.665	-59.830	-89.109	1.00	47.50	MOL2	C
ATOM	7994	CG	PRO	E	51	21.491	-61.266	-88.687	1.00	51.77	MOL2	C
ATOM	7995	C	PRO	E	51	22.459	-57.819	-87.834	1.00	43.28	MOL2	C
ATOM	7996	O	PRO	E	51	21.758	-57.451	-86.902	1.00	50.95	MOL2	O
ATOM	7997	N	TRP	E	52	23.028	-56.967	-88.660	1.00	41.57	MOL2	N
ATOM	7998	CA	TRP	E	52	22.905	-55.546	-88.411	1.00	50.00	MOL2	C
ATOM	7999	CB	TRP	E	52	23.895	-55.159	-87.320	1.00	47.15	MOL2	C
ATOM	8000	CG	TRP	E	52	25.353	-55.231	-87.744	1.00	45.30	MOL2	C
ATOM	8001	CD2	TRP	E	52	26.308	-56.259	-87.418	1.00	42.68	MOL2	C
ATOM	8002	CE2	TRP	E	52	27.551	-55.853	-87.930	1.00	41.16	MOL2	C
ATOM	8003	CE3	TRP	E	52	26.230	-57.475	-86.740	1.00	44.00	MOL2	C
ATOM	8004	CD1	TRP	E	52	26.043	-54.285	-88.436	1.00	46.32	MOL2	C
ATOM	8005	NE1	TRP	E	52	27.365	-54.646	-88.548	1.00	47.01	MOL2	N
ATOM	8006	CZ2	TRP	E	52	28.704	-56.614	-87.782	1.00	33.73	MOL2	C
ATOM	8007	CZ3	TRP	E	52	27.383	-58.230	-86.596	1.00	44.70	MOL2	C
ATOM	8008	CH2	TRP	E	52	28.601	-57.794	-87.114	1.00	37.12	MOL2	C
ATOM	8009	C	TRP	E	52	23.189	-54.735	-89.665	1.00	58.16	MOL2	C
ATOM	8010	O	TRP	E	52	24.000	-55.148	-90.501	1.00	62.69	MOL2	O
ATOM	8011	N	ASN	E	53	22.536	-53.579	-89.788	1.00	59.20	MOL2	N
ATOM	8012	CA	ASN	E	53	22.713	-52.713	-90.946	1.00	60.83	MOL2	C
ATOM	8013	CB	ASN	E	53	21.368	-52.103	-91.331	1.00	70.19	MOL2	C
ATOM	8014	CG	ASN	E	53	20.325	-53.167	-91.687	1.00	83.70	MOL2	C
ATOM	8015	OD1	ASN	E	53	19.115	-52.957	-91.522	1.00	91.13	MOL2	O
ATOM	8016	ND2	ASN	E	53	20.792	-54.313	-92.188	1.00	82.23	MOL2	N
ATOM	8017	C	ASN	E	53	23.725	-51.629	-90.615	1.00	61.28	MOL2	C
ATOM	8018	O	ASN	E	53	24.013	-51.374	-89.444	1.00	64.11	MOL2	O
ATOM	8019	N	TYR	E	54	24.280	-51.016	-91.654	1.00	58.86	MOL2	N
ATOM	8020	CA	TYR	E	54	25.268	-49.960	-91.501	1.00	61.22	MOL2	C
ATOM	8021	CB	TYR	E	54	26.493	-50.254	-92.369	1.00	67.26	MOL2	C
ATOM	8022	CG	TYR	E	54	27.529	-51.169	-91.755	1.00	84.17	MOL2	C
ATOM	8023	CD1	TYR	E	54	28.531	-51.732	-92.538	1.00	94.87	MOL2	C
ATOM	8024	CE1	TYR	E	54	29.520	-52.546	-91.971	1.00	101.40	MOL2	C
ATOM	8025	CD2	TYR	E	54	27.539	-51.441	-90.389	1.00	91.15	MOL2	C
ATOM	8026	CE2	TYR	E	54	28.525	-52.252	-89.814	1.00	92.49	MOL2	C
ATOM	8027	CZ	TYR	E	54	29.509	-52.799	-90.610	1.00	96.52	MOL2	C
ATOM	8028	OH	TYR	E	54	30.487	-53.596	-90.056	1.00	102.91	MOL2	O
ATOM	8029	C	TYR	E	54	24.622	-48.680	-91.993	1.00	63.34	MOL2	C
ATOM	8030	O	TYR	E	54	23.662	-48.721	-92.755	1.00	66.67	MOL2	O
ATOM	8031	N	THR	E	55	25.140	-47.542	-91.560	1.00	64.79	MOL2	N
ATOM	8032	CA	THR	E	55	24.613	-46.264	-92.004	1.00	61.47	MOL2	C
ATOM	8033	CB	THR	E	55	23.485	-45.757	-91.107	1.00	61.61	MOL2	C
ATOM	8034	OG1	THR	E	55	23.001	-46.822	-90.274	1.00	63.86	MOL2	O
ATOM	8035	CG2	THR	E	55	22.352	-45.240	-91.970	1.00	64.48	MOL2	C
ATOM	8036	C	THR	E	55	25.792	-45.324	-91.926	1.00	63.76	MOL2	C
ATOM	8037	O	THR	E	55	26.353	-45.105	-90.851	1.00	70.50	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	8038	N	VAL	E	56	26.177	-44.774	-93.068	1.00	61.24	MOL2	N
ATOM	8039	CA	VAL	E	56	27.331	-43.899	-93.110	1.00	63.31	MOL2	C
ATOM	8040	CB	VAL	E	56	28.201	-44.233	-94.312	1.00	62.79	MOL2	C
ATOM	8041	CG1	VAL	E	56	29.659	-44.194	-93.907	1.00	70.35	MOL2	C
ATOM	8042	CG2	VAL	E	56	27.818	-45.592	-94.866	1.00	59.65	MOL2	C
ATOM	8043	C	VAL	E	56	27.000	-42.427	-93.164	1.00	63.17	MOL2	C
ATOM	8044	O	VAL	E	56	26.024	-42.020	-93.786	1.00	72.43	MOL2	O
ATOM	8045	N	THR	E	57	27.833	-41.629	-92.521	1.00	58.69	MOL2	N
ATOM	8046	CA	THR	E	57	27.626	-40.201	-92.499	1.00	63.82	MOL2	C
ATOM	8047	CB	THR	E	57	27.309	-39.733	-91.056	1.00	67.38	MOL2	C
ATOM	8048	OG1	THR	E	57	28.520	-39.593	-90.290	1.00	63.97	MOL2	O
ATOM	8049	CG2	THR	E	57	26.404	-40.776	-90.374	1.00	65.24	MOL2	C
ATOM	8050	C	THR	E	57	28.934	-39.622	-92.990	1.00	62.36	MOL2	C
ATOM	8051	O	THR	E	57	29.990	-40.123	-92.640	1.00	58.52	MOL2	O
ATOM	8052	N	TRP	E	58	28.871	-38.589	-93.819	1.00	62.62	MOL2	N
ATOM	8053	CA	TRP	E	58	30.092	-37.987	-94.332	1.00	58.98	MOL2	C
ATOM	8054	CB	TRP	E	58	30.190	-38.250	-95.846	1.00	59.77	MOL2	C
ATOM	8055	CG	TRP	E	58	31.457	-37.738	-96.444	1.00	64.58	MOL2	C
ATOM	8056	CD2	TRP	E	58	31.589	-36.681	-97.400	1.00	65.84	MOL2	C
ATOM	8057	CE2	TRP	E	58	32.965	-36.450	-97.576	1.00	63.71	MOL2	C
ATOM	8058	CE3	TRP	E	58	30.676	-35.903	-98.120	1.00	68.04	MOL2	C
ATOM	8059	CD1	TRP	E	58	32.727	-38.103	-96.104	1.00	62.50	MOL2	C
ATOM	8060	NE1	TRP	E	58	33.637	-37.335	-96.775	1.00	61.01	MOL2	N
ATOM	8061	CZ2	TRP	E	58	33.452	-35.472	-98.437	1.00	61.12	MOL2	C
ATOM	8062	CZ3	TRP	E	58	31.160	-34.935	-98.974	1.00	64.62	MOL2	C
ATOM	8063	CH2	TRP	E	58	32.537	-34.727	-99.124	1.00	63.57	MOL2	C
ATOM	8064	C	TRP	E	58	30.141	-36.490	-94.028	1.00	56.58	MOL2	C
ATOM	8065	O	TRP	E	58	29.213	-35.754	-94.348	1.00	63.01	MOL2	O
ATOM	8066	N	ASP	E	59	31.219	-36.043	-93.401	1.00	50.44	MOL2	N
ATOM	8067	CA	ASP	E	59	31.363	-34.635	-93.050	1.00	52.34	MOL2	C
ATOM	8068	CB	ASP	E	59	31.127	-34.435	-91.550	1.00	57.20	MOL2	C
ATOM	8069	CG	ASP	E	59	31.466	-33.029	-91.076	1.00	63.00	MOL2	C
ATOM	8070	OD1	ASP	E	59	32.027	-32.228	-91.853	1.00	61.86	MOL2	O
ATOM	8071	OD2	ASP	E	59	31.176	-32.728	-89.900	1.00	72.14	MOL2	O
ATOM	8072	C	ASP	E	59	32.759	-34.199	-93.409	1.00	50.93	MOL2	C
ATOM	8073	O	ASP	E	59	33.728	-34.595	-92.785	1.00	54.75	MOL2	O
ATOM	8074	N	PRO	E	60	32.884	-33.389	-94.444	1.00	51.08	MOL2	N
ATOM	8075	CD	PRO	E	60	32.016	-33.418	-95.623	1.00	50.12	MOL2	C
ATOM	8076	CA	PRO	E	60	34.220	-32.950	-94.817	1.00	52.23	MOL2	C
ATOM	8077	CB	PRO	E	60	33.999	-32.221	-96.147	1.00	48.88	MOL2	C
ATOM	8078	CG	PRO	E	60	32.514	-32.248	-96.376	1.00	44.79	MOL2	C
ATOM	8079	C	PRO	E	60	35.031	-32.157	-93.798	1.00	54.56	MOL2	C
ATOM	8080	O	PRO	E	60	36.230	-32.015	-93.962	1.00	58.78	MOL2	O
ATOM	8081	N	ASN	E	61	34.412	-31.648	-92.746	1.00	57.99	MOL2	N
ATOM	8082	CA	ASN	E	61	35.189	-30.925	-91.753	1.00	65.15	MOL2	C
ATOM	8083	CB	ASN	E	61	34.534	-29.600	-91.392	1.00	76.68	MOL2	C
ATOM	8084	CG	ASN	E	61	34.849	-28.515	-92.392	1.00	85.10	MOL2	C
ATOM	8085	OD1	ASN	E	61	35.999	-28.375	-92.829	1.00	84.88	MOL2	O
ATOM	8086	ND2	ASN	E	61	33.836	-27.727	-92.754	1.00	90.97	MOL2	N
ATOM	8087	C	ASN	E	61	35.329	-31.788	-90.529	1.00	65.74	MOL2	C
ATOM	8088	O	ASN	E	61	35.362	-31.298	-89.398	1.00	73.49	MOL2	O
ATOM	8089	N	ARG	E	62	35.423	-33.088	-90.778	1.00	64.01	MOL2	N
ATOM	8090	CA	ARG	E	62	35.541	-34.092	-89.724	1.00	61.06	MOL2	C
ATOM	8091	CB	ARG	E	62	34.194	-34.787	-89.500	1.00	50.21	MOL2	C
ATOM	8092	CG	ARG	E	62	34.311	-36.035	-88.668	1.00	42.12	MOL2	C
ATOM	8093	CD	ARG	E	62	32.982	-36.696	-88.378	1.00	38.17	MOL2	C
ATOM	8094	NE	ARG	E	62	32.435	-37.392	-89.534	1.00	33.78	MOL2	N
ATOM	8095	CZ	ARG	E	62	31.304	-38.096	-89.503	1.00	39.49	MOL2	C
ATOM	8096	NH1	ARG	E	62	30.614	-38.194	-88.381	1.00	40.48	MOL2	N
ATOM	8097	NH2	ARG	E	62	30.849	-38.700	-90.587	1.00	40.15	MOL2	N
ATOM	8098	C	ARG	E	62	36.548	-35.172	-90.073	1.00	60.67	MOL2	C
ATOM	8099	O	ARG	E	62	36.480	-35.764	-91.150	1.00	58.25	MOL2	O
ATOM	8100	N	TYR	E	63	37.485	-35.441	-89.174	1.00	59.80	MOL2	N
ATOM	8101	CA	TYR	E	63	38.432	-36.512	-89.439	1.00	60.11	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8102	CB	TYR	E	63	39.871	-36.025	-89.508	1.00	72.93	MOL2	C
ATOM	8103	CG	TYR	E	63	40.835	-37.175	-89.726	1.00	74.02	MOL2	C
ATOM	8104	CD1	TYR	E	63	42.055	-37.229	-89.071	1.00	76.81	MOL2	C
ATOM	8105	CE1	TYR	E	63	42.919	-38.290	-89.260	1.00	81.34	MOL2	C
ATOM	8106	CD2	TYR	E	63	40.510	-38.210	-90.577	1.00	77.48	MOL2	C
ATOM	8107	CE2	TYR	E	63	41.364	-39.269	-90.775	1.00	84.68	MOL2	C
ATOM	8108	CZ	TYR	E	63	42.570	-39.310	-90.116	1.00	82.69	MOL2	C
ATOM	8109	OH	TYR	E	63	43.422	-40.375	-90.330	1.00	82.64	MOL2	O
ATOM	8110	C	TYR	E	63	38.356	-37.546	-88.346	1.00	55.62	MOL2	C
ATOM	8111	O	TYR	E	63	38.590	-37.246	-87.172	1.00	57.14	MOL2	O
ATOM	8112	N	PRO	E	64	37.989	-38.775	-88.710	1.00	49.22	MOL2	N
ATOM	8113	CD	PRO	E	64	37.768	-39.882	-87.772	1.00	51.20	MOL2	C
ATOM	8114	CA	PRO	E	64	37.652	-39.199	-90.067	1.00	52.71	MOL2	C
ATOM	8115	CB	PRO	E	64	37.484	-40.694	-89.914	1.00	52.36	MOL2	C
ATOM	8116	CG	PRO	E	64	36.860	-40.793	-88.578	1.00	49.85	MOL2	C
ATOM	8117	C	PRO	E	64	36.375	-38.570	-90.606	1.00	58.88	MOL2	C
ATOM	8118	O	PRO	E	64	35.459	-38.254	-89.856	1.00	64.95	MOL2	O
ATOM	8119	N	SER	E	65	36.309	-38.428	-91.921	1.00	58.49	MOL2	N
ATOM	8120	CA	SER	E	65	35.155	-37.842	-92.568	1.00	58.30	MOL2	C
ATOM	8121	CB	SER	E	65	35.487	-37.534	-94.021	1.00	58.38	MOL2	C
ATOM	8122	OG	SER	E	65	35.377	-38.696	-94.813	1.00	50.72	MOL2	O
ATOM	8123	C	SER	E	65	33.939	-38.758	-92.517	1.00	58.26	MOL2	C
ATOM	8124	O	SER	E	65	32.811	-38.297	-92.299	1.00	65.58	MOL2	O
ATOM	8125	N	GLU	E	66	34.156	-40.047	-92.739	1.00	49.77	MOL2	N
ATOM	8126	CA	GLU	E	66	33.054	-40.996	-92.716	1.00	51.35	MOL2	C
ATOM	8127	CB	GLU	E	66	33.248	-42.107	-93.761	1.00	53.88	MOL2	C
ATOM	8128	CG	GLU	E	66	34.518	-41.987	-94.597	1.00	82.21	MOL2	C
ATOM	8129	CD	GLU	E	66	35.815	-42.096	-93.773	1.00	93.90	MOL2	C
ATOM	8130	OE1	GLU	E	66	36.344	-43.224	-93.624	1.00	101.45	MOL2	O
ATOM	8131	OE2	GLU	E	66	36.306	-41.054	-93.271	1.00	97.26	MOL2	O
ATOM	8132	C	GLU	E	66	32.971	-41.626	-91.347	1.00	49.22	MOL2	C
ATOM	8133	O	GLU	E	66	33.986	-41.945	-90.748	1.00	53.58	MOL2	O
ATOM	8134	N	VAL	E	67	31.763	-41.766	-90.825	1.00	48.38	MOL2	N
ATOM	8135	CA	VAL	E	67	31.592	-42.432	-89.552	1.00	44.38	MOL2	C
ATOM	8136	CB	VAL	E	67	31.315	-41.495	-88.419	1.00	41.29	MOL2	C
ATOM	8137	CG1	VAL	E	67	31.101	-42.303	-87.156	1.00	34.89	MOL2	C
ATOM	8138	CG2	VAL	E	67	32.487	-40.566	-88.243	1.00	44.80	MOL2	C
ATOM	8139	C	VAL	E	67	30.424	-43.350	-89.718	1.00	46.42	MOL2	C
ATOM	8140	O	VAL	E	67	29.305	-42.915	-89.974	1.00	52.39	MOL2	O
ATOM	8141	N	VAL	E	68	30.692	-44.637	-89.598	1.00	46.79	MOL2	N
ATOM	8142	CA	VAL	E	68	29.639	-45.615	-89.767	1.00	48.74	MOL2	C
ATOM	8143	CB	VAL	E	68	30.083	-46.733	-90.699	1.00	44.80	MOL2	C
ATOM	8144	CG1	VAL	E	68	31.587	-46.827	-90.679	1.00	51.42	MOL2	C
ATOM	8145	CG2	VAL	E	68	29.438	-48.049	-90.273	1.00	38.95	MOL2	C
ATOM	8146	C	VAL	E	68	29.115	-46.204	-88.463	1.00	51.62	MOL2	C
ATOM	8147	O	VAL	E	68	29.884	-46.640	-87.593	1.00	51.97	MOL2	O
ATOM	8148	N	GLN	E	69	27.785	-46.196	-88.360	1.00	48.19	MOL2	N
ATOM	8149	CA	GLN	E	69	27.055	-46.676	-87.200	1.00	44.45	MOL2	C
ATOM	8150	CB	GLN	E	69	26.099	-45.604	-86.732	1.00	39.76	MOL2	C
ATOM	8151	CG	GLN	E	69	26.752	-44.362	-86.241	1.00	44.61	MOL2	C
ATOM	8152	CD	GLN	E	69	27.284	-44.556	-84.865	1.00	52.58	MOL2	C
ATOM	8153	OE1	GLN	E	69	26.876	-45.488	-84.159	1.00	60.19	MOL2	O
ATOM	8154	NE2	GLN	E	69	28.186	-43.674	-84.451	1.00	52.03	MOL2	N
ATOM	8155	C	GLN	E	69	26.247	-47.885	-87.602	1.00	48.34	MOL2	C
ATOM	8156	O	GLN	E	69	25.657	-47.909	-88.674	1.00	49.92	MOL2	O
ATOM	8157	N	ALA	E	70	26.201	-48.886	-86.738	1.00	49.90	MOL2	N
ATOM	8158	CA	ALA	E	70	25.438	-50.081	-87.053	1.00	52.19	MOL2	C
ATOM	8159	CB	ALA	E	70	26.241	-51.297	-86.697	1.00	56.24	MOL2	C
ATOM	8160	C	ALA	E	70	24.123	-50.083	-86.293	1.00	54.52	MOL2	C
ATOM	8161	O	ALA	E	70	23.935	-49.283	-85.389	1.00	64.93	MOL2	O
ATOM	8162	N	GLN	E	71	23.205	-50.967	-86.668	1.00	51.19	MOL2	N
ATOM	8163	CA	GLN	E	71	21.927	-51.077	-85.971	1.00	48.31	MOL2	C
ATOM	8164	CB	GLN	E	71	20.872	-50.148	-86.568	1.00	54.09	MOL2	C
ATOM	8165	CG	GLN	E	71	21.257	-49.407	-87.821	1.00	72.60	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8166	CD	GLN	E	71	20.024	-48.832	-88.507	1.00	89.45	MOL2	C
ATOM	8167	OE1	GLN	E	71	19.225	-48.123	-87.880	1.00	92.14	MOL2	O
ATOM	8168	NE2	GLN	E	71	19.856	-49.143	-89.798	1.00	91.96	MOL2	N
ATOM	8169	C	GLN	E	71	21.441	-52.513	-86.053	1.00	41.89	MOL2	C
ATOM	8170	O	GLN	E	71	21.283	-53.038	-87.138	1.00	39.47	MOL2	O
ATOM	8171	N	CYS	E	72	21.202	-53.158	-84.917	1.00	40.31	MOL2	N
ATOM	8172	CA	CYS	E	72	20.753	-54.550	-84.954	1.00	44.02	MOL2	C
ATOM	8173	C	CYS	E	72	19.472	-54.722	-85.763	1.00	48.09	MOL2	C
ATOM	8174	O	CYS	E	72	18.469	-54.048	-85.531	1.00	46.70	MOL2	O
ATOM	8175	CB	CYS	E	72	20.566	-55.108	-83.540	1.00	43.82	MOL2	C
ATOM	8176	SG	CYS	E	72	22.020	-54.777	-82.503	1.00	50.10	MOL2	S
ATOM	8177	N	ARG	E	73	19.517	-55.645	-86.719	1.00	55.21	MOL2	C
ATOM	8178	CA	ARG	E	73	18.382	-55.909	-87.592	1.00	58.95	MOL2	C
ATOM	8179	CB	ARG	E	73	18.808	-56.797	-88.756	1.00	62.39	MOL2	C
ATOM	8180	CG	ARG	E	73	19.601	-56.092	-89.847	1.00	77.27	MOL2	C
ATOM	8181	CD	ARG	E	73	19.235	-56.699	-91.191	1.00	91.12	MOL2	C
ATOM	8182	NE	ARG	E	73	18.715	-58.048	-90.981	1.00	107.33	MOL2	N
ATOM	8183	CZ	ARG	E	73	18.205	-58.827	-91.928	1.00	113.35	MOL2	C
ATOM	8184	NH1	ARG	E	73	18.141	-58.395	-93.185	1.00	113.41	MOL2	N
ATOM	8185	NH2	ARG	E	73	17.748	-60.037	-91.606	1.00	114.87	MOL2	N
ATOM	8186	C	ARG	E	73	17.146	-56.522	-86.945	1.00	61.16	MOL2	C
ATOM	8187	O	ARG	E	73	16.032	-56.280	-87.408	1.00	63.88	MOL2	O
ATOM	8188	N	ASN	E	74	17.331	-57.309	-85.887	1.00	60.75	MOL2	N
ATOM	8189	CA	ASN	E	74	16.211	-57.957	-85.204	1.00	58.58	MOL2	C
ATOM	8190	CB	ASN	E	74	16.179	-59.432	-85.573	1.00	63.88	MOL2	C
ATOM	8191	CG	ASN	E	74	15.723	-59.657	-86.987	1.00	73.21	MOL2	C
ATOM	8192	OD1	ASN	E	74	16.306	-60.453	-87.730	1.00	77.35	MOL2	O
ATOM	8193	ND2	ASN	E	74	14.656	-58.960	-87.373	1.00	82.26	MOL2	N
ATOM	8194	C	ASN	E	74	16.307	-57.836	-83.696	1.00	55.64	MOL2	C
ATOM	8195	O	ASN	E	74	17.282	-57.316	-83.175	1.00	54.84	MOL2	O
ATOM	8196	N	LEU	E	75	15.292	-58.320	-82.992	1.00	55.82	MOL2	N
ATOM	8197	CA	LEU	E	75	15.304	-58.273	-81.534	1.00	57.06	MOL2	C
ATOM	8198	CB	LEU	E	75	13.893	-58.148	-80.958	1.00	52.04	MOL2	C
ATOM	8199	CG	LEU	E	75	13.217	-56.784	-80.985	1.00	51.80	MOL2	C
ATOM	8200	CD1	LEU	E	75	12.080	-56.788	-79.997	1.00	49.65	MOL2	C
ATOM	8201	CD2	LEU	E	75	14.206	-55.703	-80.609	1.00	55.31	MOL2	C
ATOM	8202	C	LEU	E	75	15.921	-59.545	-80.997	1.00	63.81	MOL2	C
ATOM	8203	O	LEU	E	75	16.712	-59.510	-80.055	1.00	68.47	MOL2	O
ATOM	8204	N	GLY	E	76	15.536	-60.676	-81.584	1.00	66.68	MOL2	N
ATOM	8205	CA	GLY	E	76	16.087	-61.949	-81.158	1.00	71.12	MOL2	C
ATOM	8206	C	GLY	E	76	17.291	-62.285	-82.022	1.00	76.93	MOL2	C
ATOM	8207	O	GLY	E	76	17.827	-61.409	-82.705	1.00	79.58	MOL2	O
ATOM	8208	N	CYS	E	77	17.736	-63.539	-81.996	1.00	78.39	MOL2	N
ATOM	8209	CA	CYS	E	77	18.875	-63.957	-82.816	1.00	78.17	MOL2	C
ATOM	8210	C	CYS	E	77	18.320	-64.899	-83.858	1.00	76.71	MOL2	C
ATOM	8211	O	CYS	E	77	17.166	-65.294	-83.764	1.00	81.20	MOL2	O
ATOM	8212	CB	CYS	E	77	19.917	-64.690	-81.977	1.00	78.22	MOL2	C
ATOM	8213	SG	CYS	E	77	20.364	-63.798	-80.459	1.00	89.73	MOL2	S
ATOM	8214	N	ILE	E	78	19.112	-65.263	-84.857	1.00	76.75	MOL2	N
ATOM	8215	CA	ILE	E	78	18.595	-66.174	-85.862	1.00	80.49	MOL2	C
ATOM	8216	CB	ILE	E	78	18.601	-65.556	-87.258	1.00	75.11	MOL2	C
ATOM	8217	CG2	ILE	E	78	17.856	-64.245	-87.222	1.00	64.70	MOL2	C
ATOM	8218	CG1	ILE	E	78	20.034	-65.386	-87.764	1.00	85.80	MOL2	C
ATOM	8219	CD1	ILE	E	78	20.612	-66.611	-88.489	1.00	90.17	MOL2	C
ATOM	8220	C	ILE	E	78	19.332	-67.492	-85.885	1.00	89.07	MOL2	C
ATOM	8221	O	ILE	E	78	20.520	-67.550	-85.586	1.00	92.56	MOL2	O
ATOM	8222	N	ASN	E	79	18.617	-68.562	-86.221	1.00	98.50	MOL2	N
ATOM	8223	CA	ASN	E	79	19.241	-69.877	-86.256	1.00	110.09	MOL2	C
ATOM	8224	CB	ASN	E	79	18.358	-70.928	-85.585	1.00	107.86	MOL2	C
ATOM	8225	CG	ASN	E	79	17.128	-71.233	-86.377	1.00	108.80	MOL2	C
ATOM	8226	OD1	ASN	E	79	16.256	-70.385	-86.534	1.00	110.53	MOL2	O
ATOM	8227	ND2	ASN	E	79	17.047	-72.452	-86.897	1.00	113.64	MOL2	N
ATOM	8228	C	ASN	E	79	19.592	-70.311	-87.671	1.00	118.27	MOL2	C
ATOM	8229	O	ASN	E	79	19.956	-69.475	-88.501	1.00	121.27	MOL2	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	8230	N	ALA	E	80	19.514	-71.615	-87.935	1.00125.19	MOL2	N
ATOM	8231	CA	ALA	E	80	19.834	-72.158	-89.256	1.00130.61	MOL2	C
ATOM	8232	CB	ALA	E	80	19.715	-73.673	-89.235	1.00128.53	MOL2	C
ATOM	8233	C	ALA	E	80	18.878	-71.571	-90.291	1.00134.25	MOL2	C
ATOM	8234	O	ALA	E	80	18.054	-72.287	-90.865	1.00133.17	MOL2	O
ATOM	8235	N	GLN	E	81	19.009	-70.265	-90.521	1.00137.89	MOL2	N
ATOM	8236	CA	GLN	E	81	18.156	-69.523	-91.445	1.00139.14	MOL2	C
ATOM	8237	CB	GLN	E	81	18.337	-70.014	-92.887	1.00144.30	MOL2	C
ATOM	8238	CG	GLN	E	81	19.145	-69.054	-93.762	1.00149.40	MOL2	C
ATOM	8239	CD	GLN	E	81	19.094	-69.405	-95.243	1.00152.30	MOL2	C
ATOM	8240	OE1	GLN	E	81	19.635	-70.427	-95.671	1.00153.27	MOL2	O
ATOM	8241	NE2	GLN	E	81	18.436	-68.556	-96.031	1.00150.03	MOL2	N
ATOM	8242	C	GLN	E	81	16.698	-69.655	-91.021	1.00135.84	MOL2	C
ATOM	8243	O	GLN	E	81	15.786	-69.412	-91.808	1.00135.95	MOL2	O
ATOM	8244	N	GLY	E	82	16.489	-70.022	-89.760	1.00131.45	MOL2	N
ATOM	8245	CA	GLY	E	82	15.140	-70.198	-89.255	1.00126.03	MOL2	C
ATOM	8246	C	GLY	E	82	14.604	-69.061	-88.410	1.00119.59	MOL2	C
ATOM	8247	O	GLY	E	82	14.038	-69.284	-87.342	1.00117.87	MOL2	O
ATOM	8248	N	LYS	E	83	14.769	-67.842	-88.903	1.00114.72	MOL2	N
ATOM	8249	CA	LYS	E	83	14.314	-66.643	-88.210	1.00114.48	MOL2	C
ATOM	8250	CB	LYS	E	83	12.882	-66.288	-88.642	1.00119.53	MOL2	C
ATOM	8251	CG	LYS	E	83	12.830	-65.305	-89.833	1.00123.26	MOL2	C
ATOM	8252	CD	LYS	E	83	13.557	-63.989	-89.496	1.00122.89	MOL2	C
ATOM	8253	CE	LYS	E	83	13.596	-62.996	-90.660	1.00121.89	MOL2	C
ATOM	8254	NZ	LYS	E	83	14.360	-61.750	-90.315	1.00114.22	MOL2	N
ATOM	8255	C	LYS	E	83	14.442	-66.610	-86.677	1.00108.72	MOL2	C
ATOM	8256	O	LYS	E	83	14.914	-67.556	-86.047	1.00105.13	MOL2	O
ATOM	8257	N	GLU	E	84	14.023	-65.482	-86.105	1.00102.09	MOL2	N
ATOM	8258	CA	GLU	E	84	14.101	-65.198	-84.678	1.00 91.74	MOL2	C
ATOM	8259	CB	GLU	E	84	13.147	-64.053	-84.329	1.00 87.64	MOL2	C
ATOM	8260	CG	GLU	E	84	13.637	-62.700	-84.802	1.00 86.66	MOL2	C
ATOM	8261	CD	GLU	E	84	12.865	-61.559	-84.198	1.00 87.09	MOL2	C
ATOM	8262	OE1	GLU	E	84	13.296	-60.396	-84.357	1.00 88.12	MOL2	O
ATOM	8263	OE2	GLU	E	84	11.823	-61.824	-83.565	1.00 92.87	MOL2	O
ATOM	8264	C	GLU	E	84	13.908	-66.315	-83.676	1.00 87.00	MOL2	C
ATOM	8265	O	GLU	E	84	13.220	-67.293	-83.926	1.00 89.11	MOL2	O
ATOM	8266	N	ASP	E	85	14.546	-66.139	-82.528	1.00 82.08	MOL2	N
ATOM	8267	CA	ASP	E	85	14.463	-67.066	-81.416	1.00 77.74	MOL2	C
ATOM	8268	CB	ASP	E	85	15.656	-68.012	-81.403	1.00 75.72	MOL2	C
ATOM	8269	CG	ASP	E	85	15.702	-68.864	-80.144	1.00 80.58	MOL2	C
ATOM	8270	OD1	ASP	E	85	16.701	-69.580	-79.925	1.00 85.99	MOL2	O
ATOM	8271	OD2	ASP	E	85	14.729	-68.821	-79.365	1.00 83.71	MOL2	O
ATOM	8272	C	ASP	E	85	14.509	-66.192	-80.174	1.00 78.30	MOL2	C
ATOM	8273	O	ASP	E	85	15.496	-66.208	-79.440	1.00 80.45	MOL2	O
ATOM	8274	N	ILE	E	86	13.443	-65.427	-79.951	1.00 75.25	MOL2	N
ATOM	8275	CA	ILE	E	86	13.344	-64.510	-78.819	1.00 71.69	MOL2	C
ATOM	8276	CB	ILE	E	86	11.875	-64.045	-78.634	1.00 71.23	MOL2	C
ATOM	8277	CG2	ILE	E	86	11.667	-63.457	-77.263	1.00 77.83	MOL2	C
ATOM	8278	CG1	ILE	E	86	11.527	-62.988	-79.674	1.00 69.23	MOL2	C
ATOM	8279	CD1	ILE	E	86	11.462	-63.523	-81.068	1.00 79.34	MOL2	C
ATOM	8280	C	ILE	E	86	13.881	-65.028	-77.481	1.00 71.67	MOL2	C
ATOM	8281	O	ILE	E	86	14.058	-64.248	-76.543	1.00 67.22	MOL2	O
ATOM	8282	N	SER	E	87	14.145	-66.330	-77.376	1.00 72.81	MOL2	N
ATOM	8283	CA	SER	E	87	14.654	-66.859	-76.116	1.00 72.24	MOL2	C
ATOM	8284	CB	SER	E	87	14.984	-68.359	-76.223	1.00 72.21	MOL2	C
ATOM	8285	OG	SER	E	87	15.928	-68.635	-77.239	1.00 78.01	MOL2	O
ATOM	8286	C	SER	E	87	15.886	-66.044	-75.729	1.00 71.37	MOL2	C
ATOM	8287	O	SER	E	87	16.111	-65.770	-74.544	1.00 70.16	MOL2	O
ATOM	8288	N	MET	E	88	16.646	-65.633	-76.746	1.00 68.20	MOL2	N
ATOM	8289	CA	MET	E	88	17.861	-64.833	-76.588	1.00 68.21	MOL2	C
ATOM	8290	CB	MET	E	88	19.088	-65.642	-77.008	1.00 77.59	MOL2	C
ATOM	8291	CG	MET	E	88	19.161	-67.040	-76.439	1.00 86.89	MOL2	C
ATOM	8292	SD	MET	E	88	20.421	-68.022	-77.268	1.00102.29	MOL2	S
ATOM	8293	CE	MET	E	88	19.438	-68.906	-78.523	1.00 93.64	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8294	C	MET	E	88	17.738	-63.650	-77.539	1.00	62.85	MOL2	C
ATOM	8295	O	MET	E	88	17.182	-63.792	-78.619	1.00	65.48	MOL2	O
ATOM	8296	N	ASN	E	89	18.272	-62.496	-77.166	1.00	55.62	MOL2	N
ATOM	8297	CA	ASN	E	89	18.178	-61.335	-78.040	1.00	50.85	MOL2	C
ATOM	8298	CB	ASN	E	89	17.564	-60.161	-77.288	1.00	49.55	MOL2	C
ATOM	8299	CG	ASN	E	89	16.982	-60.568	-75.947	1.00	57.40	MOL2	C
ATOM	8300	OD1	ASN	E	89	17.692	-60.692	-74.938	1.00	53.95	MOL2	O
ATOM	8301	ND2	ASN	E	89	15.676	-60.787	-75.932	1.00	61.21	MOL2	N
ATOM	8302	C	ASN	E	89	19.536	-60.915	-78.556	1.00	50.59	MOL2	C
ATOM	8303	O	ASN	E	89	20.570	-61.272	-77.981	1.00	48.04	MOL2	O
ATOM	8304	N	SER	E	90	19.519	-60.154	-79.648	1.00	48.61	MOL2	N
ATOM	8305	CA	SER	E	90	20.740	-59.633	-80.244	1.00	47.70	MOL2	C
ATOM	8306	CB	SER	E	90	20.662	-59.693	-81.773	1.00	46.19	MOL2	C
ATOM	8307	OG	SER	E	90	19.531	-59.018	-82.267	1.00	50.16	MOL2	O
ATOM	8308	C	SER	E	90	20.874	-58.195	-79.752	1.00	44.95	MOL2	C
ATOM	8309	O	SER	E	90	19.905	-57.450	-79.738	1.00	44.20	MOL2	O
ATOM	8310	N	VAL	E	91	22.072	-57.813	-79.330	1.00	44.28	MOL2	N
ATOM	8311	CA	VAL	E	91	22.288	-56.475	-78.808	1.00	43.66	MOL2	C
ATOM	8312	CB	VAL	E	91	22.482	-56.538	-77.309	1.00	41.57	MOL2	C
ATOM	8313	CG1	VAL	E	91	21.187	-56.883	-76.658	1.00	44.38	MOL2	C
ATOM	8314	CG2	VAL	E	91	23.499	-57.607	-76.977	1.00	39.58	MOL2	C
ATOM	8315	C	VAL	E	91	23.487	-55.773	-79.427	1.00	44.74	MOL2	C
ATOM	8316	O	VAL	E	91	24.452	-56.403	-79.835	1.00	43.70	MOL2	O
ATOM	8317	N	PRO	E	92	23.440	-54.443	-79.496	1.00	42.31	MOL2	N
ATOM	8318	CD	PRO	E	92	22.345	-53.554	-79.093	1.00	42.44	MOL2	C
ATOM	8319	CA	PRO	E	92	24.530	-53.673	-80.072	1.00	40.29	MOL2	C
ATOM	8320	CB	PRO	E	92	23.917	-52.298	-80.247	1.00	40.11	MOL2	C
ATOM	8321	CG	PRO	E	92	23.028	-52.208	-79.090	1.00	41.06	MOL2	C
ATOM	8322	C	PRO	E	92	25.748	-53.621	-79.191	1.00	43.13	MOL2	C
ATOM	8323	O	PRO	E	92	25.655	-53.723	-77.974	1.00	42.59	MOL2	O
ATOM	8324	N	ILE	E	93	26.892	-53.453	-79.837	1.00	48.16	MOL2	N
ATOM	8325	CA	ILE	E	93	28.187	-53.343	-79.180	1.00	49.81	MOL2	C
ATOM	8326	CB	ILE	E	93	29.195	-54.299	-79.803	1.00	46.92	MOL2	C
ATOM	8327	CG2	ILE	E	93	30.533	-54.107	-79.178	1.00	44.02	MOL2	C
ATOM	8328	CG1	ILE	E	93	28.729	-55.730	-79.601	1.00	51.27	MOL2	C
ATOM	8329	CD1	ILE	E	93	28.373	-56.023	-78.157	1.00	53.71	MOL2	C
ATOM	8330	C	ILE	E	93	28.624	-51.935	-79.503	1.00	52.28	MOL2	C
ATOM	8331	O	ILE	E	93	28.746	-51.587	-80.679	1.00	57.40	MOL2	O
ATOM	8332	N	GLN	E	94	28.865	-51.123	-78.485	1.00	49.84	MOL2	N
ATOM	8333	CA	GLN	E	94	29.246	-49.742	-78.732	1.00	56.54	MOL2	C
ATOM	8334	CB	GLN	E	94	28.224	-48.823	-78.052	1.00	59.34	MOL2	C
ATOM	8335	CG	GLN	E	94	26.780	-49.139	-78.458	1.00	70.43	MOL2	C
ATOM	8336	CD	GLN	E	94	25.730	-48.440	-77.604	1.00	75.73	MOL2	C
ATOM	8337	OE1	GLN	E	94	25.596	-47.216	-77.637	1.00	77.91	MOL2	O
ATOM	8338	NE2	GLN	E	94	24.974	-49.223	-76.836	1.00	79.77	MOL2	N
ATOM	8339	C	GLN	E	94	30.660	-49.417	-78.269	1.00	59.38	MOL2	C
ATOM	8340	O	GLN	E	94	31.153	-49.996	-77.309	1.00	65.31	MOL2	O
ATOM	8341	N	GLN	E	95	31.302	-48.484	-78.962	1.00	61.31	MOL2	N
ATOM	8342	CA	GLN	E	95	32.663	-48.063	-78.653	1.00	62.87	MOL2	C
ATOM	8343	CB	GLN	E	95	33.612	-48.677	-79.690	1.00	67.12	MOL2	C
ATOM	8344	CG	GLN	E	95	34.979	-48.016	-79.837	1.00	74.36	MOL2	C
ATOM	8345	CD	GLN	E	95	35.848	-48.154	-78.597	1.00	85.35	MOL2	C
ATOM	8346	OE1	GLN	E	95	37.015	-47.749	-78.601	1.00	89.40	MOL2	O
ATOM	8347	NE2	GLN	E	95	35.287	-48.723	-77.526	1.00	86.40	MOL2	N
ATOM	8348	C	GLN	E	95	32.753	-46.541	-78.705	1.00	64.12	MOL2	C
ATOM	8349	O	GLN	E	95	32.292	-45.928	-79.663	1.00	65.85	MOL2	O
ATOM	8350	N	GLU	E	96	33.327	-45.927	-77.676	1.00	65.29	MOL2	N
ATOM	8351	CA	GLU	E	96	33.480	-44.477	-77.663	1.00	68.39	MOL2	C
ATOM	8352	CB	GLU	E	96	33.680	-43.969	-76.235	1.00	81.52	MOL2	C
ATOM	8353	CG	GLU	E	96	34.980	-44.494	-75.605	1.00	107.35	MOL2	C
ATOM	8354	CD	GLU	E	96	35.366	-43.816	-74.290	1.00	119.77	MOL2	C
ATOM	8355	OE1	GLU	E	96	34.585	-43.908	-73.313	1.00	126.29	MOL2	O
ATOM	8356	OE2	GLU	E	96	36.460	-43.199	-74.236	1.00	121.87	MOL2	O
ATOM	8357	C	GLU	E	96	34.734	-44.177	-78.478	1.00	63.33	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8358	O	GLU	E	96	35.786	-44.764	-78.248	1.00	58.01	MOL2	O
ATOM	8359	N	THR	E	97	34.622	-43.272	-79.438	1.00	63.40	MOL2	N
ATOM	8360	CA	THR	E	97	35.767	-42.914	-80.261	1.00	63.98	MOL2	C
ATOM	8361	CB	THR	E	97	35.613	-43.480	-81.692	1.00	66.25	MOL2	C
ATOM	8362	OG1	THR	E	97	36.594	-42.892	-82.568	1.00	69.23	MOL2	O
ATOM	8363	CG2	THR	E	97	34.221	-43.211	-82.208	1.00	58.80	MOL2	C
ATOM	8364	C	THR	E	97	35.963	-41.400	-80.332	1.00	62.45	MOL2	C
ATOM	8365	O	THR	E	97	35.090	-40.618	-79.952	1.00	60.21	MOL2	O
ATOM	8366	N	LEU	E	98	37.125	-41.002	-80.825	1.00	58.41	MOL2	N
ATOM	8367	CA	LEU	E	98	37.469	-39.607	-80.950	1.00	51.78	MOL2	C
ATOM	8368	CB	LEU	E	98	38.867	-39.411	-80.421	1.00	47.88	MOL2	C
ATOM	8369	CG	LEU	E	98	39.022	-38.238	-79.499	1.00	44.52	MOL2	C
ATOM	8370	CD1	LEU	E	98	38.088	-38.411	-78.326	1.00	37.36	MOL2	C
ATOM	8371	CD2	LEU	E	98	40.465	-38.175	-79.066	1.00	45.64	MOL2	C
ATOM	8372	C	LEU	E	98	37.454	-39.220	-82.414	1.00	52.01	MOL2	C
ATOM	8373	O	LEU	E	98	37.773	-40.036	-83.277	1.00	57.53	MOL2	O
ATOM	8374	N	VAL	E	99	37.084	-37.979	-82.693	1.00	47.39	MOL2	N
ATOM	8375	CA	VAL	E	99	37.076	-37.466	-84.059	1.00	43.63	MOL2	C
ATOM	8376	CB	VAL	E	99	35.686	-37.468	-84.676	1.00	36.40	MOL2	C
ATOM	8377	CG1	VAL	E	99	35.425	-38.771	-85.360	1.00	36.46	MOL2	C
ATOM	8378	CG2	VAL	E	99	34.664	-37.258	-83.598	1.00	40.01	MOL2	C
ATOM	8379	C	VAL	E	99	37.539	-36.038	-83.951	1.00	47.78	MOL2	C
ATOM	8380	O	VAL	E	99	37.568	-35.476	-82.856	1.00	54.67	MOL2	O
ATOM	8381	N	VAL	E	100	37.910	-35.440	-85.071	1.00	49.89	MOL2	N
ATOM	8382	CA	VAL	E	100	38.379	-34.072	-85.021	1.00	53.73	MOL2	C
ATOM	8383	CB	VAL	E	100	39.815	-33.971	-85.542	1.00	46.88	MOL2	C
ATOM	8384	CG1	VAL	E	100	40.419	-32.651	-85.129	1.00	48.36	MOL2	C
ATOM	8385	CG2	VAL	E	100	40.646	-35.096	-84.997	1.00	44.54	MOL2	C
ATOM	8386	C	VAL	E	100	37.489	-33.181	-85.859	1.00	61.88	MOL2	C
ATOM	8387	O	VAL	E	100	37.089	-33.566	-86.954	1.00	61.99	MOL2	O
ATOM	8388	N	ARG	E	101	37.175	-31.999	-85.331	1.00	70.51	MOL2	N
ATOM	8389	CA	ARG	E	101	36.339	-31.027	-86.023	1.00	76.01	MOL2	C
ATOM	8390	CB	ARG	E	101	35.261	-30.471	-85.077	1.00	78.41	MOL2	C
ATOM	8391	CG	ARG	E	101	33.868	-31.075	-85.255	1.00	82.62	MOL2	C
ATOM	8392	CD	ARG	E	101	33.364	-30.846	-86.677	1.00	87.29	MOL2	C
ATOM	8393	NE	ARG	E	101	32.050	-31.429	-86.929	1.00	89.15	MOL2	N
ATOM	8394	CZ	ARG	E	101	31.724	-32.691	-86.666	1.00	97.26	MOL2	C
ATOM	8395	NH1	ARG	E	101	32.615	-33.513	-86.129	1.00	101.19	MOL2	N
ATOM	8396	NH2	ARG	E	101	30.510	-33.144	-86.957	1.00	101.44	MOL2	N
ATOM	8397	C	ARG	E	101	37.212	-29.889	-86.523	1.00	79.13	MOL2	C
ATOM	8398	O	ARG	E	101	38.080	-29.396	-85.798	1.00	80.39	MOL2	O
ATOM	8399	N	ARG	E	102	36.991	-29.487	-87.769	1.00	82.53	MOL2	N
ATOM	8400	CA	ARG	E	102	37.746	-28.394	-88.348	1.00	94.21	MOL2	C
ATOM	8401	CB	ARG	E	102	38.169	-28.751	-89.784	1.00	89.08	MOL2	C
ATOM	8402	CG	ARG	E	102	39.107	-27.719	-90.411	1.00	94.33	MOL2	C
ATOM	8403	CD	ARG	E	102	39.931	-28.228	-91.597	1.00	90.53	MOL2	C
ATOM	8404	NE	ARG	E	102	39.124	-28.737	-92.707	1.00	96.73	MOL2	N
ATOM	8405	CZ	ARG	E	102	39.600	-28.956	-93.932	1.00	96.62	MOL2	C
ATOM	8406	NH1	ARG	E	102	40.873	-28.696	-94.198	1.00	96.35	MOL2	N
ATOM	8407	NH2	ARG	E	102	38.818	-29.460	-94.884	1.00	92.42	MOL2	N
ATOM	8408	C	ARG	E	102	36.859	-27.143	-88.312	1.00	102.33	MOL2	C
ATOM	8409	O	ARG	E	102	36.078	-26.904	-89.227	1.00	109.01	MOL2	O
ATOM	8410	N	LYS	E	103	36.975	-26.358	-87.241	1.00	107.68	MOL2	N
ATOM	8411	CA	LYS	E	103	36.172	-25.150	-87.074	1.00	116.53	MOL2	C
ATOM	8412	CB	LYS	E	103	36.121	-24.745	-85.596	1.00	120.05	MOL2	C
ATOM	8413	CG	LYS	E	103	35.175	-25.552	-84.711	1.00	122.89	MOL2	C
ATOM	8414	CD	LYS	E	103	35.071	-24.912	-83.321	1.00	126.56	MOL2	C
ATOM	8415	CE	LYS	E	103	34.599	-23.449	-83.411	1.00	130.65	MOL2	C
ATOM	8416	NZ	LYS	E	103	34.624	-22.698	-82.111	1.00	128.86	MOL2	N
ATOM	8417	C	LYS	E	103	36.664	-23.956	-87.891	1.00	122.22	MOL2	C
ATOM	8418	O	LYS	E	103	37.867	-23.740	-88.025	1.00	124.36	MOL2	O
ATOM	8419	N	HIS	E	104	35.714	-23.187	-88.424	1.00	128.02	MOL2	N
ATOM	8420	CA	HIS	E	104	35.993	-21.995	-89.223	1.00	133.44	MOL2	C
ATOM	8421	CB	HIS	E	104	36.836	-21.029	-88.407	1.00	135.13	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8422	CG	HIS	E	104	36.226	-20.694	-87.086	1.00141.12	MOL2	C
ATOM	8423	CD2	HIS	E	104	34.936	-20.701	-86.677	1.00143.94	MOL2	C
ATOM	8424	ND1	HIS	E	104	36.974	-20.320	-85.990	1.00145.74	MOL2	N
ATOM	8425	CE1	HIS	E	104	36.170	-20.115	-84.962	1.00148.35	MOL2	C
ATOM	8426	NE2	HIS	E	104	34.928	-20.339	-85.352	1.00148.24	MOL2	N
ATOM	8427	C	HIS	E	104	36.659	-22.305	-90.558	1.00137.66	MOL2	C
ATOM	8428	O	HIS	E	104	36.969	-23.461	-90.851	1.00137.91	MOL2	O
ATOM	8429	N	GLN	E	105	36.865	-21.272	-91.373	1.00141.84	MOL2	N
ATOM	8430	CA	GLN	E	105	37.472	-21.447	-92.694	1.00144.01	MOL2	C
ATOM	8431	CB	GLN	E	105	36.443	-21.151	-93.800	1.00143.87	MOL2	C
ATOM	8432	CG	GLN	E	105	35.011	-21.615	-93.506	1.00145.95	MOL2	C
ATOM	8433	CD	GLN	E	105	34.162	-20.553	-92.795	1.00146.60	MOL2	C
ATOM	8434	OE1	GLN	E	105	34.565	-19.995	-91.772	1.00146.19	MOL2	O
ATOM	8435	NE2	GLN	E	105	32.977	-20.281	-93.339	1.00145.01	MOL2	N
ATOM	8436	C	GLN	E	105	38.702	-20.561	-92.912	1.00144.82	MOL2	C
ATOM	8437	O	GLN	E	105	39.045	-19.725	-92.070	1.00146.22	MOL2	O
ATOM	8438	N	GLY	E	106	39.364	-20.758	-94.049	1.00143.26	MOL2	N
ATOM	8439	CA	GLY	E	106	40.534	-19.965	-94.379	1.00140.46	MOL2	C
ATOM	8440	C	GLY	E	106	41.700	-20.064	-93.416	1.00139.38	MOL2	C
ATOM	8441	O	GLY	E	106	42.065	-21.153	-92.982	1.00136.71	MOL2	O
ATOM	8442	N	CYS	E	107	42.282	-18.914	-93.084	1.00140.88	MOL2	N
ATOM	8443	CA	CYS	E	107	43.436	-18.846	-92.187	1.00141.09	MOL2	C
ATOM	8444	CB	CYS	E	107	44.184	-17.524	-92.394	1.00144.81	MOL2	C
ATOM	8445	SG	CYS	E	107	44.506	-17.088	-94.132	1.00150.21	MOL2	S
ATOM	8446	C	CYS	E	107	43.042	-18.969	-90.724	1.00138.31	MOL2	C
ATOM	8447	O	CYS	E	107	43.869	-19.298	-89.874	1.00134.91	MOL2	O
ATOM	8448	N	SER	E	108	41.775	-18.693	-90.439	1.00137.79	MOL2	N
ATOM	8449	CA	SER	E	108	41.250	-18.761	-89.080	1.00137.28	MOL2	C
ATOM	8450	CB	SER	E	108	40.115	-17.748	-88.935	1.00136.25	MOL2	C
ATOM	8451	OG	SER	E	108	39.337	-17.709	-90.122	1.00133.03	MOL2	O
ATOM	8452	C	SER	E	108	40.755	-20.164	-88.720	1.00135.53	MOL2	C
ATOM	8453	O	SER	E	108	39.730	-20.316	-88.052	1.00135.14	MOL2	O
ATOM	8454	N	VAL	E	109	41.498	-21.183	-89.150	1.00133.48	MOL2	N
ATOM	8455	CA	VAL	E	109	41.126	-22.575	-88.886	1.00127.95	MOL2	C
ATOM	8456	CB	VAL	E	109	41.530	-23.517	-90.053	1.00126.09	MOL2	C
ATOM	8457	CG1	VAL	E	109	43.048	-23.621	-90.153	1.00123.85	MOL2	C
ATOM	8458	CG2	VAL	E	109	40.930	-24.892	-89.832	1.00122.13	MOL2	C
ATOM	8459	C	VAL	E	109	41.701	-23.170	-87.600	1.00125.62	MOL2	C
ATOM	8460	O	VAL	E	109	42.902	-23.074	-87.318	1.00125.31	MOL2	O
ATOM	8461	N	SER	E	110	40.817	-23.792	-86.828	1.00121.03	MOL2	N
ATOM	8462	CA	SER	E	110	41.188	-24.438	-85.576	1.00116.37	MOL2	C
ATOM	8463	CB	SER	E	110	40.598	-23.681	-84.380	1.00118.52	MOL2	C
ATOM	8464	OG	SER	E	110	39.182	-23.629	-84.436	1.00117.06	MOL2	O
ATOM	8465	C	SER	E	110	40.655	-25.869	-85.605	1.00111.82	MOL2	C
ATOM	8466	O	SER	E	110	39.785	-26.195	-86.416	1.00111.72	MOL2	O
ATOM	8467	N	PHE	E	111	41.179	-26.717	-84.724	1.00103.94	MOL2	N
ATOM	8468	CA	PHE	E	111	40.768	-28.117	-84.647	1.00 94.38	MOL2	C
ATOM	8469	CB	PHE	E	111	41.935	-29.025	-84.994	1.00 95.39	MOL2	C
ATOM	8470	CG	PHE	E	111	42.360	-28.947	-86.413	1.00 96.16	MOL2	C
ATOM	8471	CD1	PHE	E	111	43.616	-29.383	-86.790	1.00 98.09	MOL2	C
ATOM	8472	CD2	PHE	E	111	41.498	-28.469	-87.380	1.00 98.78	MOL2	C
ATOM	8473	CE1	PHE	E	111	44.008	-29.345	-88.109	1.00102.22	MOL2	C
ATOM	8474	CE2	PHE	E	111	41.880	-28.426	-88.705	1.00102.39	MOL2	C
ATOM	8475	CZ	PHE	E	111	43.138	-28.865	-89.072	1.00103.46	MOL2	C
ATOM	8476	C	PHE	E	111	40.325	-28.459	-83.246	1.00 89.06	MOL2	C
ATOM	8477	O	PHE	E	111	41.009	-28.124	-82.288	1.00 92.32	MOL2	O
ATOM	8478	N	GLN	E	112	39.205	-29.156	-83.125	1.00 83.17	MOL2	N
ATOM	8479	CA	GLN	E	112	38.696	-29.532	-81.813	1.00 84.29	MOL2	C
ATOM	8480	CB	GLN	E	112	37.455	-28.693	-81.507	1.00 86.73	MOL2	C
ATOM	8481	CG	GLN	E	112	36.813	-28.977	-80.171	1.00 90.55	MOL2	C
ATOM	8482	CD	GLN	E	112	35.873	-27.876	-79.748	1.00 91.46	MOL2	C
ATOM	8483	OE1	GLN	E	112	35.122	-27.334	-80.563	1.00 88.26	MOL2	O
ATOM	8484	NE2	GLN	E	112	35.901	-27.541	-78.462	1.00 97.18	MOL2	N
ATOM	8485	C	GLN	E	112	38.376	-31.031	-81.738	1.00 82.43	MOL2	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8486	O	GLN	E	112	37.858	-31.602	-82.695	1.00	77.70	MOL2	O
ATOM	8487	N	LEU	E	113	38.685	-31.662	-80.602	1.00	80.30	MOL2	N
ATOM	8488	CA	LEU	E	113	38.437	-33.100	-80.425	1.00	74.22	MOL2	C
ATOM	8489	CB	LEU	E	113	39.433	-33.709	-79.433	1.00	66.96	MOL2	C
ATOM	8490	CG	LEU	E	113	40.872	-33.756	-79.932	1.00	65.93	MOL2	C
ATOM	8491	CD1	LEU	E	113	41.740	-34.570	-79.004	1.00	55.44	MOL2	C
ATOM	8492	CD2	LEU	E	113	40.868	-34.357	-81.321	1.00	66.02	MOL2	C
ATOM	8493	C	LEU	E	113	37.043	-33.448	-79.954	1.00	72.97	MOL2	C
ATOM	8494	O	LEU	E	113	36.702	-33.198	-78.803	1.00	80.24	MOL2	O
ATOM	8495	N	GLU	E	114	36.238	-34.032	-80.836	1.00	72.95	MOL2	N
ATOM	8496	CA	GLU	E	114	34.880	-34.440	-80.471	1.00	70.69	MOL2	C
ATOM	8497	CB	GLU	E	114	33.897	-34.241	-81.613	1.00	72.79	MOL2	C
ATOM	8498	CG	GLU	E	114	32.513	-34.748	-81.275	1.00	83.81	MOL2	C
ATOM	8499	CD	GLU	E	114	31.487	-34.412	-82.342	1.00	94.74	MOL2	C
ATOM	8500	OE1	GLU	E	114	30.303	-34.771	-82.148	1.00	100.33	MOL2	O
ATOM	8501	OE2	GLU	E	114	31.859	-33.793	-83.369	1.00	93.70	MOL2	O
ATOM	8502	C	GLU	E	114	34.872	-35.904	-80.088	1.00	66.76	MOL2	C
ATOM	8503	O	GLU	E	114	35.710	-36.679	-80.542	1.00	69.93	MOL2	O
ATOM	8504	N	LYS	E	115	33.911	-36.282	-79.260	1.00	61.81	MOL2	N
ATOM	8505	CA	LYS	E	115	33.806	-37.653	-78.787	1.00	60.98	MOL2	C
ATOM	8506	CB	LYS	E	115	33.812	-37.650	-77.262	1.00	58.52	MOL2	C
ATOM	8507	CG	LYS	E	115	34.286	-38.916	-76.620	1.00	61.92	MOL2	C
ATOM	8508	CD	LYS	E	115	34.557	-38.667	-75.152	1.00	67.44	MOL2	C
ATOM	8509	CE	LYS	E	115	35.260	-39.837	-74.498	1.00	75.96	MOL2	C
ATOM	8510	NZ	LYS	E	115	35.543	-39.532	-73.069	1.00	84.28	MOL2	N
ATOM	8511	C	LYS	E	115	32.515	-38.261	-79.306	1.00	59.27	MOL2	C
ATOM	8512	O	LYS	E	115	31.439	-37.736	-79.061	1.00	66.71	MOL2	O
ATOM	8513	N	VAL	E	116	32.605	-39.359	-80.041	1.00	56.90	MOL2	N
ATOM	8514	CA	VAL	E	116	31.392	-39.972	-80.556	1.00	53.33	MOL2	C
ATOM	8515	CB	VAL	E	116	31.273	-39.843	-82.094	1.00	51.59	MOL2	C
ATOM	8516	CG1	VAL	E	116	32.630	-39.693	-82.723	1.00	53.36	MOL2	C
ATOM	8517	CG2	VAL	E	116	30.569	-41.056	-82.652	1.00	52.36	MOL2	C
ATOM	8518	C	VAL	E	116	31.274	-41.422	-80.164	1.00	52.05	MOL2	C
ATOM	8519	O	VAL	E	116	32.259	-42.155	-80.144	1.00	49.32	MOL2	O
ATOM	8520	N	LEU	E	117	30.050	-41.819	-79.837	1.00	55.22	MOL2	N
ATOM	8521	CA	LEU	E	117	29.759	-43.183	-79.410	1.00	54.66	MOL2	C
ATOM	8522	CB	LEU	E	117	28.731	-43.149	-78.263	1.00	55.56	MOL2	C
ATOM	8523	CG	LEU	E	117	28.243	-44.328	-77.403	1.00	52.46	MOL2	C
ATOM	8524	CD1	LEU	E	117	26.836	-44.720	-77.799	1.00	48.83	MOL2	C
ATOM	8525	CD2	LEU	E	117	29.198	-45.482	-77.503	1.00	61.71	MOL2	C
ATOM	8526	C	LEU	E	117	29.211	-43.905	-80.620	1.00	51.02	MOL2	C
ATOM	8527	O	LEU	E	117	28.190	-43.497	-81.183	1.00	51.27	MOL2	O
ATOM	8528	N	VAL	E	118	29.901	-44.959	-81.042	1.00	43.55	MOL2	N
ATOM	8529	CA	VAL	E	118	29.430	-45.695	-82.201	1.00	43.29	MOL2	C
ATOM	8530	CB	VAL	E	118	30.409	-45.609	-83.389	1.00	34.40	MOL2	C
ATOM	8531	CG1	VAL	E	118	31.719	-45.019	-82.944	1.00	33.59	MOL2	C
ATOM	8532	CG2	VAL	E	118	30.587	-46.987	-83.997	1.00	28.61	MOL2	C
ATOM	8533	C	VAL	E	118	29.075	-47.154	-81.976	1.00	41.49	MOL2	C
ATOM	8534	O	VAL	E	118	29.663	-47.859	-81.164	1.00	43.98	MOL2	O
ATOM	8535	N	THR	E	119	28.069	-47.593	-82.703	1.00	38.79	MOL2	N
ATOM	8536	CA	THR	E	119	27.639	-48.950	-82.596	1.00	43.76	MOL2	C
ATOM	8537	CB	THR	E	119	26.170	-49.081	-82.858	1.00	47.34	MOL2	C
ATOM	8538	OG1	THR	E	119	25.448	-48.479	-81.780	1.00	54.24	MOL2	O
ATOM	8539	CG2	THR	E	119	25.796	-50.541	-82.985	1.00	48.29	MOL2	C
ATOM	8540	C	THR	E	119	28.386	-49.696	-83.658	1.00	50.94	MOL2	C
ATOM	8541	O	THR	E	119	28.091	-49.579	-84.847	1.00	56.95	MOL2	O
ATOM	8542	N	VAL	E	120	29.368	-50.466	-83.219	1.00	53.83	MOL2	N
ATOM	8543	CA	VAL	E	120	30.201	-51.243	-84.116	1.00	49.09	MOL2	C
ATOM	8544	CB	VAL	E	120	31.428	-51.728	-83.387	1.00	49.53	MOL2	C
ATOM	8545	CG1	VAL	E	120	32.415	-52.247	-84.370	1.00	58.28	MOL2	C
ATOM	8546	CG2	VAL	E	120	32.014	-50.597	-82.566	1.00	52.75	MOL2	C
ATOM	8547	C	VAL	E	120	29.490	-52.453	-84.701	1.00	46.16	MOL2	C
ATOM	8548	O	VAL	E	120	29.819	-52.906	-85.796	1.00	49.10	MOL2	O
ATOM	8549	N	GLY	E	121	28.518	-52.979	-83.970	1.00	44.37	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	8550	CA	GLY	E	121	27.789	-54.136	-84.457	1.00	46.49	MOL2	C
ATOM	8551	C	GLY	E	121	26.955	-54.812	-83.382	1.00	48.38	MOL2	C
ATOM	8552	O	GLY	E	121	26.834	-54.312	-82.263	1.00	53.22	MOL2	O
ATOM	8553	N	CYS	E	122	26.396	-55.967	-83.709	1.00	40.67	MOL2	N
ATOM	8554	CA	CYS	E	122	25.561	-56.680	-82.765	1.00	42.06	MOL2	C
ATOM	8555	C	CYS	E	122	26.093	-58.047	-82.405	1.00	43.02	MOL2	C
ATOM	8556	O	CYS	E	122	26.796	-58.667	-83.175	1.00	45.04	MOL2	O
ATOM	8557	CB	CYS	E	122	24.168	-56.806	-83.356	1.00	44.10	MOL2	C
ATOM	8558	SG	CYS	E	122	23.574	-55.152	-83.768	1.00	48.47	MOL2	S
ATOM	8559	N	THR	E	123	25.757	-58.507	-81.211	1.00	46.59	MOL2	N
ATOM	8560	CA	THR	E	123	26.184	-59.811	-80.753	1.00	44.87	MOL2	C
ATOM	8561	CB	THR	E	123	27.307	-59.719	-79.694	1.00	41.29	MOL2	C
ATOM	8562	OG1	THR	E	123	27.780	-61.036	-79.403	1.00	47.66	MOL2	O
ATOM	8563	CG2	THR	E	123	26.798	-59.090	-78.402	1.00	33.38	MOL2	C
ATOM	8564	C	THR	E	123	24.958	-60.436	-80.130	1.00	47.20	MOL2	C
ATOM	8565	O	THR	E	123	24.136	-59.735	-79.543	1.00	38.36	MOL2	O
ATOM	8566	N	CYS	E	124	24.829	-61.748	-80.270	1.00	53.73	MOL2	N
ATOM	8567	CA	CYS	E	124	23.684	-62.450	-79.712	1.00	62.27	MOL2	C
ATOM	8568	C	CYS	E	124	23.901	-62.856	-78.256	1.00	61.78	MOL2	C
ATOM	8569	O	CYS	E	124	24.773	-63.671	-77.959	1.00	60.46	MOL2	O
ATOM	8570	CB	CYS	E	124	23.379	-63.689	-80.548	1.00	70.88	MOL2	C
ATOM	8571	SG	CYS	E	124	22.062	-64.702	-79.822	1.00	84.89	MOL2	S
ATOM	8572	N	VAL	E	125	23.105	-62.292	-77.350	1.00	62.42	MOL2	N
ATOM	8573	CA	VAL	E	125	23.237	-62.611	-75.934	1.00	62.51	MOL2	C
ATOM	8574	CB	VAL	E	125	23.522	-61.368	-75.104	1.00	61.79	MOL2	C
ATOM	8575	CG1	VAL	E	125	24.824	-60.773	-75.542	1.00	69.24	MOL2	C
ATOM	8576	CG2	VAL	E	125	22.394	-60.367	-75.253	1.00	62.28	MOL2	C
ATOM	8577	C	VAL	E	125	22.011	-63.278	-75.342	1.00	62.04	MOL2	C
ATOM	8578	O	VAL	E	125	20.911	-63.189	-75.887	1.00	60.12	MOL2	O
ATOM	8579	N	THR	E	126	22.224	-63.952	-74.219	1.00	60.85	MOL2	N
ATOM	8580	CA	THR	E	126	21.167	-64.641	-73.509	1.00	63.22	MOL2	C
ATOM	8581	CB	THR	E	126	21.598	-66.086	-73.111	1.00	66.38	MOL2	C
ATOM	8582	OG1	THR	E	126	20.792	-66.548	-72.021	1.00	70.91	MOL2	O
ATOM	8583	CG2	THR	E	126	23.061	-66.131	-72.710	1.00	66.04	MOL2	C
ATOM	8584	C	THR	E	126	20.868	-63.820	-72.270	1.00	61.55	MOL2	C
ATOM	8585	O	THR	E	126	21.759	-63.546	-71.472	1.00	60.05	MOL2	O
ATOM	8586	N	PRO	E	127	19.603	-63.407	-72.100	1.00	63.20	MOL2	N
ATOM	8587	CD	PRO	E	127	18.407	-63.909	-72.793	1.00	63.34	MOL2	C
ATOM	8588	CA	PRO	E	127	19.227	-62.604	-70.936	1.00	65.60	MOL2	C
ATOM	8589	CB	PRO	E	127	17.716	-62.508	-71.059	1.00	64.20	MOL2	C
ATOM	8590	CG	PRO	E	127	17.365	-63.811	-71.718	1.00	67.87	MOL2	C
ATOM	8591	C	PRO	E	127	19.658	-63.289	-69.666	1.00	69.28	MOL2	C
ATOM	8592	O	PRO	E	127	19.838	-64.505	-69.650	1.00	69.92	MOL2	O
ATOM	8593	N	VAL	E	128	19.853	-62.499	-68.618	1.00	73.88	MOL2	N
ATOM	8594	CA	VAL	E	128	20.257	-63.017	-67.315	1.00	81.61	MOL2	C
ATOM	8595	CB	VAL	E	128	20.750	-61.857	-66.399	1.00	74.28	MOL2	C
ATOM	8596	CG1	VAL	E	128	21.333	-62.389	-65.117	1.00	69.48	MOL2	C
ATOM	8597	CG2	VAL	E	128	21.774	-61.034	-67.125	1.00	75.99	MOL2	C
ATOM	8598	C	VAL	E	128	19.015	-63.665	-66.693	1.00	90.59	MOL2	C
ATOM	8599	O	VAL	E	128	18.207	-62.983	-66.067	1.00	93.36	MOL2	O
ATOM	8600	N	ILE	E	129	18.844	-64.970	-66.877	1.00	100.93	MOL2	N
ATOM	8601	CA	ILE	E	129	17.677	-65.654	-66.319	1.00	111.73	MOL2	C
ATOM	8602	CB	ILE	E	129	17.392	-66.995	-67.036	1.00	115.39	MOL2	C
ATOM	8603	CG2	ILE	E	129	16.052	-67.555	-66.569	1.00	115.30	MOL2	C
ATOM	8604	CG1	ILE	E	129	17.365	-66.795	-68.554	1.00	119.20	MOL2	C
ATOM	8605	CD1	ILE	E	129	17.191	-68.094	-69.346	1.00	119.72	MOL2	C
ATOM	8606	C	ILE	E	129	17.936	-65.952	-64.851	1.00	118.58	MOL2	C
ATOM	8607	O	ILE	E	129	17.010	-66.180	-64.066	1.00	119.20	MOL2	O
ATOM	8608	N	HIS	E	130	19.218	-65.943	-64.505	1.00	127.54	MOL2	N
ATOM	8609	CA	HIS	E	130	19.681	-66.209	-63.152	1.00	134.90	MOL2	C
ATOM	8610	CB	HIS	E	130	21.217	-66.270	-63.153	1.00	140.06	MOL2	C
ATOM	8611	CG	HIS	E	130	21.805	-66.572	-64.503	1.00	142.96	MOL2	C
ATOM	8612	CD2	HIS	E	130	22.751	-65.927	-65.228	1.00	143.29	MOL2	C
ATOM	8613	ND1	HIS	E	130	21.389	-67.634	-65.280	1.00	142.37	MOL2	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	8614	CE1	HIS	E	130	22.048	-67.627	-66.425	1.00141.96	MOL2	C
ATOM	8615	NE2	HIS	E	130	22.881	-66.601	-66.419	1.00143.30	MOL2	N
ATOM	8616	C	HIS	E	130	19.170	-65.099	-62.234	1.00135.23	MOL2	C
ATOM	8617	O	HIS	E	130	19.423	-63.919	-62.469	1.00131.96	MOL2	O
ATOM	8618	N	HIS	E	131	18.443	-65.490	-61.192	1.00139.05	MOL2	N
ATOM	8619	CA	HIS	E	131	17.866	-64.539	-60.244	1.00143.24	MOL2	C
ATOM	8620	CB	HIS	E	131	17.216	-65.302	-59.078	1.00145.79	MOL2	C
ATOM	8621	CG	HIS	E	131	15.724	-65.174	-59.030	1.00149.44	MOL2	C
ATOM	8622	CD2	HIS	E	131	14.901	-64.673	-58.076	1.00151.04	MOL2	C
ATOM	8623	ND1	HIS	E	131	14.906	-65.581	-60.063	1.00149.84	MOL2	N
ATOM	8624	CE1	HIS	E	131	13.646	-65.336	-59.749	1.00150.96	MOL2	C
ATOM	8625	NE2	HIS	E	131	13.615	-64.785	-58.548	1.00152.08	MOL2	C
ATOM	8626	C	HIS	E	131	18.797	-63.445	-59.688	1.00141.97	MOL2	C
ATOM	8627	O	HIS	E	131	19.808	-63.071	-60.302	1.00136.76	MOL2	O
ATOM	8628	N	VAL	E	132	18.426	-62.935	-58.516	1.00141.68	MOL2	N
ATOM	8629	CA	VAL	E	132	19.171	-61.878	-57.839	1.00142.44	MOL2	C
ATOM	8630	CB	VAL	E	132	18.212	-60.982	-57.024	1.00140.65	MOL2	C
ATOM	8631	CG1	VAL	E	132	18.942	-59.736	-56.533	1.00136.17	MOL2	C
ATOM	8632	CG2	VAL	E	132	16.999	-60.624	-57.869	1.00138.71	MOL2	C
ATOM	8633	C	VAL	E	132	20.238	-62.424	-56.886	1.00143.76	MOL2	C
ATOM	8634	O	VAL	E	132	19.918	-63.128	-55.924	1.00141.93	MOL2	O
ATOM	8635	N	GLN	E	133	21.502	-62.093	-57.152	1.00145.86	MOL2	N
ATOM	8636	CA	GLN	E	133	22.609	-62.542	-56.303	1.00148.52	MOL2	C
ATOM	8637	CB	GLN	E	133	23.952	-62.350	-57.032	1.00144.77	MOL2	C
ATOM	8638	CG	GLN	E	133	25.105	-63.232	-56.523	1.00141.17	MOL2	C
ATOM	8639	CD	GLN	E	133	25.532	-62.927	-55.086	1.00139.96	MOL2	C
ATOM	8640	OE1	GLN	E	133	25.939	-61.802	-54.766	1.00136.60	MOL2	O
ATOM	8641	NE2	GLN	E	133	25.447	-63.934	-54.217	1.00133.66	MOL2	N
ATOM	8642	C	GLN	E	133	22.597	-61.738	-54.987	1.00151.27	MOL2	C
ATOM	8643	O	GLN	E	133	23.612	-61.068	-54.674	1.00152.40	MOL2	O
ATOM	8644	OXT	GLN	E	133	21.560	-61.783	-54.281	1.00153.34	MOL2	O
ATOM	8645	CB	ALA	G	1	6.918	-80.524	-18.660	1.00 91.84	MOL3	C
ATOM	8646	C	ALA	G	1	7.127	-79.369	-16.435	1.00 91.18	MOL3	C
ATOM	8647	O	ALA	G	1	6.816	-79.460	-15.244	1.00 95.13	MOL3	O
ATOM	8648	N	ALA	G	1	5.398	-78.657	-18.062	1.00 92.12	MOL3	N
ATOM	8649	CA	ALA	G	1	6.157	-79.816	-17.524	1.00 93.07	MOL3	C
ATOM	8650	N	ILE	G	2	8.294	-78.876	-16.837	1.00 84.94	MOL3	N
ATOM	8651	CA	ILE	G	2	9.285	-78.450	-15.863	1.00 79.05	MOL3	C
ATOM	8652	CB	ILE	G	2	10.438	-77.677	-16.498	1.00 76.63	MOL3	C
ATOM	8653	CG2	ILE	G	2	11.472	-77.343	-15.430	1.00 72.92	MOL3	C
ATOM	8654	CG1	ILE	G	2	11.081	-78.519	-17.602	1.00 77.29	MOL3	C
ATOM	8655	CD1	ILE	G	2	12.396	-77.976	-18.127	1.00 73.60	MOL3	C
ATOM	8656	C	ILE	G	2	8.649	-77.579	-14.815	1.00 77.42	MOL3	C
ATOM	8657	O	ILE	G	2	8.068	-76.549	-15.135	1.00 75.41	MOL3	O
ATOM	8658	N	GLN	G	3	8.745	-78.008	-13.562	1.00 78.74	MOL3	N
ATOM	8659	CA	GLN	G	3	8.166	-77.244	-12.469	1.00 84.91	MOL3	C
ATOM	8660	CB	GLN	G	3	7.195	-78.100	-11.649	1.00 95.45	MOL3	C
ATOM	8661	CG	GLN	G	3	5.769	-78.049	-12.184	1.00107.19	MOL3	C
ATOM	8662	CD	GLN	G	3	4.794	-78.847	-11.350	1.00114.04	MOL3	C
ATOM	8663	OE1	GLN	G	3	4.835	-80.079	-11.331	1.00119.23	MOL3	O
ATOM	8664	NE2	GLN	G	3	3.907	-78.147	-10.647	1.00117.58	MOL3	N
ATOM	8665	C	GLN	G	3	9.218	-76.624	-11.573	1.00 81.14	MOL3	C
ATOM	8666	O	GLN	G	3	10.046	-77.302	-10.971	1.00 81.04	MOL3	O
ATOM	8667	N	LEU	G	4	9.174	-75.306	-11.499	1.00 78.11	MOL3	N
ATOM	8668	CA	LEU	G	4	10.122	-74.565	-10.698	1.00 77.58	MOL3	C
ATOM	8669	CB	LEU	G	4	10.384	-73.206	-11.354	1.00 85.28	MOL3	C
ATOM	8670	CG	LEU	G	4	11.170	-73.309	-12.667	1.00 86.95	MOL3	C
ATOM	8671	CD1	LEU	G	4	10.859	-72.141	-13.580	1.00 87.02	MOL3	C
ATOM	8672	CD2	LEU	G	4	12.650	-73.373	-12.342	1.00 89.44	MOL3	C
ATOM	8673	C	LEU	G	4	9.612	-74.405	-9.278	1.00 73.04	MOL3	C
ATOM	8674	O	LEU	G	4	8.464	-74.046	-9.047	1.00 72.43	MOL3	O
ATOM	8675	N	THR	G	5	10.492	-74.653	-8.323	1.00 69.68	MOL3	N
ATOM	8676	CA	THR	G	5	10.120	-74.580	-6.928	1.00 68.17	MOL3	C
ATOM	8677	CB	THR	G	5	10.227	-75.975	-6.317	1.00 74.80	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8678	OG1	THR	G	5	9.836	-76.945	-7.302	1.00	70.27	MOL3	O
ATOM	8679	CG2	THR	G	5	9.334	-76.094	-5.091	1.00	75.75	MOL3	C
ATOM	8680	C	THR	G	5	10.975	-73.611	-6.115	1.00	63.96	MOL3	C
ATOM	8681	O	THR	G	5	11.994	-73.984	-5.547	1.00	61.45	MOL3	O
ATOM	8682	N	GLN	G	6	10.554	-72.362	-6.056	1.00	63.21	MOL3	N
ATOM	8683	CA	GLN	G	6	11.283	-71.367	-5.296	1.00	67.36	MOL3	C
ATOM	8684	CB	GLN	G	6	10.688	-69.991	-5.509	1.00	71.70	MOL3	C
ATOM	8685	CG	GLN	G	6	10.886	-69.442	-6.880	1.00	70.50	MOL3	C
ATOM	8686	CD	GLN	G	6	10.194	-68.131	-7.015	1.00	72.30	MOL3	C
ATOM	8687	OE1	GLN	G	6	10.414	-67.219	-6.218	1.00	65.58	MOL3	O
ATOM	8688	NE2	GLN	G	6	9.335	-68.021	-8.015	1.00	78.17	MOL3	N
ATOM	8689	C	GLN	G	6	11.207	-71.698	-3.827	1.00	68.24	MOL3	C
ATOM	8690	O	GLN	G	6	10.354	-72.465	-3.416	1.00	72.35	MOL3	O
ATOM	8691	N	SER	G	7	12.079	-71.081	-3.036	1.00	70.04	MOL3	N
ATOM	8692	CA	SER	G	7	12.131	-71.326	-1.602	1.00	67.82	MOL3	C
ATOM	8693	CB	SER	G	7	12.558	-72.763	-1.365	1.00	76.29	MOL3	C
ATOM	8694	CG	SER	G	7	13.694	-73.063	-2.167	1.00	77.00	MOL3	O
ATOM	8695	C	SER	G	7	13.146	-70.412	-0.953	1.00	65.88	MOL3	C
ATOM	8696	O	SER	G	7	14.267	-70.284	-1.432	1.00	70.74	MOL3	O
ATOM	8697	N	PRO	G	8	12.771	-69.757	0.145	1.00	64.24	MOL3	N
ATOM	8698	CD	PRO	G	8	13.676	-68.911	0.941	1.00	64.90	MOL3	C
ATOM	8699	CA	PRO	G	8	11.457	-69.843	0.775	1.00	68.98	MOL3	C
ATOM	8700	CB	PRO	G	8	11.643	-69.027	2.054	1.00	69.10	MOL3	C
ATOM	8701	CG	PRO	G	8	12.716	-68.038	1.681	1.00	61.90	MOL3	C
ATOM	8702	C	PRO	G	8	10.374	-69.260	-0.117	1.00	71.03	MOL3	C
ATOM	8703	O	PRO	G	8	10.672	-68.720	-1.175	1.00	77.14	MOL3	O
ATOM	8704	N	SER	G	9	9.121	-69.378	0.310	1.00	70.20	MOL3	N
ATOM	8705	CA	SER	G	9	8.011	-68.826	-0.450	1.00	67.43	MOL3	C
ATOM	8706	CB	SER	G	9	6.728	-69.630	-0.215	1.00	68.38	MOL3	C
ATOM	8707	OG	SER	G	9	6.810	-70.906	-0.830	1.00	72.35	MOL3	O
ATOM	8708	C	SER	G	9	7.845	-67.417	0.066	1.00	62.26	MOL3	C
ATOM	8709	O	SER	G	9	7.467	-66.508	-0.664	1.00	67.60	MOL3	O
ATOM	8710	N	SER	G	10	8.137	-67.246	1.342	1.00	54.62	MOL3	N
ATOM	8711	CA	SER	G	10	8.053	-65.941	1.957	1.00	57.69	MOL3	C
ATOM	8712	CB	SER	G	10	6.832	-65.821	2.860	1.00	62.57	MOL3	C
ATOM	8713	OG	SER	G	10	6.836	-64.555	3.507	1.00	66.90	MOL3	O
ATOM	8714	C	SER	G	10	9.309	-65.799	2.780	1.00	57.88	MOL3	C
ATOM	8715	O	SER	G	10	10.072	-66.754	2.905	1.00	55.54	MOL3	O
ATOM	8716	N	LEU	G	11	9.512	-64.625	3.365	1.00	56.79	MOL3	N
ATOM	8717	CA	LEU	G	11	10.727	-64.386	4.125	1.00	58.29	MOL3	C
ATOM	8718	CB	LEU	G	11	11.905	-64.647	3.192	1.00	54.73	MOL3	C
ATOM	8719	CG	LEU	G	11	13.362	-64.319	3.495	1.00	60.88	MOL3	C
ATOM	8720	CD1	LEU	G	11	14.124	-64.570	2.206	1.00	58.03	MOL3	C
ATOM	8721	CD2	LEU	G	11	13.567	-62.880	3.951	1.00	57.82	MOL3	C
ATOM	8722	C	LEU	G	11	10.771	-62.942	4.610	1.00	62.20	MOL3	C
ATOM	8723	O	LEU	G	11	10.544	-62.014	3.829	1.00	62.91	MOL3	O
ATOM	8724	N	SER	G	12	11.068	-62.736	5.886	1.00	62.61	MOL3	N
ATOM	8725	CA	SER	G	12	11.144	-61.373	6.367	1.00	67.16	MOL3	C
ATOM	8726	CB	SER	G	12	10.332	-61.206	7.641	1.00	73.51	MOL3	C
ATOM	8727	OG	SER	G	12	9.834	-59.880	7.724	1.00	82.94	MOL3	O
ATOM	8728	C	SER	G	12	12.602	-61.041	6.612	1.00	68.56	MOL3	C
ATOM	8729	O	SER	G	12	13.360	-61.877	7.096	1.00	73.77	MOL3	O
ATOM	8730	N	ALA	G	13	13.001	-59.830	6.242	1.00	67.01	MOL3	N
ATOM	8731	CA	ALA	G	13	14.378	-59.401	6.429	1.00	65.17	MOL3	C
ATOM	8732	CB	ALA	G	13	15.219	-59.770	5.229	1.00	62.47	MOL3	C
ATOM	8733	C	ALA	G	13	14.404	-57.906	6.653	1.00	67.37	MOL3	C
ATOM	8734	O	ALA	G	13	13.370	-57.240	6.537	1.00	66.94	MOL3	O
ATOM	8735	N	SER	G	14	15.581	-57.386	7.000	1.00	70.46	MOL3	N
ATOM	8736	CA	SER	G	14	15.736	-55.954	7.247	1.00	70.22	MOL3	C
ATOM	8737	CB	SER	G	14	16.066	-55.692	8.730	1.00	72.47	MOL3	C
ATOM	8738	OG	SER	G	14	16.879	-56.718	9.296	1.00	81.85	MOL3	O
ATOM	8739	C	SER	G	14	16.779	-55.330	6.315	1.00	64.57	MOL3	C
ATOM	8740	O	SER	G	14	17.643	-56.023	5.764	1.00	56.15	MOL3	O
ATOM	8741	N	VAL	G	15	16.649	-54.025	6.106	1.00	61.18	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	8742	CA	VAL	G	15	17.553	-53.280	5.248	1.00	61.26	MOL3	C
ATOM	8743	CB	VAL	G	15	17.486	-51.785	5.572	1.00	62.15	MOL3	C
ATOM	8744	CG1	VAL	G	15	16.808	-51.037	4.467	1.00	62.23	MOL3	C
ATOM	8745	CG2	VAL	G	15	16.734	-51.584	6.889	1.00	68.77	MOL3	C
ATOM	8746	C	VAL	G	15	18.982	-53.735	5.494	1.00	65.74	MOL3	C
ATOM	8747	O	VAL	G	15	19.430	-53.803	6.643	1.00	66.93	MOL3	O
ATOM	8748	N	GLY	G	16	19.700	-54.048	4.423	1.00	66.48	MOL3	N
ATOM	8749	CA	GLY	G	16	21.077	-54.468	4.578	1.00	63.83	MOL3	C
ATOM	8750	C	GLY	G	16	21.273	-55.964	4.519	1.00	62.52	MOL3	C
ATOM	8751	O	GLY	G	16	22.256	-56.437	3.950	1.00	69.68	MOL3	O
ATOM	8752	N	ASP	G	17	20.348	-56.716	5.096	1.00	57.89	MOL3	N
ATOM	8753	CA	ASP	G	17	20.473	-58.169	5.087	1.00	64.37	MOL3	C
ATOM	8754	CB	ASP	G	17	19.154	-58.817	5.558	1.00	78.26	MOL3	C
ATOM	8755	CG	ASP	G	17	18.807	-58.490	7.027	1.00	85.13	MOL3	C
ATOM	8756	OD1	ASP	G	17	17.831	-59.081	7.553	1.00	81.20	MOL3	O
ATOM	8757	OD2	ASP	G	17	19.499	-57.649	7.650	1.00	88.96	MOL3	O
ATOM	8758	C	ASP	G	17	20.876	-58.723	3.706	1.00	58.61	MOL3	C
ATOM	8759	O	ASP	G	17	20.709	-58.066	2.687	1.00	57.95	MOL3	O
ATOM	8760	N	ARG	G	18	21.437	-59.924	3.684	1.00	56.36	MOL3	N
ATOM	8761	CA	ARG	G	18	21.837	-60.546	2.431	1.00	60.67	MOL3	C
ATOM	8762	CB	ARG	G	18	23.250	-61.136	2.540	1.00	63.66	MOL3	C
ATOM	8763	CG	ARG	G	18	23.639	-62.143	1.444	1.00	62.43	MOL3	C
ATOM	8764	CD	ARG	G	18	25.081	-61.935	0.971	1.00	69.18	MOL3	C
ATOM	8765	NE	ARG	G	18	25.821	-63.190	0.872	1.00	82.75	MOL3	N
ATOM	8766	CZ	ARG	G	18	25.481	-64.218	0.093	1.00	93.44	MOL3	C
ATOM	8767	NH1	ARG	G	18	24.402	-64.152	-0.674	1.00	100.10	MOL3	N
ATOM	8768	NH2	ARG	G	18	26.218	-65.325	0.089	1.00	99.11	MOL3	N
ATOM	8769	C	ARG	G	18	20.833	-61.642	2.119	1.00	64.02	MOL3	C
ATOM	8770	O	ARG	G	18	21.063	-62.815	2.420	1.00	68.60	MOL3	O
ATOM	8771	N	VAL	G	19	19.715	-61.248	1.517	1.00	62.61	MOL3	N
ATOM	8772	CA	VAL	G	19	18.658	-62.187	1.170	1.00	58.01	MOL3	C
ATOM	8773	CB	VAL	G	19	17.400	-61.444	0.737	1.00	61.47	MOL3	C
ATOM	8774	CG1	VAL	G	19	16.274	-62.444	0.537	1.00	62.19	MOL3	C
ATOM	8775	CG2	VAL	G	19	17.040	-60.364	1.775	1.00	52.69	MOL3	C
ATOM	8776	C	VAL	G	19	19.069	-63.145	0.057	1.00	55.13	MOL3	C
ATOM	8777	O	VAL	G	19	19.856	-62.795	-0.815	1.00	58.93	MOL3	O
ATOM	8778	N	THR	G	20	18.532	-64.355	0.086	1.00	51.84	MOL3	N
ATOM	8779	CA	THR	G	20	18.872	-65.341	-0.924	1.00	54.45	MOL3	C
ATOM	8780	CB	THR	G	20	20.012	-66.222	-0.441	1.00	55.50	MOL3	C
ATOM	8781	OG1	THR	G	20	21.151	-65.402	-0.164	1.00	55.70	MOL3	O
ATOM	8782	CG2	THR	G	20	20.348	-67.288	-1.488	1.00	51.26	MOL3	C
ATOM	8783	C	THR	G	20	17.689	-66.237	-1.258	1.00	57.97	MOL3	C
ATOM	8784	O	THR	G	20	17.187	-66.967	-0.398	1.00	65.17	MOL3	O
ATOM	8785	N	ILE	G	21	17.248	-66.183	-2.510	1.00	54.89	MOL3	N
ATOM	8786	CA	ILE	G	21	16.118	-66.990	-2.963	1.00	53.86	MOL3	C
ATOM	8787	CB	ILE	G	21	15.148	-66.196	-3.876	1.00	49.43	MOL3	C
ATOM	8788	CG2	ILE	G	21	13.760	-66.820	-3.803	1.00	49.67	MOL3	C
ATOM	8789	CG1	ILE	G	21	15.096	-64.724	-3.466	1.00	36.38	MOL3	C
ATOM	8790	CD1	ILE	G	21	14.613	-64.517	-2.105	1.00	25.30	MOL3	C
ATOM	8791	C	ILE	G	21	16.655	-68.138	-3.795	1.00	54.41	MOL3	C
ATOM	8792	O	ILE	G	21	17.677	-67.997	-4.453	1.00	59.19	MOL3	O
ATOM	8793	N	THR	G	22	15.965	-69.267	-3.786	1.00	51.44	MOL3	N
ATOM	8794	CA	THR	G	22	16.423	-70.396	-4.565	1.00	53.57	MOL3	C
ATOM	8795	CB	THR	G	22	16.757	-71.541	-3.683	1.00	50.35	MOL3	C
ATOM	8796	OG1	THR	G	22	17.501	-71.057	-2.564	1.00	57.43	MOL3	O
ATOM	8797	CG2	THR	G	22	17.575	-72.545	-4.442	1.00	54.90	MOL3	C
ATOM	8798	C	THR	G	22	15.323	-70.821	-5.492	1.00	61.94	MOL3	C
ATOM	8799	O	THR	G	22	14.166	-70.484	-5.261	1.00	71.19	MOL3	O
ATOM	8800	N	CYS	G	23	15.667	-71.576	-6.529	1.00	63.01	MOL3	N
ATOM	8801	CA	CYS	G	23	14.667	-72.003	-7.487	1.00	69.22	MOL3	C
ATOM	8802	C	CYS	G	23	15.061	-73.319	-8.108	1.00	73.52	MOL3	C
ATOM	8803	O	CYS	G	23	15.566	-73.342	-9.219	1.00	76.20	MOL3	O
ATOM	8804	CB	CYS	G	23	14.532	-70.935	-8.570	1.00	72.22	MOL3	C
ATOM	8805	SG	CYS	G	23	13.397	-71.266	-9.964	1.00	89.83	MOL3	S

ES 2 548 452 T3

ATOM	8806	N	ARG	G	24	14.840	-74.415	-7.390	1.00	81.91	MOL3	N
ATOM	8807	CA	ARG	G	24	15.165	-75.740	-7.914	1.00	84.07	MOL3	C
ATOM	8808	CB	ARG	G	24	15.182	-76.773	-6.790	1.00	90.97	MOL3	C
ATOM	8809	CG	ARG	G	24	16.189	-76.490	-5.693	1.00	101.39	MOL3	C
ATOM	8810	CD	ARG	G	24	16.499	-77.754	-4.906	1.00	113.69	MOL3	C
ATOM	8811	NE	ARG	G	24	17.186	-78.751	-5.731	1.00	124.74	MOL3	N
ATOM	8812	CZ	ARG	G	24	16.599	-79.545	-6.627	1.00	128.78	MOL3	C
ATOM	8813	NH1	ARG	G	24	15.288	-79.483	-6.833	1.00	129.96	MOL3	N
ATOM	8814	NH2	ARG	G	24	17.331	-80.405	-7.329	1.00	129.99	MOL3	N
ATOM	8815	C	ARG	G	24	14.122	-76.122	-8.969	1.00	79.77	MOL3	C
ATOM	8816	O	ARG	G	24	12.957	-75.732	-8.873	1.00	75.21	MOL3	O
ATOM	8817	N	ALA	G	25	14.531	-76.883	-9.976	1.00	76.22	MOL3	N
ATOM	8818	CA	ALA	G	25	13.595	-77.248	-11.023	1.00	79.16	MOL3	C
ATOM	8819	CB	ALA	G	25	13.835	-76.383	-12.226	1.00	78.01	MOL3	C
ATOM	8820	C	ALA	G	25	13.581	-78.715	-11.440	1.00	84.40	MOL3	C
ATOM	8821	O	ALA	G	25	14.625	-79.356	-11.562	1.00	83.67	MOL3	O
ATOM	8822	N	ASP	G	26	12.367	-79.214	-11.678	1.00	89.59	MOL3	N
ATOM	8823	CA	ASP	G	26	12.110	-80.591	-12.088	1.00	93.62	MOL3	C
ATOM	8824	CB	ASP	G	26	10.775	-80.669	-12.843	1.00	101.41	MOL3	C
ATOM	8825	CG	ASP	G	26	10.495	-82.060	-13.411	1.00	111.44	MOL3	C
ATOM	8826	OD1	ASP	G	26	9.615	-82.184	-14.292	1.00	113.51	MOL3	O
ATOM	8827	OD2	ASP	G	26	11.147	-83.034	-12.975	1.00	119.43	MOL3	O
ATOM	8828	C	ASP	G	26	13.216	-81.194	-12.947	1.00	93.33	MOL3	C
ATOM	8829	O	ASP	G	26	13.965	-82.052	-12.486	1.00	92.24	MOL3	O
ATOM	8830	N	GLU	G	27	13.308	-80.746	-14.193	1.00	95.09	MOL3	N
ATOM	8831	CA	GLU	G	27	14.305	-81.246	-15.131	1.00	100.09	MOL3	C
ATOM	8832	CB	GLU	G	27	13.644	-81.419	-16.503	1.00	101.62	MOL3	C
ATOM	8833	CG	GLU	G	27	14.321	-82.407	-17.439	1.00	110.10	MOL3	C
ATOM	8834	CD	GLU	G	27	13.460	-82.729	-18.653	1.00	113.57	MOL3	C
ATOM	8835	OE1	GLU	G	27	13.874	-83.559	-19.493	1.00	117.99	MOL3	O
ATOM	8836	OE2	GLU	G	27	12.362	-82.149	-18.768	1.00	112.12	MOL3	O
ATOM	8837	C	GLU	G	27	15.491	-80.272	-15.204	1.00	102.38	MOL3	C
ATOM	8838	O	GLU	G	27	15.726	-79.506	-14.261	1.00	102.53	MOL3	O
ATOM	8839	N	SER	G	28	16.241	-80.307	-16.309	1.00	102.36	MOL3	N
ATOM	8840	CA	SER	G	28	17.393	-79.415	-16.486	1.00	98.93	MOL3	C
ATOM	8841	CB	SER	G	28	18.624	-80.183	-16.975	1.00	102.05	MOL3	C
ATOM	8842	OG	SER	G	28	19.726	-79.304	-17.163	1.00	94.87	MOL3	O
ATOM	8843	C	SER	G	28	17.085	-78.312	-17.482	1.00	94.49	MOL3	C
ATOM	8844	O	SER	G	28	16.481	-78.562	-18.524	1.00	96.23	MOL3	O
ATOM	8845	N	VAL	G	29	17.508	-77.094	-17.167	1.00	88.27	MOL3	N
ATOM	8846	CA	VAL	G	29	17.258	-75.968	-18.055	1.00	83.41	MOL3	C
ATOM	8847	CB	VAL	G	29	16.364	-74.915	-17.382	1.00	80.02	MOL3	C
ATOM	8848	CG1	VAL	G	29	14.928	-75.363	-17.436	1.00	81.55	MOL3	C
ATOM	8849	CG2	VAL	G	29	16.790	-74.709	-15.943	1.00	71.21	MOL3	C
ATOM	8850	C	VAL	G	29	18.514	-75.275	-18.574	1.00	84.10	MOL3	C
ATOM	8851	O	VAL	G	29	18.437	-74.486	-19.508	1.00	87.75	MOL3	O
ATOM	8852	N	THR	G	30	19.663	-75.565	-17.968	1.00	81.73	MOL3	N
ATOM	8853	CA	THR	G	30	20.943	-74.976	-18.374	1.00	76.67	MOL3	C
ATOM	8854	CB	THR	G	30	21.601	-75.705	-19.555	1.00	83.22	MOL3	C
ATOM	8855	OG1	THR	G	30	20.730	-75.655	-20.701	1.00	75.07	MOL3	O
ATOM	8856	CG2	THR	G	30	21.946	-77.140	-19.177	1.00	94.30	MOL3	C
ATOM	8857	C	THR	G	30	20.896	-73.540	-18.824	1.00	74.85	MOL3	C
ATOM	8858	O	THR	G	30	20.438	-73.240	-19.933	1.00	77.39	MOL3	O
ATOM	8859	N	THR	G	31	21.405	-72.656	-17.981	1.00	68.57	MOL3	N
ATOM	8860	CA	THR	G	31	21.475	-71.231	-18.307	1.00	60.87	MOL3	C
ATOM	8861	CB	THR	G	31	22.583	-70.972	-19.361	1.00	54.59	MOL3	C
ATOM	8862	OG1	THR	G	31	22.166	-71.434	-20.654	1.00	39.54	MOL3	O
ATOM	8863	CG2	THR	G	31	23.847	-71.704	-18.963	1.00	51.28	MOL3	C
ATOM	8864	C	THR	G	31	20.186	-70.510	-18.754	1.00	57.16	MOL3	C
ATOM	8865	O	THR	G	31	20.115	-69.275	-18.671	1.00	52.70	MOL3	O
ATOM	8866	N	LEU	G	32	19.174	-71.249	-19.215	1.00	44.36	MOL3	N
ATOM	8867	CA	LEU	G	32	17.950	-70.589	-19.617	1.00	41.23	MOL3	C
ATOM	8868	CB	LEU	G	32	17.260	-71.357	-20.743	1.00	35.40	MOL3	C
ATOM	8869	CG	LEU	G	32	17.627	-70.692	-22.077	1.00	37.32	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8870	CD1	LEU	G	32	19.134	-70.555	-22.091	1.00	36.21	MOL3	C
ATOM	8871	CD2	LEU	G	32	17.120	-71.459	-23.306	1.00	25.34	MOL3	C
ATOM	8872	C	LEU	G	32	16.990	-70.320	-18.463	1.00	42.25	MOL3	C
ATOM	8873	O	LEU	G	32	15.784	-70.530	-18.573	1.00	47.72	MOL3	O
ATOM	8874	N	MET	G	33	17.542	-69.830	-17.359	1.00	39.62	MOL3	N
ATOM	8875	CA	MET	G	33	16.760	-69.493	-16.189	1.00	43.39	MOL3	C
ATOM	8876	CB	MET	G	33	17.405	-70.114	-14.953	1.00	44.25	MOL3	C
ATOM	8877	CG	MET	G	33	16.639	-69.918	-13.643	1.00	63.10	MOL3	C
ATOM	8878	SD	MET	G	33	14.963	-70.591	-13.654	1.00	80.75	MOL3	S
ATOM	8879	CE	MET	G	33	15.180	-72.028	-14.730	1.00	76.36	MOL3	C
ATOM	8880	C	MET	G	33	16.792	-67.967	-16.116	1.00	48.11	MOL3	C
ATOM	8881	O	MET	G	33	17.819	-67.360	-16.400	1.00	55.26	MOL3	O
ATOM	8882	N	HIS	G	34	15.674	-67.346	-15.748	1.00	46.45	MOL3	N
ATOM	8883	CA	HIS	G	34	15.601	-65.896	-15.665	1.00	43.17	MOL3	C
ATOM	8884	CB	HIS	G	34	14.799	-65.393	-16.850	1.00	40.62	MOL3	C
ATOM	8885	CG	HIS	G	34	15.128	-66.084	-18.132	1.00	37.95	MOL3	C
ATOM	8886	CD2	HIS	G	34	14.343	-66.733	-19.023	1.00	45.85	MOL3	C
ATOM	8887	ND1	HIS	G	34	16.404	-66.127	-18.646	1.00	43.97	MOL3	N
ATOM	8888	CE1	HIS	G	34	16.391	-66.768	-19.802	1.00	43.56	MOL3	C
ATOM	8889	NE2	HIS	G	34	15.152	-67.146	-20.055	1.00	44.43	MOL3	N
ATOM	8890	C	HIS	G	34	14.922	-65.461	-14.363	1.00	45.87	MOL3	C
ATOM	8891	O	HIS	G	34	14.261	-66.267	-13.724	1.00	51.04	MOL3	O
ATOM	8892	N	TRP	G	35	15.080	-64.198	-13.967	1.00	45.08	MOL3	N
ATOM	8893	CA	TRP	G	35	14.441	-63.712	-12.745	1.00	45.19	MOL3	C
ATOM	8894	CB	TRP	G	35	15.456	-63.497	-11.619	1.00	48.06	MOL3	C
ATOM	8895	CG	TRP	G	35	16.068	-64.764	-11.109	1.00	56.84	MOL3	C
ATOM	8896	CD2	TRP	G	35	15.642	-65.535	-9.977	1.00	60.98	MOL3	C
ATOM	8897	CE2	TRP	G	35	16.460	-66.675	-9.918	1.00	62.91	MOL3	C
ATOM	8898	CE3	TRP	G	35	14.646	-65.374	-9.013	1.00	62.34	MOL3	C
ATOM	8899	CD1	TRP	G	35	17.098	-65.450	-11.666	1.00	61.49	MOL3	C
ATOM	8900	NE1	TRP	G	35	17.343	-66.599	-10.961	1.00	64.24	MOL3	N
ATOM	8901	CZ2	TRP	G	35	16.314	-67.650	-8.935	1.00	61.50	MOL3	C
ATOM	8902	CZ3	TRP	G	35	14.505	-66.342	-8.041	1.00	65.72	MOL3	C
ATOM	8903	CH2	TRP	G	35	15.335	-67.467	-8.009	1.00	60.76	MOL3	C
ATOM	8904	C	TRP	G	35	13.697	-62.421	-12.989	1.00	46.63	MOL3	C
ATOM	8905	O	TRP	G	35	14.182	-61.542	-13.701	1.00	55.62	MOL3	O
ATOM	8906	N	TYR	G	36	12.517	-62.318	-12.388	1.00	39.63	MOL3	N
ATOM	8907	CA	TYR	G	36	11.669	-61.145	-12.521	1.00	40.41	MOL3	C
ATOM	8908	CB	TYR	G	36	10.385	-61.506	-13.229	1.00	31.06	MOL3	C
ATOM	8909	CG	TYR	G	36	10.585	-61.970	-14.621	1.00	30.83	MOL3	C
ATOM	8910	CD1	TYR	G	36	10.547	-61.073	-15.664	1.00	32.67	MOL3	C
ATOM	8911	CE1	TYR	G	36	10.677	-61.501	-16.959	1.00	40.12	MOL3	C
ATOM	8912	CD2	TYR	G	36	10.772	-63.315	-14.905	1.00	28.80	MOL3	C
ATOM	8913	CE2	TYR	G	36	10.906	-63.755	-16.191	1.00	25.97	MOL3	C
ATOM	8914	CZ	TYR	G	36	10.855	-62.843	-17.217	1.00	36.74	MOL3	C
ATOM	8915	OH	TYR	G	36	10.967	-63.246	-18.526	1.00	47.56	MOL3	O
ATOM	8916	C	TYR	G	36	11.307	-60.652	-11.141	1.00	41.90	MOL3	C
ATOM	8917	O	TYR	G	36	11.337	-61.415	-10.187	1.00	42.96	MOL3	O
ATOM	8918	N	GLN	G	37	10.939	-59.382	-11.044	1.00	39.72	MOL3	N
ATOM	8919	CA	GLN	G	37	10.559	-58.806	-9.775	1.00	38.19	MOL3	C
ATOM	8920	CB	GLN	G	37	11.556	-57.735	-9.379	1.00	35.77	MOL3	C
ATOM	8921	CG	GLN	G	37	11.420	-57.270	-7.963	1.00	39.74	MOL3	C
ATOM	8922	CD	GLN	G	37	11.640	-55.792	-7.837	1.00	44.01	MOL3	C
ATOM	8923	OE1	GLN	G	37	12.251	-55.330	-6.872	1.00	49.05	MOL3	O
ATOM	8924	NE2	GLN	G	37	11.127	-55.027	-8.807	1.00	35.77	MOL3	N
ATOM	8925	C	GLN	G	37	9.194	-58.179	-9.974	1.00	43.08	MOL3	C
ATOM	8926	O	GLN	G	37	8.907	-57.649	-11.042	1.00	49.64	MOL3	O
ATOM	8927	N	GLN	G	38	8.343	-58.235	-8.956	1.00	42.91	MOL3	N
ATOM	8928	CA	GLN	G	38	7.011	-57.652	-9.071	1.00	40.05	MOL3	C
ATOM	8929	CB	GLN	G	38	5.996	-58.730	-9.415	1.00	32.88	MOL3	C
ATOM	8930	CG	GLN	G	38	4.633	-58.160	-9.709	1.00	40.34	MOL3	C
ATOM	8931	CD	GLN	G	38	3.682	-59.179	-10.278	1.00	38.95	MOL3	C
ATOM	8932	OE1	GLN	G	38	2.708	-58.839	-10.942	1.00	37.89	MOL3	O
ATOM	8933	NE2	GLN	G	38	3.954	-60.437	-10.011	1.00	48.71	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	8934	C	GLN	G	38	6.568	-56.985	-7.784	1.00	40.19	MOL3	C
ATOM	8935	O	GLN	G	38	6.453	-57.637	-6.760	1.00	42.15	MOL3	O
ATOM	8936	N	LYS	G	39	6.316	-55.687	-7.820	1.00	42.89	MOL3	N
ATOM	8937	CA	LYS	G	39	5.873	-55.016	-6.608	1.00	42.63	MOL3	C
ATOM	8938	CB	LYS	G	39	6.290	-53.544	-6.623	1.00	42.81	MOL3	C
ATOM	8939	CG	LYS	G	39	7.790	-53.298	-6.780	1.00	48.90	MOL3	C
ATOM	8940	CD	LYS	G	39	8.493	-53.118	-5.449	1.00	57.46	MOL3	C
ATOM	8941	CE	LYS	G	39	9.485	-51.945	-5.486	1.00	65.19	MOL3	C
ATOM	8942	NZ	LYS	G	39	10.555	-52.099	-6.529	1.00	76.82	MOL3	N
ATOM	8943	C	LYS	G	39	4.364	-55.152	-6.635	1.00	42.94	MOL3	C
ATOM	8944	O	LYS	G	39	3.811	-55.538	-7.645	1.00	44.17	MOL3	O
ATOM	8945	N	PRO	G	40	3.677	-54.848	-5.524	1.00	50.24	MOL3	N
ATOM	8946	CD	PRO	G	40	4.209	-54.444	-4.213	1.00	57.50	MOL3	C
ATOM	8947	CA	PRO	G	40	2.216	-54.955	-5.472	1.00	48.69	MOL3	C
ATOM	8948	CB	PRO	G	40	1.885	-54.630	-4.022	1.00	46.58	MOL3	C
ATOM	8949	CG	PRO	G	40	3.138	-54.939	-3.284	1.00	56.38	MOL3	C
ATOM	8950	C	PRO	G	40	1.549	-53.956	-6.391	1.00	51.16	MOL3	C
ATOM	8951	O	PRO	G	40	1.821	-52.762	-6.307	1.00	51.34	MOL3	O
ATOM	8952	N	GLY	G	41	0.678	-54.445	-7.266	1.00	54.84	MOL3	N
ATOM	8953	CA	GLY	G	41	-0.040	-53.557	-8.159	1.00	59.57	MOL3	C
ATOM	8954	C	GLY	G	41	0.581	-53.345	-9.516	1.00	61.10	MOL3	C
ATOM	8955	O	GLY	G	41	-0.127	-53.227	-10.519	1.00	66.90	MOL3	O
ATOM	8956	N	LYS	G	42	1.903	-53.281	-9.552	1.00	57.43	MOL3	N
ATOM	8957	CA	LYS	G	42	2.614	-53.087	-10.800	1.00	60.62	MOL3	C
ATOM	8958	CB	LYS	G	42	3.954	-52.407	-10.501	1.00	67.78	MOL3	C
ATOM	8959	CG	LYS	G	42	3.805	-51.137	-9.658	1.00	79.31	MOL3	C
ATOM	8960	CD	LYS	G	42	2.668	-50.248	-10.189	1.00	90.76	MOL3	C
ATOM	8961	CE	LYS	G	42	2.420	-49.007	-9.321	1.00	96.21	MOL3	C
ATOM	8962	NZ	LYS	G	42	3.581	-48.062	-9.275	1.00	99.49	MOL3	N
ATOM	8963	C	LYS	G	42	2.813	-54.442	-11.513	1.00	58.76	MOL3	C
ATOM	8964	O	LYS	G	42	2.462	-55.490	-10.968	1.00	56.71	MOL3	O
ATOM	8965	N	ALA	G	43	3.357	-54.430	-12.728	1.00	54.02	MOL3	N
ATOM	8966	CA	ALA	G	43	3.566	-55.671	-13.455	1.00	42.73	MOL3	C
ATOM	8967	CB	ALA	G	43	3.259	-55.471	-14.894	1.00	43.30	MOL3	C
ATOM	8968	C	ALA	G	43	4.986	-56.164	-13.305	1.00	44.91	MOL3	C
ATOM	8969	O	ALA	G	43	5.878	-55.417	-12.918	1.00	48.07	MOL3	O
ATOM	8970	N	PRO	G	44	5.216	-57.447	-13.603	1.00	45.65	MOL3	N
ATOM	8971	CD	PRO	G	44	4.228	-58.435	-14.084	1.00	44.36	MOL3	C
ATOM	8972	CA	PRO	G	44	6.552	-58.037	-13.504	1.00	42.93	MOL3	C
ATOM	8973	CB	PRO	G	44	6.403	-59.338	-14.293	1.00	42.13	MOL3	C
ATOM	8974	CG	PRO	G	44	4.989	-59.738	-14.004	1.00	38.67	MOL3	C
ATOM	8975	C	PRO	G	44	7.587	-57.112	-14.130	1.00	42.72	MOL3	C
ATOM	8976	O	PRO	G	44	7.255	-56.267	-14.953	1.00	53.64	MOL3	O
ATOM	8977	N	LYS	G	45	8.840	-57.280	-13.750	1.00	41.95	MOL3	N
ATOM	8978	CA	LYS	G	45	9.925	-56.471	-14.287	1.00	39.52	MOL3	C
ATOM	8979	CB	LYS	G	45	10.189	-55.278	-13.359	1.00	42.39	MOL3	C
ATOM	8980	CG	LYS	G	45	11.621	-54.772	-13.365	1.00	66.59	MOL3	C
ATOM	8981	CD	LYS	G	45	12.081	-54.429	-14.790	1.00	87.61	MOL3	C
ATOM	8982	CE	LYS	G	45	13.540	-53.949	-14.837	1.00	89.77	MOL3	C
ATOM	8983	NZ	LYS	G	45	13.975	-53.701	-16.246	1.00	86.88	MOL3	N
ATOM	8984	C	LYS	G	45	11.133	-57.390	-14.357	1.00	34.88	MOL3	C
ATOM	8985	O	LYS	G	45	11.492	-58.022	-13.376	1.00	34.54	MOL3	O
ATOM	8986	N	LEU	G	46	11.751	-57.487	-15.521	1.00	31.84	MOL3	N
ATOM	8987	CA	LEU	G	46	12.904	-58.361	-15.652	1.00	30.83	MOL3	C
ATOM	8988	CB	LEU	G	46	13.305	-58.450	-17.114	1.00	26.43	MOL3	C
ATOM	8989	CG	LEU	G	46	14.584	-59.179	-17.456	1.00	23.79	MOL3	C
ATOM	8990	CD1	LEU	G	46	14.722	-60.416	-16.599	1.00	28.71	MOL3	C
ATOM	8991	CD2	LEU	G	46	14.546	-59.528	-18.922	1.00	19.57	MOL3	C
ATOM	8992	C	LEU	G	46	14.079	-57.907	-14.796	1.00	31.59	MOL3	C
ATOM	8993	O	LEU	G	46	14.435	-56.729	-14.776	1.00	33.27	MOL3	O
ATOM	8994	N	LEU	G	47	14.662	-58.860	-14.078	1.00	30.77	MOL3	N
ATOM	8995	CA	LEU	G	47	15.796	-58.612	-13.201	1.00	32.12	MOL3	C
ATOM	8996	CB	LEU	G	47	15.580	-59.279	-11.851	1.00	31.97	MOL3	C
ATOM	8997	CG	LEU	G	47	15.187	-58.328	-10.735	1.00	41.78	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	8998	CD1	LEU	G	47	16.168	-58.404	-9.585	1.00	39.67	MOL3	C
ATOM	8999	CD2	LEU	G	47	15.156	-56.934	-11.312	1.00	46.47	MOL3	C
ATOM	9000	C	LEU	G	47	17.060	-59.180	-13.780	1.00	33.13	MOL3	C
ATOM	9001	O	LEU	G	47	18.051	-58.482	-13.944	1.00	39.23	MOL3	O
ATOM	9002	N	ILE	G	48	17.015	-60.464	-14.103	1.00	31.38	MOL3	N
ATOM	9003	CA	ILE	G	48	18.190	-61.137	-14.610	1.00	32.41	MOL3	C
ATOM	9004	CB	ILE	G	48	18.884	-61.860	-13.460	1.00	31.26	MOL3	C
ATOM	9005	CG2	ILE	G	48	20.001	-62.712	-13.982	1.00	31.43	MOL3	C
ATOM	9006	CG1	ILE	G	48	19.368	-60.831	-12.436	1.00	35.51	MOL3	C
ATOM	9007	CD1	ILE	G	48	19.885	-61.416	-11.154	1.00	36.86	MOL3	C
ATOM	9008	C	ILE	G	48	17.858	-62.137	-15.681	1.00	34.00	MOL3	C
ATOM	9009	O	ILE	G	48	16.918	-62.895	-15.535	1.00	38.04	MOL3	O
ATOM	9010	N	TYR	G	49	18.625	-62.132	-16.761	1.00	38.94	MOL3	N
ATOM	9011	CA	TYR	G	49	18.401	-63.084	-17.845	1.00	45.76	MOL3	C
ATOM	9012	CB	TYR	G	49	18.189	-62.371	-19.195	1.00	49.55	MOL3	C
ATOM	9013	CG	TYR	G	49	19.338	-61.497	-19.673	1.00	49.70	MOL3	C
ATOM	9014	CD1	TYR	G	49	19.602	-60.275	-19.073	1.00	49.20	MOL3	C
ATOM	9015	CE1	TYR	G	49	20.610	-59.448	-19.544	1.00	50.05	MOL3	C
ATOM	9016	CD2	TYR	G	49	20.125	-61.873	-20.758	1.00	44.58	MOL3	C
ATOM	9017	CE2	TYR	G	49	21.134	-61.050	-21.239	1.00	42.55	MOL3	C
ATOM	9018	CZ	TYR	G	49	21.370	-59.838	-20.627	1.00	49.78	MOL3	C
ATOM	9019	OH	TYR	G	49	22.354	-58.994	-21.089	1.00	50.96	MOL3	O
ATOM	9020	C	TYR	G	49	19.581	-64.043	-17.947	1.00	48.45	MOL3	C
ATOM	9021	O	TYR	G	49	20.657	-63.789	-17.382	1.00	47.87	MOL3	O
ATOM	9022	N	LEU	G	50	19.374	-65.138	-18.676	1.00	44.95	MOL3	N
ATOM	9023	CA	LEU	G	50	20.395	-66.154	-18.837	1.00	42.62	MOL3	C
ATOM	9024	CB	LEU	G	50	21.295	-65.799	-20.014	1.00	43.27	MOL3	C
ATOM	9025	CG	LEU	G	50	20.880	-66.606	-21.246	1.00	43.57	MOL3	C
ATOM	9026	CD1	LEU	G	50	19.410	-66.884	-21.160	1.00	40.55	MOL3	C
ATOM	9027	CD2	LEU	G	50	21.226	-65.874	-22.524	1.00	39.39	MOL3	C
ATOM	9028	C	LEU	G	50	21.209	-66.363	-17.562	1.00	45.78	MOL3	C
ATOM	9029	O	LEU	G	50	22.406	-66.100	-17.515	1.00	48.05	MOL3	O
ATOM	9030	N	VAL	G	51	20.521	-66.812	-16.520	1.00	46.34	MOL3	N
ATOM	9031	CA	VAL	G	51	21.125	-67.119	-15.230	1.00	48.58	MOL3	C
ATOM	9032	CB	VAL	G	51	22.234	-68.170	-15.363	1.00	49.60	MOL3	C
ATOM	9033	CG1	VAL	G	51	22.955	-68.321	-14.026	1.00	44.74	MOL3	C
ATOM	9034	CG2	VAL	G	51	21.658	-69.485	-15.813	1.00	48.42	MOL3	C
ATOM	9035	C	VAL	G	51	21.741	-66.035	-14.376	1.00	51.00	MOL3	C
ATOM	9036	O	VAL	G	51	21.434	-65.920	-13.178	1.00	50.83	MOL3	O
ATOM	9037	N	SER	G	52	22.631	-65.251	-14.964	1.00	49.31	MOL3	N
ATOM	9038	CA	SER	G	52	23.310	-64.269	-14.145	1.00	55.39	MOL3	C
ATOM	9039	CB	SER	G	52	24.646	-64.865	-13.711	1.00	57.96	MOL3	C
ATOM	9040	OG	SER	G	52	25.195	-64.106	-12.655	1.00	72.85	MOL3	O
ATOM	9041	C	SER	G	52	23.538	-62.877	-14.717	1.00	50.82	MOL3	C
ATOM	9042	O	SER	G	52	24.233	-62.065	-14.113	1.00	48.84	MOL3	O
ATOM	9043	N	ASN	G	53	22.951	-62.587	-15.866	1.00	47.12	MOL3	N
ATOM	9044	CA	ASN	G	53	23.139	-61.279	-16.450	1.00	44.83	MOL3	C
ATOM	9045	CB	ASN	G	53	23.211	-61.412	-17.967	1.00	47.38	MOL3	C
ATOM	9046	CG	ASN	G	53	24.324	-62.346	-18.419	1.00	53.95	MOL3	C
ATOM	9047	OD1	ASN	G	53	24.100	-63.542	-18.610	1.00	59.31	MOL3	O
ATOM	9048	ND2	ASN	G	53	25.535	-61.804	-18.582	1.00	50.66	MOL3	N
ATOM	9049	C	ASN	G	53	22.016	-60.324	-16.042	1.00	45.87	MOL3	C
ATOM	9050	O	ASN	G	53	20.834	-60.680	-16.116	1.00	44.59	MOL3	O
ATOM	9051	N	ARG	G	54	22.384	-59.116	-15.607	1.00	40.72	MOL3	N
ATOM	9052	CA	ARG	G	54	21.401	-58.116	-15.194	1.00	42.15	MOL3	C
ATOM	9053	CB	ARG	G	54	21.982	-57.171	-14.143	1.00	41.21	MOL3	C
ATOM	9054	CG	ARG	G	54	22.235	-57.764	-12.792	1.00	52.19	MOL3	C
ATOM	9055	CD	ARG	G	54	23.690	-58.127	-12.653	1.00	68.42	MOL3	C
ATOM	9056	NE	ARG	G	54	24.412	-57.203	-11.791	1.00	74.48	MOL3	N
ATOM	9057	CZ	ARG	G	54	24.268	-55.883	-11.820	1.00	84.27	MOL3	C
ATOM	9058	NH1	ARG	G	54	23.421	-55.307	-12.663	1.00	85.29	MOL3	N
ATOM	9059	NH2	ARG	G	54	24.995	-55.133	-11.011	1.00	91.76	MOL3	N
ATOM	9060	C	ARG	G	54	20.898	-57.234	-16.326	1.00	47.47	MOL3	C
ATOM	9061	O	ARG	G	54	21.649	-56.906	-17.246	1.00	53.93	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	9062	N	GLU	G	55	19.633	-56.828	-16.244	1.00	50.13	MOL3	N
ATOM	9063	CA	GLU	G	55	19.054	-55.935	-17.239	1.00	55.45	MOL3	C
ATOM	9064	CB	GLU	G	55	17.545	-55.810	-17.019	1.00	58.42	MOL3	C
ATOM	9065	CG	GLU	G	55	16.674	-56.365	-18.141	1.00	62.39	MOL3	C
ATOM	9066	CD	GLU	G	55	16.850	-55.610	-19.449	1.00	68.28	MOL3	C
ATOM	9067	OE1	GLU	G	55	15.834	-55.391	-20.141	1.00	64.08	MOL3	O
ATOM	9068	OE2	GLU	G	55	18.001	-55.240	-19.792	1.00	73.31	MOL3	O
ATOM	9069	C	GLU	G	55	19.731	-54.588	-17.012	1.00	58.68	MOL3	C
ATOM	9070	O	GLU	G	55	20.348	-54.371	-15.968	1.00	60.53	MOL3	O
ATOM	9071	N	SER	G	56	19.617	-53.686	-17.976	1.00	59.87	MOL3	N
ATOM	9072	CA	SER	G	56	20.242	-52.377	-17.870	1.00	62.94	MOL3	C
ATOM	9073	CB	SER	G	56	19.701	-51.480	-18.975	1.00	65.70	MOL3	C
ATOM	9074	OG	SER	G	56	19.658	-52.200	-20.201	1.00	79.30	MOL3	O
ATOM	9075	C	SER	G	56	20.061	-51.700	-16.505	1.00	63.43	MOL3	C
ATOM	9076	O	SER	G	56	21.020	-51.523	-15.749	1.00	68.59	MOL3	O
ATOM	9077	N	GLY	G	57	18.832	-51.334	-16.180	1.00	57.93	MOL3	N
ATOM	9078	CA	GLY	G	57	18.589	-50.655	-14.922	1.00	53.96	MOL3	C
ATOM	9079	C	GLY	G	57	18.896	-51.412	-13.648	1.00	52.63	MOL3	C
ATOM	9080	O	GLY	G	57	19.326	-50.819	-12.667	1.00	55.85	MOL3	O
ATOM	9081	N	VAL	G	58	18.680	-52.720	-13.648	1.00	52.62	MOL3	N
ATOM	9082	CA	VAL	G	58	18.915	-53.521	-12.451	1.00	49.03	MOL3	C
ATOM	9083	CB	VAL	G	58	18.962	-55.017	-12.758	1.00	47.64	MOL3	C
ATOM	9084	CG1	VAL	G	58	18.743	-55.793	-11.486	1.00	47.52	MOL3	C
ATOM	9085	CG2	VAL	G	58	17.929	-55.379	-13.787	1.00	47.12	MOL3	C
ATOM	9086	C	VAL	G	58	20.201	-53.172	-11.711	1.00	52.13	MOL3	C
ATOM	9087	O	VAL	G	58	21.308	-53.207	-12.281	1.00	51.96	MOL3	O
ATOM	9088	N	PRO	G	59	20.061	-52.826	-10.421	1.00	48.32	MOL3	N
ATOM	9089	CD	PRO	G	59	18.752	-52.511	-9.826	1.00	51.53	MOL3	C
ATOM	9090	CA	PRO	G	59	21.125	-52.453	-9.500	1.00	47.77	MOL3	C
ATOM	9091	CB	PRO	G	59	20.388	-52.257	-8.192	1.00	41.55	MOL3	C
ATOM	9092	CG	PRO	G	59	19.141	-51.633	-8.640	1.00	49.21	MOL3	C
ATOM	9093	C	PRO	G	59	22.244	-53.451	-9.383	1.00	51.58	MOL3	C
ATOM	9094	O	PRO	G	59	22.138	-54.607	-9.778	1.00	54.15	MOL3	O
ATOM	9095	N	SER	G	60	23.323	-52.964	-8.805	1.00	62.14	MOL3	N
ATOM	9096	CA	SER	G	60	24.530	-53.725	-8.621	1.00	68.95	MOL3	C
ATOM	9097	CB	SER	G	60	25.622	-52.755	-8.125	1.00	81.46	MOL3	C
ATOM	9098	OG	SER	G	60	25.507	-51.455	-8.744	1.00	80.56	MOL3	O
ATOM	9099	C	SER	G	60	24.339	-54.919	-7.672	1.00	68.86	MOL3	C
ATOM	9100	O	SER	G	60	24.908	-55.988	-7.908	1.00	69.31	MOL3	O
ATOM	9101	N	ARG	G	61	23.518	-54.749	-6.629	1.00	65.79	MOL3	N
ATOM	9102	CA	ARG	G	61	23.286	-55.816	-5.634	1.00	62.21	MOL3	C
ATOM	9103	CB	ARG	G	61	22.516	-55.260	-4.424	1.00	60.42	MOL3	C
ATOM	9104	CG	ARG	G	61	21.300	-54.400	-4.754	1.00	60.78	MOL3	C
ATOM	9105	CD	ARG	G	61	20.636	-53.836	-3.486	1.00	53.34	MOL3	C
ATOM	9106	NE	ARG	G	61	19.376	-53.161	-3.783	1.00	45.70	MOL3	N
ATOM	9107	CZ	ARG	G	61	19.286	-51.988	-4.395	1.00	47.19	MOL3	C
ATOM	9108	NH1	ARG	G	61	20.387	-51.361	-4.762	1.00	57.68	MOL3	N
ATOM	9109	NH2	ARG	G	61	18.101	-51.451	-4.664	1.00	47.81	MOL3	N
ATOM	9110	C	ARG	G	61	22.630	-57.132	-6.094	1.00	60.08	MOL3	C
ATOM	9111	O	ARG	G	61	22.955	-58.206	-5.586	1.00	60.15	MOL3	O
ATOM	9112	N	PHE	G	62	21.721	-57.068	-7.052	1.00	53.77	MOL3	N
ATOM	9113	CA	PHE	G	62	21.077	-58.280	-7.517	1.00	53.49	MOL3	C
ATOM	9114	CB	PHE	G	62	19.879	-57.901	-8.377	1.00	52.45	MOL3	C
ATOM	9115	CG	PHE	G	62	18.787	-57.226	-7.622	1.00	44.28	MOL3	C
ATOM	9116	CD1	PHE	G	62	17.984	-57.944	-6.759	1.00	49.58	MOL3	C
ATOM	9117	CD2	PHE	G	62	18.563	-55.879	-7.768	1.00	45.93	MOL3	C
ATOM	9118	CE1	PHE	G	62	16.973	-57.328	-6.054	1.00	52.92	MOL3	C
ATOM	9119	CE2	PHE	G	62	17.552	-55.252	-7.065	1.00	53.51	MOL3	C
ATOM	9120	CZ	PHE	G	62	16.756	-55.980	-6.206	1.00	54.67	MOL3	C
ATOM	9121	C	PHE	G	62	22.042	-59.161	-8.313	1.00	54.06	MOL3	C
ATOM	9122	O	PHE	G	62	22.699	-58.676	-9.230	1.00	57.70	MOL3	O
ATOM	9123	N	SER	G	63	22.122	-60.448	-7.979	1.00	52.56	MOL3	N
ATOM	9124	CA	SER	G	63	23.018	-61.363	-8.693	1.00	54.21	MOL3	C
ATOM	9125	CB	SER	G	63	24.372	-61.412	-7.989	1.00	55.60	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9126	OG	SER	G	63	24.221	-61.114	-6.612	1.00	52.29	MOL3	O
ATOM	9127	C	SER	G	63	22.465	-62.775	-8.827	1.00	53.10	MOL3	C
ATOM	9128	O	SER	G	63	22.010	-63.364	-7.862	1.00	55.14	MOL3	O
ATOM	9129	N	GLY	G	64	22.515	-63.321	-10.033	1.00	57.59	MOL3	N
ATOM	9130	CA	GLY	G	64	22.005	-64.663	-10.256	1.00	62.03	MOL3	C
ATOM	9131	C	GLY	G	64	23.120	-65.678	-10.150	1.00	65.50	MOL3	C
ATOM	9132	O	GLY	G	64	24.254	-65.299	-9.872	1.00	66.87	MOL3	O
ATOM	9133	N	SER	G	65	22.811	-66.957	-10.364	1.00	68.23	MOL3	N
ATOM	9134	CA	SER	G	65	23.821	-68.018	-10.285	1.00	67.23	MOL3	C
ATOM	9135	CB	SER	G	65	24.641	-67.882	-8.993	1.00	68.42	MOL3	C
ATOM	9136	OG	SER	G	65	23.874	-68.137	-7.828	1.00	62.79	MOL3	O
ATOM	9137	C	SER	G	65	23.197	-69.406	-10.335	1.00	67.16	MOL3	C
ATOM	9138	O	SER	G	65	22.237	-69.679	-9.618	1.00	72.98	MOL3	O
ATOM	9139	N	GLY	G	66	23.734	-70.290	-11.166	1.00	62.84	MOL3	N
ATOM	9140	CA	GLY	G	66	23.155	-71.615	-11.226	1.00	68.73	MOL3	C
ATOM	9141	C	GLY	G	66	23.649	-72.558	-12.302	1.00	76.81	MOL3	C
ATOM	9142	O	GLY	G	66	24.269	-72.153	-13.290	1.00	73.43	MOL3	O
ATOM	9143	N	SER	G	67	23.354	-73.840	-12.095	1.00	85.49	MOL3	N
ATOM	9144	CA	SER	G	67	23.755	-74.893	-13.021	1.00	90.60	MOL3	C
ATOM	9145	CB	SER	G	67	23.982	-76.214	-12.270	1.00	90.93	MOL3	C
ATOM	9146	OG	SER	G	67	22.826	-76.617	-11.559	1.00	90.02	MOL3	O
ATOM	9147	C	SER	G	67	22.714	-75.089	-14.110	1.00	91.68	MOL3	C
ATOM	9148	O	SER	G	67	22.721	-74.380	-15.122	1.00	94.33	MOL3	O
ATOM	9149	N	GLY	G	68	21.825	-76.054	-13.893	1.00	90.54	MOL3	N
ATOM	9150	CA	GLY	G	68	20.782	-76.346	-14.858	1.00	89.44	MOL3	C
ATOM	9151	C	GLY	G	68	19.638	-77.073	-14.187	1.00	88.47	MOL3	C
ATOM	9152	O	GLY	G	68	18.751	-77.608	-14.849	1.00	84.62	MOL3	O
ATOM	9153	N	THR	G	69	19.674	-77.087	-12.857	1.00	90.20	MOL3	N
ATOM	9154	CA	THR	G	69	18.653	-77.739	-12.051	1.00	92.56	MOL3	C
ATOM	9155	CB	THR	G	69	19.085	-79.139	-11.627	1.00	98.74	MOL3	C
ATOM	9156	OG1	THR	G	69	18.174	-79.633	-10.638	1.00	108.30	MOL3	O
ATOM	9157	CG2	THR	G	69	20.491	-79.108	-11.042	1.00	103.92	MOL3	C
ATOM	9158	C	THR	G	69	18.380	-76.929	-10.794	1.00	88.90	MOL3	C
ATOM	9159	O	THR	G	69	17.254	-76.887	-10.304	1.00	91.65	MOL3	O
ATOM	9160	N	ASP	G	70	19.421	-76.300	-10.264	1.00	85.97	MOL3	N
ATOM	9161	CA	ASP	G	70	19.279	-75.469	-9.072	1.00	88.69	MOL3	C
ATOM	9162	CB	ASP	G	70	20.038	-76.059	-7.870	1.00	96.68	MOL3	C
ATOM	9163	CG	ASP	G	70	20.738	-77.366	-8.196	1.00	105.12	MOL3	C
ATOM	9164	OD1	ASP	G	70	21.579	-77.390	-9.121	1.00	108.66	MOL3	O
ATOM	9165	OD2	ASP	G	70	20.451	-78.374	-7.519	1.00	111.25	MOL3	O
ATOM	9166	C	ASP	G	70	19.821	-74.078	-9.369	1.00	83.52	MOL3	C
ATOM	9167	O	ASP	G	70	20.894	-73.928	-9.954	1.00	85.96	MOL3	O
ATOM	9168	N	PHE	G	71	19.078	-73.057	-8.970	1.00	73.77	MOL3	N
ATOM	9169	CA	PHE	G	71	19.514	-71.692	-9.198	1.00	62.74	MOL3	C
ATOM	9170	CB	PHE	G	71	18.786	-71.103	-10.387	1.00	58.07	MOL3	C
ATOM	9171	CG	PHE	G	71	18.984	-71.871	-11.644	1.00	60.46	MOL3	C
ATOM	9172	CD1	PHE	G	71	20.165	-71.771	-12.349	1.00	64.47	MOL3	C
ATOM	9173	CD2	PHE	G	71	17.995	-72.702	-12.121	1.00	63.44	MOL3	C
ATOM	9174	CE1	PHE	G	71	20.357	-72.483	-13.508	1.00	61.95	MOL3	C
ATOM	9175	CE2	PHE	G	71	18.178	-73.417	-13.278	1.00	62.01	MOL3	C
ATOM	9176	CZ	PHE	G	71	19.362	-73.306	-13.972	1.00	65.54	MOL3	C
ATOM	9177	C	PHE	G	71	19.216	-70.865	-7.979	1.00	60.82	MOL3	C
ATOM	9178	O	PHE	G	71	18.389	-71.237	-7.146	1.00	68.29	MOL3	O
ATOM	9179	N	THR	G	72	19.889	-69.738	-7.858	1.00	54.02	MOL3	N
ATOM	9180	CA	THR	G	72	19.628	-68.893	-6.718	1.00	56.28	MOL3	C
ATOM	9181	CB	THR	G	72	20.530	-69.243	-5.510	1.00	58.97	MOL3	C
ATOM	9182	OG1	THR	G	72	21.429	-68.154	-5.267	1.00	63.51	MOL3	O
ATOM	9183	CG2	THR	G	72	21.314	-70.536	-5.757	1.00	52.40	MOL3	C
ATOM	9184	C	THR	G	72	19.808	-67.429	-7.064	1.00	54.68	MOL3	C
ATOM	9185	O	THR	G	72	20.738	-67.047	-7.762	1.00	57.65	MOL3	O
ATOM	9186	N	LEU	G	73	18.877	-66.614	-6.602	1.00	51.57	MOL3	N
ATOM	9187	CA	LEU	G	73	18.949	-65.197	-6.844	1.00	50.13	MOL3	C
ATOM	9188	CB	LEU	G	73	17.587	-64.671	-7.285	1.00	49.88	MOL3	C
ATOM	9189	CG	LEU	G	73	17.396	-63.169	-7.104	1.00	57.46	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9190	CD1	LEU	G	73	18.479	-62.395	-7.836	1.00	59.43	MOL3	C
ATOM	9191	CD2	LEU	G	73	16.024	-62.795	-7.606	1.00	57.80	MOL3	C
ATOM	9192	C	LEU	G	73	19.357	-64.646	-5.497	1.00	50.52	MOL3	C
ATOM	9193	O	LEU	G	73	18.968	-65.185	-4.466	1.00	56.98	MOL3	O
ATOM	9194	N	THR	G	74	20.161	-63.595	-5.482	1.00	50.75	MOL3	N
ATOM	9195	CA	THR	G	74	20.589	-63.057	-4.206	1.00	52.46	MOL3	C
ATOM	9196	CB	THR	G	74	21.825	-63.841	-3.655	1.00	56.91	MOL3	C
ATOM	9197	OG1	THR	G	74	22.632	-62.961	-2.860	1.00	58.92	MOL3	O
ATOM	9198	CG2	THR	G	74	22.646	-64.466	-4.793	1.00	49.58	MOL3	C
ATOM	9199	C	THR	G	74	20.861	-61.562	-4.162	1.00	51.48	MOL3	C
ATOM	9200	O	THR	G	74	21.551	-60.997	-5.011	1.00	51.31	MOL3	O
ATOM	9201	N	ILE	G	75	20.299	-60.933	-3.142	1.00	50.98	MOL3	N
ATOM	9202	CA	ILE	G	75	20.440	-59.509	-2.938	1.00	61.03	MOL3	C
ATOM	9203	CB	ILE	G	75	19.086	-58.888	-2.513	1.00	65.72	MOL3	C
ATOM	9204	CG2	ILE	G	75	19.144	-57.369	-2.596	1.00	66.90	MOL3	C
ATOM	9205	CG1	ILE	G	75	17.976	-59.392	-3.438	1.00	68.75	MOL3	C
ATOM	9206	CD1	ILE	G	75	16.610	-58.811	-3.133	1.00	68.20	MOL3	C
ATOM	9207	C	ILE	G	75	21.487	-59.256	-1.853	1.00	65.69	MOL3	C
ATOM	9208	O	ILE	G	75	21.226	-59.446	-0.664	1.00	65.40	MOL3	O
ATOM	9209	N	SER	G	76	22.669	-58.823	-2.286	1.00	67.38	MOL3	N
ATOM	9210	CA	SER	G	76	23.792	-58.532	-1.404	1.00	67.37	MOL3	C
ATOM	9211	CB	SER	G	76	24.922	-57.899	-2.208	1.00	72.25	MOL3	C
ATOM	9212	OG	SER	G	76	25.279	-58.731	-3.291	1.00	86.18	MOL3	O
ATOM	9213	C	SER	G	76	23.458	-57.609	-0.243	1.00	65.06	MOL3	C
ATOM	9214	O	SER	G	76	23.943	-57.801	0.872	1.00	71.05	MOL3	O
ATOM	9215	N	SER	G	77	22.649	-56.595	-0.495	1.00	56.07	MOL3	N
ATOM	9216	CA	SER	G	77	22.315	-55.678	0.571	1.00	57.30	MOL3	C
ATOM	9217	CB	SER	G	77	23.299	-54.518	0.600	1.00	57.18	MOL3	C
ATOM	9218	OG	SER	G	77	22.852	-53.526	1.511	1.00	64.33	MOL3	O
ATOM	9219	C	SER	G	77	20.923	-55.136	0.397	1.00	60.30	MOL3	C
ATOM	9220	O	SER	G	77	20.737	-54.091	-0.222	1.00	66.45	MOL3	O
ATOM	9221	N	LEU	G	78	19.944	-55.828	0.972	1.00	61.04	MOL3	N
ATOM	9222	CA	LEU	G	78	18.545	-55.420	0.843	1.00	57.10	MOL3	C
ATOM	9223	CB	LEU	G	78	17.638	-56.148	1.837	1.00	59.14	MOL3	C
ATOM	9224	CG	LEU	G	78	16.232	-56.405	1.272	1.00	59.20	MOL3	C
ATOM	9225	CD1	LEU	G	78	16.362	-57.395	0.137	1.00	62.71	MOL3	C
ATOM	9226	CD2	LEU	G	78	15.294	-56.975	2.317	1.00	62.35	MOL3	C
ATOM	9227	C	LEU	G	78	18.344	-53.939	1.011	1.00	54.97	MOL3	C
ATOM	9228	O	LEU	G	78	18.943	-53.308	1.876	1.00	55.56	MOL3	O
ATOM	9229	N	GLN	G	79	17.486	-53.394	0.163	1.00	56.22	MOL3	N
ATOM	9230	CA	GLN	G	79	17.183	-51.979	0.188	1.00	59.47	MOL3	C
ATOM	9231	CB	GLN	G	79	17.692	-51.311	-1.086	1.00	62.26	MOL3	C
ATOM	9232	CG	GLN	G	79	19.195	-51.202	-1.148	1.00	65.36	MOL3	C
ATOM	9233	CD	GLN	G	79	19.748	-50.412	0.018	1.00	73.04	MOL3	C
ATOM	9234	OE1	GLN	G	79	19.414	-49.235	0.204	1.00	75.65	MOL3	O
ATOM	9235	NE2	GLN	G	79	20.597	-51.055	0.818	1.00	72.21	MOL3	N
ATOM	9236	C	GLN	G	79	15.687	-51.779	0.323	1.00	59.35	MOL3	C
ATOM	9237	O	GLN	G	79	14.897	-52.654	-0.017	1.00	58.67	MOL3	O
ATOM	9238	N	PRO	G	80	15.279	-50.609	0.819	1.00	61.07	MOL3	N
ATOM	9239	CD	PRO	G	80	16.110	-49.428	1.105	1.00	57.69	MOL3	C
ATOM	9240	CA	PRO	G	80	13.857	-50.309	0.995	1.00	64.17	MOL3	C
ATOM	9241	CB	PRO	G	80	13.852	-48.796	1.192	1.00	64.30	MOL3	C
ATOM	9242	CG	PRO	G	80	15.157	-48.552	1.880	1.00	62.04	MOL3	C
ATOM	9243	C	PRO	G	80	13.013	-50.740	-0.202	1.00	66.97	MOL3	C
ATOM	9244	O	PRO	G	80	12.004	-51.416	-0.054	1.00	72.11	MOL3	O
ATOM	9245	N	GLU	G	81	13.447	-50.358	-1.391	1.00	68.09	MOL3	N
ATOM	9246	CA	GLU	G	81	12.722	-50.671	-2.608	1.00	71.02	MOL3	C
ATOM	9247	CB	GLU	G	81	13.141	-49.691	-3.716	1.00	86.99	MOL3	C
ATOM	9248	CG	GLU	G	81	14.665	-49.488	-3.906	1.00	98.03	MOL3	C
ATOM	9249	CD	GLU	G	81	15.341	-48.753	-2.738	1.00	105.74	MOL3	C
ATOM	9250	OE1	GLU	G	81	14.685	-47.901	-2.091	1.00	107.20	MOL3	O
ATOM	9251	OE2	GLU	G	81	16.538	-49.012	-2.480	1.00	106.18	MOL3	O
ATOM	9252	C	GLU	G	81	12.868	-52.094	-3.108	1.00	64.50	MOL3	C
ATOM	9253	O	GLU	G	81	12.366	-52.429	-4.174	1.00	65.83	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	9254	N	ASP	G	82	13.557	-52.936	-2.358	1.00	58.56	MOL3	N
ATOM	9255	CA	ASP	G	82	13.730	-54.309	-2.812	1.00	60.36	MOL3	C
ATOM	9256	CB	ASP	G	82	15.109	-54.839	-2.426	1.00	67.23	MOL3	C
ATOM	9257	CG	ASP	G	82	16.218	-54.123	-3.140	1.00	71.60	MOL3	C
ATOM	9258	OD1	ASP	G	82	16.071	-53.888	-4.361	1.00	75.55	MOL3	O
ATOM	9259	OD2	ASP	G	82	17.232	-53.804	-2.485	1.00	72.12	MOL3	O
ATOM	9260	C	ASP	G	82	12.657	-55.227	-2.252	1.00	56.97	MOL3	C
ATOM	9261	O	ASP	G	82	12.586	-56.418	-2.579	1.00	49.48	MOL3	O
ATOM	9262	N	PHE	G	83	11.811	-54.666	-1.399	1.00	57.41	MOL3	N
ATOM	9263	CA	PHE	G	83	10.740	-55.455	-0.810	1.00	54.23	MOL3	C
ATOM	9264	CB	PHE	G	83	10.170	-54.762	0.431	1.00	54.67	MOL3	C
ATOM	9265	CG	PHE	G	83	11.083	-54.818	1.615	1.00	55.87	MOL3	C
ATOM	9266	CD1	PHE	G	83	11.510	-53.658	2.235	1.00	56.89	MOL3	C
ATOM	9267	CD2	PHE	G	83	11.538	-56.039	2.091	1.00	59.94	MOL3	C
ATOM	9268	CE1	PHE	G	83	12.379	-53.715	3.308	1.00	63.08	MOL3	C
ATOM	9269	CE2	PHE	G	83	12.404	-56.108	3.162	1.00	60.38	MOL3	C
ATOM	9270	CZ	PHE	G	83	12.828	-54.943	3.773	1.00	63.94	MOL3	C
ATOM	9271	C	PHE	G	83	9.648	-55.680	-1.832	1.00	49.88	MOL3	C
ATOM	9272	O	PHE	G	83	8.812	-54.800	-2.093	1.00	52.08	MOL3	O
ATOM	9273	N	ALA	G	84	9.675	-56.865	-2.422	1.00	39.92	MOL3	N
ATOM	9274	CA	ALA	G	84	8.693	-57.237	-3.427	1.00	42.71	MOL3	C
ATOM	9275	CB	ALA	G	84	9.042	-56.613	-4.764	1.00	47.88	MOL3	C
ATOM	9276	C	ALA	G	84	8.670	-58.743	-3.563	1.00	41.30	MOL3	C
ATOM	9277	O	ALA	G	84	9.245	-59.460	-2.761	1.00	47.67	MOL3	O
ATOM	9278	N	THR	G	85	8.006	-59.231	-4.588	1.00	34.38	MOL3	N
ATOM	9279	CA	THR	G	85	7.945	-60.661	-4.786	1.00	36.94	MOL3	C
ATOM	9280	CB	THR	G	85	6.519	-61.109	-5.157	1.00	43.40	MOL3	C
ATOM	9281	OG1	THR	G	85	5.602	-60.720	-4.119	1.00	40.46	MOL3	O
ATOM	9282	CG2	THR	G	85	6.478	-62.621	-5.370	1.00	42.50	MOL3	C
ATOM	9283	C	THR	G	85	8.871	-60.963	-5.935	1.00	36.36	MOL3	C
ATOM	9284	O	THR	G	85	8.993	-60.147	-6.839	1.00	46.03	MOL3	O
ATOM	9285	N	TYR	G	86	9.513	-62.126	-5.914	1.00	31.26	MOL3	N
ATOM	9286	CA	TYR	G	86	10.442	-62.491	-6.973	1.00	31.58	MOL3	C
ATOM	9287	CB	TYR	G	86	11.853	-62.590	-6.409	1.00	26.22	MOL3	C
ATOM	9288	CG	TYR	G	86	12.354	-61.261	-5.918	1.00	34.59	MOL3	C
ATOM	9289	CD1	TYR	G	86	12.060	-60.816	-4.637	1.00	35.54	MOL3	C
ATOM	9290	CE1	TYR	G	86	12.448	-59.562	-4.205	1.00	30.13	MOL3	C
ATOM	9291	CD2	TYR	G	86	13.057	-60.411	-6.755	1.00	35.99	MOL3	C
ATOM	9292	CE2	TYR	G	86	13.445	-59.151	-6.322	1.00	42.17	MOL3	C
ATOM	9293	CZ	TYR	G	86	13.130	-58.738	-5.047	1.00	33.44	MOL3	C
ATOM	9294	OH	TYR	G	86	13.452	-57.478	-4.634	1.00	36.13	MOL3	O
ATOM	9295	C	TYR	G	86	10.086	-63.787	-7.646	1.00	32.93	MOL3	C
ATOM	9296	O	TYR	G	86	9.800	-64.754	-6.978	1.00	42.80	MOL3	O
ATOM	9297	N	TYR	G	87	10.112	-63.816	-8.970	1.00	34.25	MOL3	N
ATOM	9298	CA	TYR	G	87	9.785	-65.035	-9.693	1.00	38.30	MOL3	C
ATOM	9299	CB	TYR	G	87	8.571	-64.824	-10.591	1.00	41.15	MOL3	C
ATOM	9300	CG	TYR	G	87	7.252	-64.592	-9.903	1.00	44.49	MOL3	C
ATOM	9301	CD1	TYR	G	87	6.368	-65.628	-9.694	1.00	50.72	MOL3	C
ATOM	9302	CE1	TYR	G	87	5.127	-65.399	-9.142	1.00	56.99	MOL3	C
ATOM	9303	CD2	TYR	G	87	6.862	-63.323	-9.530	1.00	48.02	MOL3	C
ATOM	9304	CE2	TYR	G	87	5.630	-63.087	-8.977	1.00	53.20	MOL3	C
ATOM	9305	CZ	TYR	G	87	4.763	-64.123	-8.784	1.00	52.52	MOL3	C
ATOM	9306	OH	TYR	G	87	3.528	-63.879	-8.226	1.00	54.41	MOL3	O
ATOM	9307	C	TYR	G	87	10.922	-65.495	-10.590	1.00	41.02	MOL3	C
ATOM	9308	O	TYR	G	87	11.599	-64.674	-11.201	1.00	46.26	MOL3	O
ATOM	9309	N	CYS	G	88	11.125	-66.804	-10.674	1.00	38.26	MOL3	N
ATOM	9310	CA	CYS	G	88	12.130	-67.341	-11.563	1.00	42.99	MOL3	C
ATOM	9311	C	CYS	G	88	11.368	-67.897	-12.756	1.00	41.84	MOL3	C
ATOM	9312	O	CYS	G	88	10.178	-68.150	-12.654	1.00	46.96	MOL3	O
ATOM	9313	CB	CYS	G	88	12.954	-68.416	-10.864	1.00	57.83	MOL3	C
ATOM	9314	SG	CYS	G	88	12.076	-69.701	-9.911	1.00	83.37	MOL3	S
ATOM	9315	N	GLN	G	89	12.018	-68.046	-13.902	1.00	38.75	MOL3	N
ATOM	9316	CA	GLN	G	89	11.324	-68.564	-15.075	1.00	43.83	MOL3	C
ATOM	9317	CB	GLN	G	89	10.688	-67.432	-15.895	1.00	40.77	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9318	CG	GLN	G	89	10.243	-67.872	-17.308	1.00	44.08	MOL3	C
ATOM	9319	CD	GLN	G	89	10.165	-66.711	-18.290	1.00	44.65	MOL3	C
ATOM	9320	OE1	GLN	G	89	10.778	-65.681	-18.072	1.00	46.53	MOL3	O
ATOM	9321	NE2	GLN	G	89	9.428	-66.882	-19.382	1.00	45.67	MOL3	N
ATOM	9322	C	GLN	G	89	12.290	-69.318	-15.958	1.00	50.40	MOL3	C
ATOM	9323	O	GLN	G	89	13.459	-68.950	-16.054	1.00	54.43	MOL3	O
ATOM	9324	N	GLN	G	90	11.798	-70.366	-16.611	1.00	51.12	MOL3	N
ATOM	9325	CA	GLN	G	90	12.631	-71.169	-17.491	1.00	53.88	MOL3	C
ATOM	9326	CB	GLN	G	90	12.610	-72.645	-17.053	1.00	54.93	MOL3	C
ATOM	9327	CG	GLN	G	90	11.279	-73.372	-17.270	1.00	60.36	MOL3	C
ATOM	9328	CD	GLN	G	90	11.121	-73.903	-18.687	1.00	65.13	MOL3	C
ATOM	9329	OE1	GLN	G	90	10.036	-74.322	-19.105	1.00	65.50	MOL3	O
ATOM	9330	NE2	GLN	G	90	12.213	-73.893	-19.432	1.00	71.24	MOL3	N
ATOM	9331	C	GLN	G	90	12.056	-71.028	-18.878	1.00	53.56	MOL3	C
ATOM	9332	O	GLN	G	90	10.868	-70.755	-19.021	1.00	50.35	MOL3	O
ATOM	9333	N	THR	G	91	12.900	-71.198	-19.891	1.00	55.41	MOL3	N
ATOM	9334	CA	THR	G	91	12.456	-71.106	-21.270	1.00	60.76	MOL3	C
ATOM	9335	CB	THR	G	91	12.789	-69.732	-21.901	1.00	61.23	MOL3	C
ATOM	9336	OG1	THR	G	91	14.137	-69.370	-21.587	1.00	66.23	MOL3	O
ATOM	9337	CG2	THR	G	91	11.847	-68.662	-21.390	1.00	59.04	MOL3	C
ATOM	9338	C	THR	G	91	13.098	-72.201	-22.101	1.00	66.38	MOL3	C
ATOM	9339	O	THR	G	91	13.228	-72.070	-23.311	1.00	68.83	MOL3	O
ATOM	9340	N	TRP	G	92	13.508	-73.282	-21.450	1.00	72.90	MOL3	N
ATOM	9341	CA	TRP	G	92	14.101	-74.391	-22.179	1.00	82.64	MOL3	C
ATOM	9342	CB	TRP	G	92	14.903	-75.317	-21.249	1.00	92.36	MOL3	C
ATOM	9343	CG	TRP	G	92	16.135	-75.882	-21.919	1.00	107.39	MOL3	C
ATOM	9344	CD2	TRP	G	92	16.173	-76.874	-22.951	1.00	113.90	MOL3	C
ATOM	9345	CE2	TRP	G	92	17.515	-76.985	-23.378	1.00	116.36	MOL3	C
ATOM	9346	CE3	TRP	G	92	15.203	-77.673	-23.561	1.00	120.18	MOL3	C
ATOM	9347	CD1	TRP	G	92	17.424	-75.455	-21.762	1.00	112.31	MOL3	C
ATOM	9348	NE1	TRP	G	92	18.259	-76.108	-22.634	1.00	112.14	MOL3	N
ATOM	9349	CZ2	TRP	G	92	17.909	-77.862	-24.386	1.00	121.41	MOL3	C
ATOM	9350	CZ3	TRP	G	92	15.595	-78.546	-24.566	1.00	125.94	MOL3	C
ATOM	9351	CH2	TRP	G	92	16.937	-78.632	-24.968	1.00	126.33	MOL3	C
ATOM	9352	C	TRP	G	92	12.985	-75.188	-22.852	1.00	85.04	MOL3	C
ATOM	9353	O	TRP	G	92	12.970	-75.333	-24.070	1.00	86.92	MOL3	O
ATOM	9354	N	SER	G	93	12.040	-75.685	-22.056	1.00	90.80	MOL3	N
ATOM	9355	CA	SER	G	93	10.924	-76.486	-22.572	1.00	98.46	MOL3	C
ATOM	9356	CB	SER	G	93	10.498	-77.523	-21.522	1.00	106.12	MOL3	C
ATOM	9357	OG	SER	G	93	9.909	-78.668	-22.123	1.00	113.34	MOL3	O
ATOM	9358	C	SER	G	93	9.737	-75.602	-22.944	1.00	98.41	MOL3	C
ATOM	9359	O	SER	G	93	9.324	-74.751	-22.153	1.00	97.41	MOL3	O
ATOM	9360	N	ASP	G	94	9.178	-75.839	-24.132	1.00	97.22	MOL3	N
ATOM	9361	CA	ASP	G	94	8.076	-75.042	-24.657	1.00	99.78	MOL3	C
ATOM	9362	CB	ASP	G	94	7.395	-75.780	-25.799	1.00	105.41	MOL3	C
ATOM	9363	CG	ASP	G	94	7.862	-75.274	-27.155	1.00	113.87	MOL3	C
ATOM	9364	OD1	ASP	G	94	7.655	-74.072	-27.437	1.00	113.60	MOL3	O
ATOM	9365	OD2	ASP	G	94	8.445	-76.063	-27.932	1.00	120.61	MOL3	O
ATOM	9366	C	ASP	G	94	7.035	-74.443	-23.713	1.00	100.01	MOL3	C
ATOM	9367	O	ASP	G	94	6.713	-73.254	-23.829	1.00	106.52	MOL3	O
ATOM	9368	N	PRO	G	95	6.466	-75.235	-22.792	1.00	93.31	MOL3	N
ATOM	9369	CD	PRO	G	95	6.356	-76.694	-22.678	1.00	89.29	MOL3	C
ATOM	9370	CA	PRO	G	95	5.489	-74.561	-21.924	1.00	84.85	MOL3	C
ATOM	9371	CB	PRO	G	95	4.767	-75.711	-21.238	1.00	77.59	MOL3	C
ATOM	9372	CG	PRO	G	95	4.938	-76.839	-22.198	1.00	91.35	MOL3	C
ATOM	9373	C	PRO	G	95	6.294	-73.750	-20.920	1.00	81.43	MOL3	C
ATOM	9374	O	PRO	G	95	6.496	-74.203	-19.798	1.00	84.19	MOL3	O
ATOM	9375	N	TRP	G	96	6.777	-72.575	-21.322	1.00	72.95	MOL3	N
ATOM	9376	CA	TRP	G	96	7.571	-71.760	-20.413	1.00	66.65	MOL3	C
ATOM	9377	CB	TRP	G	96	7.819	-70.377	-21.008	1.00	66.86	MOL3	C
ATOM	9378	CG	TRP	G	96	8.524	-70.410	-22.314	1.00	67.77	MOL3	C
ATOM	9379	CD2	TRP	G	96	8.432	-69.441	-23.362	1.00	73.87	MOL3	C
ATOM	9380	CE2	TRP	G	96	9.248	-69.889	-24.420	1.00	72.77	MOL3	C
ATOM	9381	CE3	TRP	G	96	7.738	-68.237	-23.510	1.00	75.04	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9382	CD1	TRP	G	96	9.373	-71.373	-22.758	1.00	70.29	MOL3	C
ATOM	9383	NE1	TRP	G	96	9.813	-71.073	-24.028	1.00	71.16	MOL3	N
ATOM	9384	CZ2	TRP	G	96	9.385	-69.179	-25.608	1.00	73.12	MOL3	C
ATOM	9385	CZ3	TRP	G	96	7.878	-67.534	-24.694	1.00	76.94	MOL3	C
ATOM	9386	CH2	TRP	G	96	8.693	-68.006	-25.725	1.00	74.23	MOL3	C
ATOM	9387	C	TRP	G	96	6.847	-71.650	-19.073	1.00	65.18	MOL3	C
ATOM	9388	O	TRP	G	96	5.660	-71.319	-19.019	1.00	66.34	MOL3	O
ATOM	9389	N	THR	G	97	7.561	-71.925	-17.988	1.00	61.09	MOL3	N
ATOM	9390	CA	THR	G	97	6.955	-71.899	-16.659	1.00	65.03	MOL3	C
ATOM	9391	CB	THR	G	97	7.001	-73.293	-16.032	1.00	67.22	MOL3	C
ATOM	9392	OG1	THR	G	97	8.353	-73.768	-16.020	1.00	63.22	MOL3	O
ATOM	9393	CG2	THR	G	97	6.153	-74.254	-16.833	1.00	74.80	MOL3	C
ATOM	9394	C	THR	G	97	7.585	-70.938	-15.664	1.00	62.36	MOL3	C
ATOM	9395	O	THR	G	97	8.752	-70.581	-15.794	1.00	70.37	MOL3	O
ATOM	9396	N	PHE	G	98	6.815	-70.532	-14.660	1.00	52.65	MOL3	N
ATOM	9397	CA	PHE	G	98	7.334	-69.622	-13.656	1.00	54.09	MOL3	C
ATOM	9398	CB	PHE	G	98	6.497	-68.342	-13.605	1.00	56.03	MOL3	C
ATOM	9399	CG	PHE	G	98	6.612	-67.493	-14.836	1.00	54.73	MOL3	C
ATOM	9400	CD1	PHE	G	98	6.221	-67.979	-16.072	1.00	58.99	MOL3	C
ATOM	9401	CD2	PHE	G	98	7.127	-66.224	-14.764	1.00	49.70	MOL3	C
ATOM	9402	CE1	PHE	G	98	6.347	-67.209	-17.217	1.00	52.80	MOL3	C
ATOM	9403	CE2	PHE	G	98	7.252	-65.456	-15.905	1.00	57.24	MOL3	C
ATOM	9404	CZ	PHE	G	98	6.860	-65.952	-17.133	1.00	52.09	MOL3	C
ATOM	9405	C	PHE	G	98	7.343	-70.273	-12.285	1.00	56.18	MOL3	C
ATOM	9406	O	PHE	G	98	6.818	-71.362	-12.095	1.00	60.20	MOL3	O
ATOM	9407	N	GLY	G	99	7.958	-69.599	-11.326	1.00	59.27	MOL3	N
ATOM	9408	CA	GLY	G	99	8.003	-70.117	-9.977	1.00	54.28	MOL3	C
ATOM	9409	C	GLY	G	99	6.782	-69.592	-9.243	1.00	58.17	MOL3	C
ATOM	9410	O	GLY	G	99	6.030	-68.750	-9.758	1.00	51.24	MOL3	O
ATOM	9411	N	GLN	G	100	6.578	-70.100	-8.035	1.00	60.52	MOL3	N
ATOM	9412	CA	GLN	G	100	5.449	-69.696	-7.211	1.00	58.73	MOL3	C
ATOM	9413	CB	GLN	G	100	5.346	-70.563	-5.959	1.00	66.97	MOL3	C
ATOM	9414	CG	GLN	G	100	6.680	-71.019	-5.412	1.00	69.67	MOL3	C
ATOM	9415	CD	GLN	G	100	7.207	-72.178	-6.222	1.00	80.37	MOL3	C
ATOM	9416	OE1	GLN	G	100	8.397	-72.470	-6.213	1.00	83.56	MOL3	O
ATOM	9417	NE2	GLN	G	100	6.307	-72.857	-6.932	1.00	80.26	MOL3	N
ATOM	9418	C	GLN	G	100	5.641	-68.280	-6.763	1.00	56.38	MOL3	C
ATOM	9419	O	GLN	G	100	4.683	-67.620	-6.381	1.00	60.88	MOL3	O
ATOM	9420	N	GLY	G	101	6.889	-67.829	-6.783	1.00	53.37	MOL3	N
ATOM	9421	CA	GLY	G	101	7.196	-66.480	-6.349	1.00	53.27	MOL3	C
ATOM	9422	C	GLY	G	101	7.527	-66.401	-4.866	1.00	52.19	MOL3	C
ATOM	9423	O	GLY	G	101	6.896	-67.059	-4.040	1.00	54.76	MOL3	O
ATOM	9424	N	THR	G	102	8.517	-65.581	-4.533	1.00	51.37	MOL3	N
ATOM	9425	CA	THR	G	102	8.963	-65.395	-3.155	1.00	48.52	MOL3	C
ATOM	9426	CB	THR	G	102	10.475	-65.654	-3.026	1.00	47.16	MOL3	C
ATOM	9427	OG1	THR	G	102	10.760	-67.011	-3.386	1.00	45.24	MOL3	O
ATOM	9428	CG2	THR	G	102	10.947	-65.366	-1.613	1.00	28.54	MOL3	C
ATOM	9429	C	THR	G	102	8.708	-63.965	-2.715	1.00	49.06	MOL3	C
ATOM	9430	O	THR	G	102	9.189	-63.026	-3.341	1.00	50.78	MOL3	O
ATOM	9431	N	LYS	G	103	7.959	-63.794	-1.638	1.00	47.88	MOL3	N
ATOM	9432	CA	LYS	G	103	7.681	-62.456	-1.168	1.00	53.43	MOL3	C
ATOM	9433	CB	LYS	G	103	6.246	-62.359	-0.628	1.00	53.18	MOL3	C
ATOM	9434	CG	LYS	G	103	5.942	-60.998	-0.003	1.00	63.25	MOL3	C
ATOM	9435	CD	LYS	G	103	4.625	-60.396	-0.499	1.00	78.01	MOL3	C
ATOM	9436	CE	LYS	G	103	3.422	-60.787	0.370	1.00	85.65	MOL3	C
ATOM	9437	NZ	LYS	G	103	2.142	-60.134	-0.074	1.00	86.23	MOL3	N
ATOM	9438	C	LYS	G	103	8.667	-62.078	-0.079	1.00	52.90	MOL3	C
ATOM	9439	O	LYS	G	103	8.808	-62.803	0.898	1.00	55.67	MOL3	O
ATOM	9440	N	VAL	G	104	9.362	-60.958	-0.257	1.00	48.13	MOL3	N
ATOM	9441	CA	VAL	G	104	10.302	-60.488	0.749	1.00	46.61	MOL3	C
ATOM	9442	CB	VAL	G	104	11.600	-59.944	0.151	1.00	44.34	MOL3	C
ATOM	9443	CG1	VAL	G	104	12.285	-59.072	1.173	1.00	47.16	MOL3	C
ATOM	9444	CG2	VAL	G	104	12.527	-61.087	-0.236	1.00	34.69	MOL3	C
ATOM	9445	C	VAL	G	104	9.620	-59.361	1.478	1.00	51.75	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9446	O	VAL	G	104	9.178	-58.398	0.850	1.00	56.13	MOL3	O
ATOM	9447	N	GLU	G	105	9.550	-59.485	2.802	1.00	56.30	MOL3	N
ATOM	9448	CA	GLU	G	105	8.883	-58.508	3.657	1.00	62.68	MOL3	C
ATOM	9449	CB	GLU	G	105	7.687	-59.188	4.331	1.00	68.61	MOL3	C
ATOM	9450	CG	GLU	G	105	6.761	-59.913	3.345	1.00	81.12	MOL3	C
ATOM	9451	CD	GLU	G	105	5.877	-60.980	4.000	1.00	89.16	MOL3	C
ATOM	9452	OE1	GLU	G	105	6.429	-61.894	4.665	1.00	87.13	MOL3	O
ATOM	9453	OE2	GLU	G	105	4.631	-60.906	3.836	1.00	90.53	MOL3	O
ATOM	9454	C	GLU	G	105	9.846	-57.972	4.708	1.00	61.84	MOL3	C
ATOM	9455	O	GLU	G	105	10.789	-58.659	5.087	1.00	60.52	MOL3	O
ATOM	9456	N	ILE	G	106	9.595	-56.756	5.185	1.00	63.70	MOL3	N
ATOM	9457	CA	ILE	G	106	10.457	-56.123	6.180	1.00	66.29	MOL3	C
ATOM	9458	CB	ILE	G	106	10.163	-54.609	6.272	1.00	75.24	MOL3	C
ATOM	9459	CG2	ILE	G	106	8.792	-54.358	6.907	1.00	73.40	MOL3	C
ATOM	9460	CG1	ILE	G	106	11.240	-53.929	7.109	1.00	83.07	MOL3	C
ATOM	9461	CD1	ILE	G	106	10.937	-52.475	7.395	1.00	94.36	MOL3	C
ATOM	9462	C	ILE	G	106	10.298	-56.724	7.570	1.00	63.00	MOL3	C
ATOM	9463	O	ILE	G	106	9.198	-56.736	8.115	1.00	62.22	MOL3	O
ATOM	9464	N	LYS	G	107	11.397	-57.215	8.148	1.00	61.89	MOL3	N
ATOM	9465	CA	LYS	G	107	11.348	-57.803	9.490	1.00	58.32	MOL3	C
ATOM	9466	CB	LYS	G	107	12.560	-58.703	9.756	1.00	64.24	MOL3	C
ATOM	9467	CG	LYS	G	107	12.556	-59.302	11.164	1.00	76.68	MOL3	C
ATOM	9468	CD	LYS	G	107	12.882	-60.809	11.291	1.00	84.55	MOL3	C
ATOM	9469	CE	LYS	G	107	12.665	-61.387	12.607	1.00	92.40	MOL3	C
ATOM	9470	NZ	LYS	G	107	13.074	-62.821	12.794	1.00	93.06	MOL3	N
ATOM	9471	C	LYS	G	107	11.290	-56.737	10.561	1.00	50.25	MOL3	C
ATOM	9472	O	LYS	G	107	11.867	-55.674	10.412	1.00	53.80	MOL3	O
ATOM	9473	N	ARG	G	108	10.576	-57.008	11.639	1.00	50.03	MOL3	N
ATOM	9474	CA	ARG	G	108	10.494	-56.038	12.717	1.00	55.61	MOL3	C
ATOM	9475	CB	ARG	G	108	9.475	-54.948	12.375	1.00	57.58	MOL3	C
ATOM	9476	CG	ARG	G	108	8.027	-55.399	12.345	1.00	61.93	MOL3	C
ATOM	9477	CD	ARG	G	108	7.352	-55.151	13.680	1.00	64.48	MOL3	C
ATOM	9478	NE	ARG	G	108	6.746	-53.827	13.804	1.00	67.68	MOL3	N
ATOM	9479	CZ	ARG	G	108	6.291	-53.321	14.950	1.00	72.94	MOL3	C
ATOM	9480	NH1	ARG	G	108	6.386	-54.027	16.072	1.00	69.80	MOL3	N
ATOM	9481	NH2	ARG	G	108	5.721	-52.119	14.980	1.00	70.24	MOL3	N
ATOM	9482	C	ARG	G	108	10.175	-56.658	14.080	1.00	60.90	MOL3	C
ATOM	9483	O	ARG	G	108	9.930	-57.867	14.210	1.00	65.41	MOL3	O
ATOM	9484	N	THR	G	109	10.211	-55.817	15.105	1.00	62.58	MOL3	N
ATOM	9485	CA	THR	G	109	9.940	-56.237	16.471	1.00	60.47	MOL3	C
ATOM	9486	CB	THR	G	109	10.003	-55.043	17.404	1.00	60.71	MOL3	C
ATOM	9487	OG1	THR	G	109	9.235	-55.311	18.580	1.00	73.35	MOL3	O
ATOM	9488	CG2	THR	G	109	9.408	-53.842	16.721	1.00	66.48	MOL3	C
ATOM	9489	C	THR	G	109	8.543	-56.816	16.562	1.00	59.71	MOL3	C
ATOM	9490	O	THR	G	109	7.607	-56.240	16.026	1.00	58.88	MOL3	O
ATOM	9491	N	ASP	G	110	8.393	-57.943	17.251	1.00	61.73	MOL3	N
ATOM	9492	CA	ASP	G	110	7.075	-58.564	17.399	1.00	60.21	MOL3	C
ATOM	9493	CB	ASP	G	110	7.203	-59.886	18.156	1.00	65.63	MOL3	C
ATOM	9494	CG	ASP	G	110	8.011	-60.914	17.387	1.00	75.02	MOL3	C
ATOM	9495	OD1	ASP	G	110	9.028	-60.522	16.767	1.00	80.50	MOL3	O
ATOM	9496	OD2	ASP	G	110	7.637	-62.109	17.407	1.00	75.96	MOL3	O
ATOM	9497	C	ASP	G	110	6.102	-57.638	18.127	1.00	54.74	MOL3	C
ATOM	9498	O	ASP	G	110	6.510	-56.783	18.921	1.00	47.51	MOL3	O
ATOM	9499	N	ALA	G	111	4.815	-57.788	17.832	1.00	49.84	MOL3	N
ATOM	9500	CA	ALA	G	111	3.798	-56.966	18.481	1.00	53.97	MOL3	C
ATOM	9501	CB	ALA	G	111	3.636	-55.640	17.783	1.00	51.21	MOL3	C
ATOM	9502	C	ALA	G	111	2.473	-57.699	18.512	1.00	58.54	MOL3	C
ATOM	9503	O	ALA	G	111	2.041	-58.288	17.517	1.00	53.64	MOL3	O
ATOM	9504	N	ALA	G	112	1.833	-57.663	19.676	1.00	62.23	MOL3	N
ATOM	9505	CA	ALA	G	112	0.564	-58.345	19.866	1.00	57.12	MOL3	C
ATOM	9506	CB	ALA	G	112	0.285	-58.531	21.339	1.00	60.78	MOL3	C
ATOM	9507	C	ALA	G	112	-0.572	-57.595	19.226	1.00	56.03	MOL3	C
ATOM	9508	O	ALA	G	112	-0.569	-56.362	19.147	1.00	61.24	MOL3	O
ATOM	9509	N	PRO	G	113	-2.573	-58.338	18.761	1.00	51.66	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	9510	CD	PRO	G	113	-1.613	-59.802	18.801	1.00	51.71	MOL3	C
ATOM	9511	CA	PRO	G	113	-2.769	-57.824	18.108	1.00	52.64	MOL3	C
ATOM	9512	CB	PRO	G	113	-3.399	-59.073	17.523	1.00	52.21	MOL3	C
ATOM	9513	CG	PRO	G	113	-3.086	-60.069	18.534	1.00	52.02	MOL3	C
ATOM	9514	C	PRO	G	113	-3.695	-57.165	19.087	1.00	55.64	MOL3	C
ATOM	9515	O	PRO	G	113	-3.695	-57.483	20.272	1.00	58.00	MOL3	O
ATOM	9516	N	THR	G	114	-4.496	-56.250	18.570	1.00	60.16	MOL3	N
ATOM	9517	CA	THR	G	114	-5.474	-55.537	19.368	1.00	64.05	MOL3	C
ATOM	9518	CB	THR	G	114	-5.299	-54.054	19.174	1.00	62.25	MOL3	C
ATOM	9519	OG1	THR	G	114	-3.938	-53.718	19.479	1.00	69.10	MOL3	O
ATOM	9520	CG2	THR	G	114	-6.260	-53.285	20.055	1.00	54.79	MOL3	C
ATOM	9521	C	THR	G	114	-6.823	-55.980	18.833	1.00	66.27	MOL3	C
ATOM	9522	O	THR	G	114	-7.265	-55.517	17.785	1.00	68.25	MOL3	O
ATOM	9523	N	VAL	G	115	-7.474	-56.888	19.550	1.00	66.96	MOL3	N
ATOM	9524	CA	VAL	G	115	-8.755	-57.412	19.098	1.00	65.05	MOL3	C
ATOM	9525	CB	VAL	G	115	-8.996	-58.818	19.640	1.00	60.15	MOL3	C
ATOM	9526	CG1	VAL	G	115	-10.030	-59.531	18.791	1.00	52.83	MOL3	C
ATOM	9527	CG2	VAL	G	115	-7.697	-59.579	19.652	1.00	64.42	MOL3	C
ATOM	9528	C	VAL	G	115	-9.960	-56.563	19.450	1.00	67.57	MOL3	C
ATOM	9529	O	VAL	G	115	-9.931	-55.750	20.378	1.00	69.52	MOL3	O
ATOM	9530	N	SER	G	116	-11.028	-56.776	18.690	1.00	69.63	MOL3	N
ATOM	9531	CA	SER	G	116	-12.285	-56.062	18.870	1.00	70.90	MOL3	C
ATOM	9532	CB	SER	G	116	-12.180	-54.701	18.203	1.00	75.40	MOL3	C
ATOM	9533	OG	SER	G	116	-11.305	-54.796	17.089	1.00	82.22	MOL3	O
ATOM	9534	C	SER	G	116	-13.398	-56.885	18.231	1.00	67.95	MOL3	C
ATOM	9535	O	SER	G	116	-13.283	-57.307	17.083	1.00	63.09	MOL3	O
ATOM	9536	N	ILE	G	117	-14.466	-57.129	18.981	1.00	67.87	MOL3	N
ATOM	9537	CA	ILE	G	117	-15.580	-57.916	18.461	1.00	69.73	MOL3	C
ATOM	9538	CB	ILE	G	117	-15.907	-59.111	19.385	1.00	70.07	MOL3	C
ATOM	9539	CG2	ILE	G	117	-16.750	-58.648	20.557	1.00	69.94	MOL3	C
ATOM	9540	CG1	ILE	G	117	-16.697	-60.170	18.619	1.00	70.23	MOL3	C
ATOM	9541	CD1	ILE	G	117	-16.683	-61.525	19.300	1.00	70.26	MOL3	C
ATOM	9542	C	ILE	G	117	-16.833	-57.054	18.311	1.00	71.08	MOL3	C
ATOM	9543	O	ILE	G	117	-17.148	-56.227	19.174	1.00	69.98	MOL3	O
ATOM	9544	N	PHE	G	118	-17.549	-57.259	17.211	1.00	70.99	MOL3	N
ATOM	9545	CA	PHE	G	118	-18.750	-56.487	16.922	1.00	69.44	MOL3	C
ATOM	9546	CB	PHE	G	118	-18.530	-55.614	15.681	1.00	62.42	MOL3	C
ATOM	9547	CG	PHE	G	118	-17.466	-54.575	15.846	1.00	54.81	MOL3	C
ATOM	9548	CD1	PHE	G	118	-16.128	-54.925	15.839	1.00	55.60	MOL3	C
ATOM	9549	CD2	PHE	G	118	-17.805	-53.242	16.011	1.00	51.96	MOL3	C
ATOM	9550	CE1	PHE	G	118	-15.142	-53.959	15.992	1.00	54.63	MOL3	C
ATOM	9551	CE2	PHE	G	118	-16.834	-52.270	16.164	1.00	49.00	MOL3	C
ATOM	9552	CZ	PHE	G	118	-15.495	-52.632	16.154	1.00	52.65	MOL3	C
ATOM	9553	C	PHE	G	118	-19.996	-57.332	16.686	1.00	72.36	MOL3	C
ATOM	9554	O	PHE	G	118	-20.001	-58.243	15.850	1.00	71.00	MOL3	O
ATOM	9555	N	PRO	G	119	-21.083	-57.014	17.407	1.00	75.07	MOL3	N
ATOM	9556	CD	PRO	G	119	-21.103	-55.985	18.455	1.00	76.76	MOL3	C
ATOM	9557	CA	PRO	G	119	-22.382	-57.694	17.332	1.00	73.75	MOL3	C
ATOM	9558	CB	PRO	G	119	-23.150	-57.126	18.519	1.00	75.13	MOL3	C
ATOM	9559	CG	PRO	G	119	-22.062	-56.590	19.432	1.00	80.98	MOL3	C
ATOM	9560	C	PRO	G	119	-23.027	-57.282	16.036	1.00	70.57	MOL3	C
ATOM	9561	O	PRO	G	119	-22.787	-56.185	15.554	1.00	73.68	MOL3	O
ATOM	9562	N	PRO	G	120	-23.857	-58.150	15.457	1.00	69.35	MOL3	N
ATOM	9563	CD	PRO	G	120	-24.086	-59.537	15.888	1.00	74.69	MOL3	C
ATOM	9564	CA	PRO	G	120	-24.552	-57.875	14.199	1.00	69.18	MOL3	C
ATOM	9565	CB	PRO	G	120	-25.495	-59.055	14.060	1.00	67.07	MOL3	C
ATOM	9566	CG	PRO	G	120	-24.688	-60.165	14.633	1.00	76.37	MOL3	C
ATOM	9567	C	PRO	G	120	-25.294	-56.559	14.209	1.00	73.59	MOL3	C
ATOM	9568	O	PRO	G	120	-25.978	-56.215	15.171	1.00	77.28	MOL3	O
ATOM	9569	N	SER	G	121	-25.145	-55.815	13.127	1.00	80.20	MOL3	N
ATOM	9570	CA	SER	G	121	-25.808	-54.532	13.000	1.00	86.41	MOL3	C
ATOM	9571	CB	SER	G	121	-25.455	-53.930	11.640	1.00	85.97	MOL3	C
ATOM	9572	OG	SER	G	121	-26.166	-52.727	11.424	1.00	92.58	MOL3	O
ATOM	9573	C	SER	G	121	-27.322	-54.730	13.110	1.00	88.90	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9574	O	SER	G	121	-27.882	-55.582	12.422	1.00	90.54	MOL3	O
ATOM	9575	N	SER	G	122	-27.979	-53.963	13.977	1.00	88.80	MOL3	N
ATOM	9576	CA	SER	G	122	-29.427	-54.064	14.126	1.00	88.92	MOL3	C
ATOM	9577	CB	SER	G	122	-29.949	-52.912	14.982	1.00	87.53	MOL3	C
ATOM	9578	OG	SER	G	122	-29.744	-51.671	14.324	1.00	81.66	MOL3	O
ATOM	9579	C	SER	G	122	-30.018	-53.959	12.721	1.00	91.86	MOL3	C
ATOM	9580	O	SER	G	122	-30.960	-54.682	12.368	1.00	95.70	MOL3	O
ATOM	9581	N	GLU	G	123	-29.448	-53.049	11.929	1.00	88.58	MOL3	N
ATOM	9582	CA	GLU	G	123	-29.878	-52.829	10.552	1.00	90.03	MOL3	C
ATOM	9583	CB	GLU	G	123	-28.981	-51.806	9.859	1.00	93.16	MOL3	C
ATOM	9584	CG	GLU	G	123	-29.097	-50.381	10.358	1.00	104.12	MOL3	C
ATOM	9585	CD	GLU	G	123	-28.124	-49.442	9.649	1.00	107.92	MOL3	C
ATOM	9586	OE1	GLU	G	123	-28.038	-49.505	8.399	1.00	107.64	MOL3	O
ATOM	9587	OE2	GLU	G	123	-27.451	-48.641	10.339	1.00	106.83	MOL3	O
ATOM	9588	C	GLU	G	123	-29.784	-54.122	9.766	1.00	89.02	MOL3	C
ATOM	9589	O	GLU	G	123	-30.599	-54.395	8.887	1.00	90.23	MOL3	O
ATOM	9590	N	GLN	G	124	-28.772	-54.919	10.074	1.00	87.71	MOL3	N
ATOM	9591	CA	GLN	G	124	-28.590	-56.166	9.359	1.00	85.87	MOL3	C
ATOM	9592	CB	GLN	G	124	-27.158	-56.700	9.549	1.00	83.04	MOL3	C
ATOM	9593	CG	GLN	G	124	-26.679	-57.575	8.380	1.00	72.78	MOL3	C
ATOM	9594	CD	GLN	G	124	-25.579	-58.571	8.745	1.00	67.34	MOL3	C
ATOM	9595	OE1	GLN	G	124	-25.236	-59.432	7.941	1.00	64.50	MOL3	O
ATOM	9596	NE2	GLN	G	124	-25.029	-58.458	9.952	1.00	62.37	MOL3	N
ATOM	9597	C	GLN	G	124	-29.624	-57.200	9.804	1.00	88.09	MOL3	C
ATOM	9598	O	GLN	G	124	-30.260	-57.840	8.969	1.00	88.19	MOL3	O
ATOM	9599	N	LEU	G	125	-29.800	-57.345	11.116	1.00	88.35	MOL3	N
ATOM	9600	CA	LEU	G	125	-30.749	-58.302	11.664	1.00	88.57	MOL3	C
ATOM	9601	CB	LEU	G	125	-30.919	-58.060	13.154	1.00	81.47	MOL3	C
ATOM	9602	CG	LEU	G	125	-29.566	-58.007	13.846	1.00	80.53	MOL3	C
ATOM	9603	CD1	LEU	G	125	-29.715	-58.053	15.361	1.00	81.15	MOL3	C
ATOM	9604	CD2	LEU	G	125	-28.758	-59.180	13.353	1.00	82.76	MOL3	C
ATOM	9605	C	LEU	G	125	-32.089	-58.185	10.964	1.00	94.05	MOL3	C
ATOM	9606	O	LEU	G	125	-32.764	-59.186	10.721	1.00	99.06	MOL3	O
ATOM	9607	N	THR	G	126	-32.470	-56.957	10.635	1.00	94.75	MOL3	N
ATOM	9608	CA	THR	G	126	-33.729	-56.724	9.955	1.00	98.01	MOL3	C
ATOM	9609	CB	THR	G	126	-34.145	-55.249	10.056	1.00	99.91	MOL3	C
ATOM	9610	OG1	THR	G	126	-33.243	-54.445	9.290	1.00	106.32	MOL3	O
ATOM	9611	CG2	THR	G	126	-34.118	-54.792	11.511	1.00	96.26	MOL3	C
ATOM	9612	C	THR	G	126	-33.588	-57.123	8.488	1.00	98.92	MOL3	C
ATOM	9613	O	THR	G	126	-33.844	-56.334	7.581	1.00	100.22	MOL3	O
ATOM	9614	N	SER	G	127	-33.166	-58.360	8.268	1.00	100.96	MOL3	N
ATOM	9615	CA	SER	G	127	-33.001	-58.884	6.925	1.00	102.45	MOL3	C
ATOM	9616	CB	SER	G	127	-31.882	-58.136	6.206	1.00	101.05	MOL3	C
ATOM	9617	OG	SER	G	127	-32.089	-58.172	4.807	1.00	101.36	MOL3	O
ATOM	9618	C	SER	G	127	-32.701	-60.385	6.991	1.00	105.77	MOL3	C
ATOM	9619	O	SER	G	127	-32.175	-60.974	6.044	1.00	106.86	MOL3	O
ATOM	9620	N	GLY	G	128	-33.046	-60.994	8.126	1.00	107.93	MOL3	N
ATOM	9621	CA	GLY	G	128	-32.845	-62.422	8.321	1.00	105.90	MOL3	C
ATOM	9622	C	GLY	G	128	-31.399	-62.877	8.319	1.00	104.35	MOL3	C
ATOM	9623	O	GLY	G	128	-31.117	-64.069	8.144	1.00	106.10	MOL3	O
ATOM	9624	N	GLY	G	129	-30.482	-61.933	8.515	1.00	98.25	MOL3	N
ATOM	9625	CA	GLY	G	129	-29.072	-62.272	8.531	1.00	92.35	MOL3	C
ATOM	9626	C	GLY	G	129	-28.356	-61.561	9.655	1.00	88.02	MOL3	C
ATOM	9627	O	GLY	G	129	-28.850	-60.549	10.158	1.00	84.86	MOL3	O
ATOM	9628	N	ALA	G	130	-27.201	-62.092	10.051	1.00	83.24	MOL3	N
ATOM	9629	CA	ALA	G	130	-26.406	-61.500	11.124	1.00	78.99	MOL3	C
ATOM	9630	CB	ALA	G	130	-26.986	-61.877	12.471	1.00	81.34	MOL3	C
ATOM	9631	C	ALA	G	130	-24.957	-61.949	11.037	1.00	75.59	MOL3	C
ATOM	9632	O	ALA	G	130	-24.675	-63.136	10.889	1.00	77.64	MOL3	O
ATOM	9633	N	SER	G	131	-24.043	-60.988	11.134	1.00	72.17	MOL3	N
ATOM	9634	CA	SER	G	131	-22.609	-61.264	11.054	1.00	70.55	MOL3	C
ATOM	9635	CB	SER	G	131	-22.006	-60.599	9.805	1.00	72.57	MOL3	C
ATOM	9636	OG	SER	G	131	-22.620	-61.021	8.601	1.00	74.24	MOL3	O
ATOM	9637	C	SER	G	131	-21.864	-60.719	12.266	1.00	67.32	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9638	O	SER	G	131	-22.089	-59.584	12.682	1.00	68.97	MOL3	O
ATOM	9639	N	VAL	G	132	-20.967	-61.514	12.827	1.00	61.90	MOL3	N
ATOM	9640	CA	VAL	G	132	-20.195	-61.036	13.952	1.00	64.01	MOL3	C
ATOM	9641	CB	VAL	G	132	-20.099	-62.062	15.040	1.00	70.94	MOL3	C
ATOM	9642	CG1	VAL	G	132	-19.661	-61.380	16.337	1.00	74.41	MOL3	C
ATOM	9643	CG2	VAL	G	132	-21.425	-62.771	15.180	1.00	77.72	MOL3	C
ATOM	9644	C	VAL	G	132	-18.803	-60.775	13.435	1.00	63.54	MOL3	C
ATOM	9645	O	VAL	G	132	-18.135	-61.678	12.939	1.00	64.96	MOL3	O
ATOM	9646	N	VAL	G	133	-18.364	-59.533	13.557	1.00	62.84	MOL3	N
ATOM	9647	CA	VAL	G	133	-17.059	-59.143	13.068	1.00	61.23	MOL3	C
ATOM	9648	CB	VAL	G	133	-17.155	-57.818	12.311	1.00	62.34	MOL3	C
ATOM	9649	CG1	VAL	G	133	-15.788	-57.429	11.772	1.00	62.81	MOL3	C
ATOM	9650	CG2	VAL	G	133	-18.183	-57.937	11.193	1.00	60.96	MOL3	C
ATOM	9651	C	VAL	G	133	-16.029	-58.990	14.168	1.00	61.49	MOL3	C
ATOM	9652	O	VAL	G	133	-16.300	-58.410	15.218	1.00	61.66	MOL3	O
ATOM	9653	N	CYS	G	134	-14.836	-59.503	13.905	1.00	61.34	MOL3	N
ATOM	9654	CA	CYS	G	134	-13.753	-59.426	14.857	1.00	63.20	MOL3	C
ATOM	9655	C	CYS	G	134	-12.486	-58.942	14.146	1.00	61.23	MOL3	C
ATOM	9656	O	CYS	G	134	-12.020	-59.574	13.194	1.00	55.75	MOL3	O
ATOM	9657	CB	CYS	G	134	-13.536	-60.800	15.477	1.00	66.10	MOL3	C
ATOM	9658	SG	CYS	G	134	-12.545	-60.717	16.988	1.00	79.72	MOL3	S
ATOM	9659	N	PHE	G	135	-11.949	-57.811	14.606	1.00	60.15	MOL3	N
ATOM	9660	CA	PHE	G	135	-10.740	-57.226	14.030	1.00	58.08	MOL3	C
ATOM	9661	CB	PHE	G	135	-10.891	-55.709	13.881	1.00	52.88	MOL3	C
ATOM	9662	CG	PHE	G	135	-11.871	-55.295	12.824	1.00	59.57	MOL3	C
ATOM	9663	CD1	PHE	G	135	-12.689	-54.190	13.014	1.00	59.21	MOL3	C
ATOM	9664	CD2	PHE	G	135	-11.975	-56.001	11.635	1.00	60.35	MOL3	C
ATOM	9665	CE1	PHE	G	135	-13.596	-53.796	12.036	1.00	57.13	MOL3	C
ATOM	9666	CE2	PHE	G	135	-12.880	-55.610	10.653	1.00	58.75	MOL3	C
ATOM	9667	CZ	PHE	G	135	-13.689	-54.507	10.857	1.00	56.82	MOL3	C
ATOM	9668	C	PHE	G	135	-9.526	-57.504	14.902	1.00	59.96	MOL3	C
ATOM	9669	O	PHE	G	135	-9.570	-57.320	16.122	1.00	62.07	MOL3	O
ATOM	9670	N	LEU	G	136	-8.451	-57.968	14.273	1.00	58.93	MOL3	N
ATOM	9671	CA	LEU	G	136	-7.194	-58.232	14.973	1.00	58.93	MOL3	C
ATOM	9672	CB	LEU	G	136	-6.729	-59.685	14.772	1.00	57.75	MOL3	C
ATOM	9673	CG	LEU	G	136	-7.605	-60.857	15.231	1.00	54.84	MOL3	C
ATOM	9674	CD1	LEU	G	136	-8.895	-60.870	14.426	1.00	58.56	MOL3	C
ATOM	9675	CD2	LEU	G	136	-6.863	-62.172	15.036	1.00	49.67	MOL3	C
ATOM	9676	C	LEU	G	136	-6.231	-57.277	14.274	1.00	59.50	MOL3	C
ATOM	9677	O	LEU	G	136	-5.652	-57.607	13.240	1.00	62.27	MOL3	O
ATOM	9678	N	ASN	G	137	-6.059	-56.089	14.835	1.00	56.71	MOL3	N
ATOM	9679	CA	ASN	G	137	-5.215	-55.095	14.200	1.00	55.72	MOL3	C
ATOM	9680	CB	ASN	G	137	-5.887	-53.716	14.259	1.00	59.86	MOL3	C
ATOM	9681	CG	ASN	G	137	-7.166	-53.642	13.447	1.00	61.03	MOL3	C
ATOM	9682	OD1	ASN	G	137	-7.364	-54.407	12.506	1.00	64.04	MOL3	O
ATOM	9683	ND2	ASN	G	137	-8.033	-52.698	13.797	1.00	62.22	MOL3	N
ATOM	9684	C	ASN	G	137	-3.795	-54.929	14.690	1.00	57.23	MOL3	C
ATOM	9685	O	ASN	G	137	-3.467	-55.182	15.845	1.00	59.63	MOL3	O
ATOM	9686	N	ASN	G	138	-2.966	-54.463	13.767	1.00	62.41	MOL3	N
ATOM	9687	CA	ASN	G	138	-1.561	-54.162	13.996	1.00	64.31	MOL3	C
ATOM	9688	CB	ASN	G	138	-1.441	-52.794	14.650	1.00	68.13	MOL3	C
ATOM	9689	CG	ASN	G	138	-2.342	-51.783	14.014	1.00	72.04	MOL3	C
ATOM	9690	OD1	ASN	G	138	-2.252	-51.524	12.811	1.00	72.39	MOL3	O
ATOM	9691	ND2	ASN	G	138	-3.236	-51.207	14.813	1.00	80.31	MOL3	N
ATOM	9692	C	ASN	G	138	-0.773	-55.158	14.813	1.00	59.99	MOL3	C
ATOM	9693	O	ASN	G	138	-0.503	-54.926	15.988	1.00	64.26	MOL3	O
ATOM	9694	N	PHE	G	139	-0.383	-56.258	14.192	1.00	53.94	MOL3	N
ATOM	9695	CA	PHE	G	139	0.403	-57.244	14.909	1.00	59.73	MOL3	C
ATOM	9696	CB	PHE	G	139	-0.486	-58.416	15.366	1.00	60.06	MOL3	C
ATOM	9697	CG	PHE	G	139	-1.159	-59.163	14.248	1.00	54.71	MOL3	C
ATOM	9698	CD1	PHE	G	139	-0.525	-60.218	13.623	1.00	50.69	MOL3	C
ATOM	9699	CD2	PHE	G	139	-2.436	-58.814	13.835	1.00	57.51	MOL3	C
ATOM	9700	CE1	PHE	G	139	-1.155	-60.914	12.607	1.00	55.12	MOL3	C
ATOM	9701	CE2	PHE	G	139	-3.070	-59.507	12.819	1.00	56.29	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9702	CZ	PHE	G	139	-2.428	-60.557	12.206	1.00	52.91	MOL3	C
ATOM	9703	C	PHE	G	139	1.582	-57.733	14.076	1.00	60.66	MOL3	C
ATOM	9704	O	PHE	G	139	1.694	-57.394	12.900	1.00	68.95	MOL3	O
ATOM	9705	N	TYR	G	140	2.473	-58.502	14.697	1.00	56.57	MOL3	N
ATOM	9706	CA	TYR	G	140	3.643	-59.036	14.017	1.00	51.98	MOL3	C
ATOM	9707	CB	TYR	G	140	4.698	-57.956	13.795	1.00	59.30	MOL3	C
ATOM	9708	CG	TYR	G	140	5.811	-58.435	12.897	1.00	62.50	MOL3	C
ATOM	9709	CD1	TYR	G	140	5.587	-58.621	11.547	1.00	66.09	MOL3	C
ATOM	9710	CE1	TYR	G	140	6.548	-59.154	10.722	1.00	67.77	MOL3	C
ATOM	9711	CD2	TYR	G	140	7.049	-58.789	13.404	1.00	65.14	MOL3	C
ATOM	9712	CE2	TYR	G	140	8.026	-59.325	12.575	1.00	69.26	MOL3	C
ATOM	9713	CZ	TYR	G	140	7.758	-59.506	11.235	1.00	65.47	MOL3	C
ATOM	9714	OH	TYR	G	140	8.673	-60.074	10.392	1.00	65.00	MOL3	O
ATOM	9715	C	TYR	G	140	4.264	-60.132	14.855	1.00	53.24	MOL3	C
ATOM	9716	O	TYR	G	140	4.395	-59.993	16.074	1.00	56.49	MOL3	O
ATOM	9717	N	PRO	G	141	4.680	-61.230	14.216	1.00	51.56	MOL3	N
ATOM	9718	CD	PRO	G	141	5.455	-62.287	14.880	1.00	50.59	MOL3	C
ATOM	9719	CA	PRO	G	141	4.595	-61.482	12.777	1.00	57.08	MOL3	C
ATOM	9720	CB	PRO	G	141	5.491	-62.701	12.585	1.00	59.79	MOL3	C
ATOM	9721	CG	PRO	G	141	5.371	-63.406	13.887	1.00	57.48	MOL3	C
ATOM	9722	C	PRO	G	141	3.178	-61.709	12.277	1.00	60.51	MOL3	C
ATOM	9723	O	PRO	G	141	2.216	-61.594	13.041	1.00	55.20	MOL3	O
ATOM	9724	N	LYS	G	142	3.071	-62.034	10.989	1.00	64.09	MOL3	N
ATOM	9725	CA	LYS	G	142	1.786	-62.239	10.325	1.00	68.66	MOL3	C
ATOM	9726	CB	LYS	G	142	1.971	-62.222	8.803	1.00	71.39	MOL3	C
ATOM	9727	CG	LYS	G	142	3.050	-63.186	8.328	1.00	77.11	MOL3	C
ATOM	9728	CD	LYS	G	142	3.074	-63.350	6.822	1.00	74.18	MOL3	C
ATOM	9729	CE	LYS	G	142	4.323	-64.109	6.405	1.00	78.10	MOL3	C
ATOM	9730	NZ	LYS	G	142	4.537	-65.339	7.227	1.00	78.29	MOL3	N
ATOM	9731	C	LYS	G	142	1.083	-63.524	10.709	1.00	68.55	MOL3	C
ATOM	9732	O	LYS	G	142	-0.146	-63.600	10.676	1.00	67.33	MOL3	O
ATOM	9733	N	ASP	G	143	1.855	-64.546	11.050	1.00	72.24	MOL3	N
ATOM	9734	CA	ASP	G	143	1.252	-65.825	11.417	1.00	78.88	MOL3	C
ATOM	9735	CB	ASP	G	143	2.325	-66.898	11.693	1.00	95.87	MOL3	C
ATOM	9736	CG	ASP	G	143	3.157	-67.246	10.454	1.00	111.13	MOL3	C
ATOM	9737	OD1	ASP	G	143	2.596	-67.846	9.505	1.00	117.55	MOL3	O
ATOM	9738	OD2	ASP	G	143	4.372	-66.919	10.429	1.00	115.57	MOL3	O
ATOM	9739	C	ASP	G	143	0.413	-65.639	12.664	1.00	72.28	MOL3	C
ATOM	9740	O	ASP	G	143	0.928	-65.311	13.726	1.00	74.20	MOL3	O
ATOM	9741	N	ILE	G	144	-0.891	-65.817	12.532	1.00	68.45	MOL3	N
ATOM	9742	CA	ILE	G	144	-1.772	-65.703	13.685	1.00	66.27	MOL3	C
ATOM	9743	CB	ILE	G	144	-2.317	-64.286	13.903	1.00	65.85	MOL3	C
ATOM	9744	CG2	ILE	G	144	-3.636	-64.111	13.172	1.00	62.97	MOL3	C
ATOM	9745	CG1	ILE	G	144	-2.594	-64.078	15.390	1.00	66.78	MOL3	C
ATOM	9746	CD1	ILE	G	144	-3.305	-62.784	15.706	1.00	70.79	MOL3	C
ATOM	9747	C	ILE	G	144	-2.945	-66.624	13.450	1.00	66.44	MOL3	C
ATOM	9748	O	ILE	G	144	-3.213	-67.026	12.325	1.00	69.05	MOL3	O
ATOM	9749	N	ASN	G	145	-3.654	-66.969	14.509	1.00	70.48	MOL3	N
ATOM	9750	CA	ASN	G	145	-4.778	-67.865	14.340	1.00	75.42	MOL3	C
ATOM	9751	CB	ASN	G	145	-4.360	-69.294	14.683	1.00	84.58	MOL3	C
ATOM	9752	CG	ASN	G	145	-5.480	-70.279	14.481	1.00	95.33	MOL3	C
ATOM	9753	OD1	ASN	G	145	-6.085	-70.332	13.405	1.00	104.55	MOL3	O
ATOM	9754	ND2	ASN	G	145	-5.773	-71.068	15.514	1.00	99.08	MOL3	N
ATOM	9755	C	ASN	G	145	-5.990	-67.456	15.163	1.00	75.42	MOL3	C
ATOM	9756	O	ASN	G	145	-5.891	-67.205	16.368	1.00	77.45	MOL3	O
ATOM	9757	N	VAL	G	146	-7.137	-67.386	14.495	1.00	73.39	MOL3	N
ATOM	9758	CA	VAL	G	146	-8.383	-67.004	15.150	1.00	75.23	MOL3	C
ATOM	9759	CB	VAL	G	146	-9.191	-65.996	14.326	1.00	75.12	MOL3	C
ATOM	9760	CG1	VAL	G	146	-9.664	-66.641	13.031	1.00	79.48	MOL3	C
ATOM	9761	CG2	VAL	G	146	-10.395	-65.538	15.122	1.00	77.82	MOL3	C
ATOM	9762	C	VAL	G	146	-9.294	-68.202	15.365	1.00	80.03	MOL3	C
ATOM	9763	O	VAL	G	146	-9.412	-69.075	14.496	1.00	83.39	MOL3	O
ATOM	9764	N	LYS	G	147	-9.943	-68.232	16.525	1.00	81.58	MOL3	N
ATOM	9765	CA	LYS	G	147	-10.869	-69.307	16.862	1.00	81.06	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9766	CB	LYS	G	147	-10.309	-70.171	18.001	1.00	88.49	MOL3	C
ATOM	9767	CG	LYS	G	147	-11.250	-71.290	18.466	1.00	95.72	MOL3	C
ATOM	9768	CD	LYS	G	147	-10.867	-71.867	19.848	1.00	103.44	MOL3	C
ATOM	9769	CE	LYS	G	147	-9.612	-72.749	19.802	1.00	109.76	MOL3	C
ATOM	9770	NZ	LYS	G	147	-9.194	-73.266	21.148	1.00	107.54	MOL3	N
ATOM	9771	C	LYS	G	147	-12.182	-68.671	17.303	1.00	79.53	MOL3	C
ATOM	9772	O	LYS	G	147	-12.181	-67.742	18.122	1.00	73.12	MOL3	O
ATOM	9773	N	TRP	G	148	-13.292	-69.150	16.739	1.00	79.00	MOL3	N
ATOM	9774	CA	TRP	G	148	-14.620	-68.642	17.104	1.00	79.95	MOL3	C
ATOM	9775	CB	TRP	G	148	-15.516	-68.452	15.884	1.00	83.56	MOL3	C
ATOM	9776	CG	TRP	G	148	-15.232	-67.229	15.076	1.00	90.17	MOL3	C
ATOM	9777	CD2	TRP	G	148	-15.864	-65.950	15.205	1.00	90.02	MOL3	C
ATOM	9778	CE2	TRP	G	148	-15.314	-65.112	14.220	1.00	88.30	MOL3	C
ATOM	9779	CE3	TRP	G	148	-16.839	-65.436	16.057	1.00	91.12	MOL3	C
ATOM	9780	CD1	TRP	G	148	-14.344	-67.113	14.048	1.00	90.30	MOL3	C
ATOM	9781	NE1	TRP	G	148	-14.389	-65.845	13.526	1.00	90.45	MOL3	N
ATOM	9782	CZ2	TRP	G	148	-15.708	-63.790	14.063	1.00	87.46	MOL3	C
ATOM	9783	CZ3	TRP	G	148	-17.226	-64.125	15.898	1.00	91.84	MOL3	C
ATOM	9784	CH2	TRP	G	148	-16.662	-63.317	14.910	1.00	88.91	MOL3	C
ATOM	9785	C	TRP	G	148	-15.322	-69.612	18.045	1.00	82.25	MOL3	C
ATOM	9786	O	TRP	G	148	-15.204	-70.833	17.895	1.00	84.18	MOL3	O
ATOM	9787	N	LYS	G	149	-16.065	-69.069	19.007	1.00	83.17	MOL3	N
ATOM	9788	CA	LYS	G	149	-16.788	-69.896	19.980	1.00	82.26	MOL3	C
ATOM	9789	CB	LYS	G	149	-16.024	-69.975	21.315	1.00	79.77	MOL3	C
ATOM	9790	CG	LYS	G	149	-14.836	-70.934	21.359	1.00	78.20	MOL3	C
ATOM	9791	CD	LYS	G	149	-14.230	-70.986	22.760	1.00	75.18	MOL3	C
ATOM	9792	CE	LYS	G	149	-13.063	-71.955	22.824	1.00	79.05	MOL3	C
ATOM	9793	NZ	LYS	G	149	-12.535	-72.081	24.209	1.00	84.73	MOL3	N
ATOM	9794	C	LYS	G	149	-18.205	-69.405	20.281	1.00	83.68	MOL3	C
ATOM	9795	O	LYS	G	149	-18.392	-68.315	20.830	1.00	80.33	MOL3	O
ATOM	9796	N	ILE	G	150	-19.196	-70.220	19.921	1.00	86.68	MOL3	N
ATOM	9797	CA	ILE	G	150	-20.598	-69.904	20.189	1.00	87.86	MOL3	C
ATOM	9798	CB	ILE	G	150	-21.532	-70.330	19.037	1.00	86.02	MOL3	C
ATOM	9799	CG2	ILE	G	150	-22.933	-69.878	19.337	1.00	87.62	MOL3	C
ATOM	9800	CG1	ILE	G	150	-21.097	-69.705	17.715	1.00	86.63	MOL3	C
ATOM	9801	CD1	ILE	G	150	-22.057	-69.992	16.563	1.00	81.81	MOL3	C
ATOM	9802	C	ILE	G	150	-21.015	-70.694	21.434	1.00	90.38	MOL3	C
ATOM	9803	O	ILE	G	150	-21.044	-71.933	21.424	1.00	90.62	MOL3	O
ATOM	9804	N	ASP	G	151	-21.339	-69.977	22.503	1.00	92.97	MOL3	N
ATOM	9805	CA	ASP	G	151	-21.737	-70.612	23.754	1.00	97.87	MOL3	C
ATOM	9806	CB	ASP	G	151	-23.142	-71.224	23.629	1.00	105.42	MOL3	C
ATOM	9807	CG	ASP	G	151	-24.238	-70.283	24.127	1.00	109.22	MOL3	C
ATOM	9808	OD1	ASP	G	151	-24.107	-69.782	25.267	1.00	112.65	MOL3	O
ATOM	9809	OD2	ASP	G	151	-25.227	-70.050	23.393	1.00	106.71	MOL3	O
ATOM	9810	C	ASP	G	151	-20.741	-71.668	24.234	1.00	97.93	MOL3	C
ATOM	9811	O	ASP	G	151	-21.128	-72.669	24.839	1.00	99.58	MOL3	O
ATOM	9812	N	GLY	G	152	-19.459	-71.442	23.959	1.00	96.41	MOL3	N
ATOM	9813	CA	GLY	G	152	-18.439	-72.374	24.408	1.00	95.92	MOL3	C
ATOM	9814	C	GLY	G	152	-17.883	-73.377	23.412	1.00	96.33	MOL3	C
ATOM	9815	O	GLY	G	152	-16.823	-73.962	23.662	1.00	98.05	MOL3	O
ATOM	9816	N	SER	G	153	-18.577	-73.598	22.297	1.00	95.12	MOL3	N
ATOM	9817	CA	SER	G	153	-18.091	-74.548	21.297	1.00	96.65	MOL3	C
ATOM	9818	CB	SER	G	153	-19.213	-75.502	20.858	1.00	100.75	MOL3	C
ATOM	9819	OG	SER	G	153	-19.102	-76.754	21.525	1.00	103.57	MOL3	O
ATOM	9820	C	SER	G	153	-17.466	-73.878	20.074	1.00	94.68	MOL3	C
ATOM	9821	O	SER	G	153	-17.938	-72.850	19.591	1.00	92.19	MOL3	O
ATOM	9822	N	GLU	G	154	-16.393	-74.481	19.584	1.00	94.33	MOL3	N
ATOM	9823	CA	GLU	G	154	-15.666	-73.973	18.431	1.00	94.79	MOL3	C
ATOM	9824	CB	GLU	G	154	-14.354	-74.758	18.301	1.00	102.83	MOL3	C
ATOM	9825	CG	GLU	G	154	-13.459	-74.392	17.127	1.00	110.04	MOL3	C
ATOM	9826	CD	GLU	G	154	-12.185	-75.219	17.110	1.00	114.65	MOL3	C
ATOM	9827	OE1	GLU	G	154	-12.284	-76.463	17.013	1.00	115.83	MOL3	O
ATOM	9828	OE2	GLU	G	154	-11.087	-74.627	17.199	1.00	118.09	MOL3	O
ATOM	9829	C	GLU	G	154	-16.479	-74.061	17.135	1.00	94.30	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9830	O	GLU	G	154	-17.040	-75.112	16.806	1.00	95.73	MOL3	O
ATOM	9831	N	ARG	G	155	-16.549	-72.947	16.410	1.00	92.64	MOL3	N
ATOM	9832	CA	ARG	G	155	-17.266	-72.905	15.139	1.00	93.70	MOL3	C
ATOM	9833	CB	ARG	G	155	-18.348	-71.823	15.160	1.00	100.45	MOL3	C
ATOM	9834	CG	ARG	G	155	-19.171	-71.729	13.872	1.00	109.67	MOL3	C
ATOM	9835	CD	ARG	G	155	-19.914	-73.029	13.582	1.00	123.25	MOL3	C
ATOM	9836	NE	ARG	G	155	-20.850	-72.903	12.463	1.00	134.78	MOL3	N
ATOM	9837	CZ	ARG	G	155	-21.639	-73.884	12.024	1.00	138.84	MOL3	C
ATOM	9838	NH1	ARG	G	155	-21.613	-75.078	12.608	1.00	138.39	MOL3	N
ATOM	9839	NH2	ARG	G	155	-22.459	-73.672	11.000	1.00	139.22	MOL3	N
ATOM	9840	C	ARG	G	155	-16.260	-72.600	14.041	1.00	91.55	MOL3	C
ATOM	9841	O	ARG	G	155	-15.385	-71.748	14.215	1.00	92.19	MOL3	O
ATOM	9842	N	GLN	G	156	-16.376	-73.288	12.912	1.00	87.81	MOL3	N
ATOM	9843	CA	GLN	G	156	-15.440	-73.056	11.830	1.00	90.55	MOL3	C
ATOM	9844	CB	GLN	G	156	-14.591	-74.308	11.624	1.00	95.83	MOL3	C
ATOM	9845	CG	GLN	G	156	-14.291	-75.037	12.923	1.00	100.09	MOL3	C
ATOM	9846	CD	GLN	G	156	-13.026	-75.863	12.854	1.00	102.50	MOL3	C
ATOM	9847	OE1	GLN	G	156	-12.863	-76.711	11.973	1.00	103.44	MOL3	O
ATOM	9848	NE2	GLN	G	156	-12.119	-75.619	13.791	1.00	102.22	MOL3	N
ATOM	9849	C	GLN	G	156	-16.169	-72.689	10.551	1.00	91.14	MOL3	C
ATOM	9850	O	GLN	G	156	-15.755	-71.786	9.824	1.00	93.38	MOL3	O
ATOM	9851	N	ASN	G	157	-17.264	-73.389	10.290	1.00	92.22	MOL3	N
ATOM	9852	CA	ASN	G	157	-18.072	-73.167	9.098	1.00	93.67	MOL3	C
ATOM	9853	CB	ASN	G	157	-19.184	-74.217	9.050	1.00	103.01	MOL3	C
ATOM	9854	CG	ASN	G	157	-19.000	-75.313	10.104	1.00	113.70	MOL3	C
ATOM	9855	OD1	ASN	G	157	-18.963	-75.041	11.310	1.00	116.52	MOL3	O
ATOM	9856	ND2	ASN	G	157	-18.879	-76.558	9.650	1.00	120.16	MOL3	N
ATOM	9857	C	ASN	G	157	-18.690	-71.775	9.124	1.00	91.09	MOL3	C
ATOM	9858	O	ASN	G	157	-19.125	-71.302	10.172	1.00	90.64	MOL3	O
ATOM	9859	N	GLY	G	158	-18.733	-71.119	7.971	1.00	88.90	MOL3	N
ATOM	9860	CA	GLY	G	158	-19.320	-69.794	7.915	1.00	85.15	MOL3	C
ATOM	9861	C	GLY	G	158	-18.383	-68.697	8.376	1.00	83.29	MOL3	C
ATOM	9862	O	GLY	G	158	-18.819	-67.627	8.795	1.00	84.35	MOL3	O
ATOM	9863	N	VAL	G	159	-17.086	-68.955	8.312	1.00	80.65	MOL3	N
ATOM	9864	CA	VAL	G	159	-16.131	-67.943	8.715	1.00	77.65	MOL3	C
ATOM	9865	CB	VAL	G	159	-15.233	-68.440	9.841	1.00	79.21	MOL3	C
ATOM	9866	CG1	VAL	G	159	-14.099	-67.454	10.057	1.00	82.28	MOL3	C
ATOM	9867	CG2	VAL	G	159	-16.051	-68.590	11.113	1.00	76.09	MOL3	C
ATOM	9868	C	VAL	G	159	-15.270	-67.503	7.542	1.00	76.70	MOL3	C
ATOM	9869	O	VAL	G	159	-14.730	-68.332	6.805	1.00	78.83	MOL3	O
ATOM	9870	N	LEU	G	160	-15.166	-66.191	7.361	1.00	72.58	MOL3	N
ATOM	9871	CA	LEU	G	160	-14.370	-65.636	6.278	1.00	69.53	MOL3	C
ATOM	9872	CB	LEU	G	160	-15.273	-64.953	5.251	1.00	65.42	MOL3	C
ATOM	9873	CG	LEU	G	160	-15.965	-65.936	4.300	1.00	67.82	MOL3	C
ATOM	9874	CD1	LEU	G	160	-16.960	-65.220	3.396	1.00	68.08	MOL3	C
ATOM	9875	CD2	LEU	G	160	-14.904	-66.629	3.458	1.00	73.53	MOL3	C
ATOM	9876	C	LEU	G	160	-13.318	-64.669	6.795	1.00	70.51	MOL3	C
ATOM	9877	O	LEU	G	160	-13.617	-63.708	7.510	1.00	77.01	MOL3	O
ATOM	9878	N	ASN	G	161	-12.073	-64.930	6.430	1.00	66.58	MOL3	N
ATOM	9879	CA	ASN	G	161	-11.001	-64.076	6.881	1.00	67.48	MOL3	C
ATOM	9880	CB	ASN	G	161	-10.018	-64.905	7.679	1.00	70.89	MOL3	C
ATOM	9881	CG	ASN	G	161	-10.684	-65.600	8.832	1.00	75.10	MOL3	C
ATOM	9882	OD1	ASN	G	161	-11.721	-65.146	9.317	1.00	77.22	MOL3	O
ATOM	9883	ND2	ASN	G	161	-10.097	-66.699	9.291	1.00	78.58	MOL3	N
ATOM	9884	C	ASN	G	161	-10.300	-63.327	5.764	1.00	67.68	MOL3	C
ATOM	9885	O	ASN	G	161	-10.274	-63.770	4.618	1.00	68.83	MOL3	O
ATOM	9886	N	SER	G	162	-9.748	-62.173	6.113	1.00	65.86	MOL3	N
ATOM	9887	CA	SER	G	162	-9.045	-61.348	5.156	1.00	65.92	MOL3	C
ATOM	9888	CB	SER	G	162	-9.997	-60.323	4.550	1.00	65.97	MOL3	C
ATOM	9889	OG	SER	G	162	-9.422	-59.716	3.404	1.00	78.43	MOL3	O
ATOM	9890	C	SER	G	162	-7.907	-60.648	5.878	1.00	67.24	MOL3	C
ATOM	9891	O	SER	G	162	-8.121	-60.003	6.909	1.00	70.91	MOL3	O
ATOM	9892	N	TRP	G	163	-6.698	-60.789	5.338	1.00	66.24	MOL3	N
ATOM	9893	CA	TRP	G	163	-5.502	-60.181	5.920	1.00	64.80	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	9894	CB	TRP	G	163	-4.408	-61.248	6.071	1.00	68.16	MOL3	C
ATOM	9895	CG	TRP	G	163	-4.822	-62.514	6.795	1.00	76.12	MOL3	C
ATOM	9896	CD2	TRP	G	163	-5.513	-63.643	6.235	1.00	80.83	MOL3	C
ATOM	9897	CE2	TRP	G	163	-5.652	-64.603	7.264	1.00	83.42	MOL3	C
ATOM	9898	CE3	TRP	G	163	-6.025	-63.937	4.966	1.00	82.68	MOL3	C
ATOM	9899	CD1	TRP	G	163	-4.582	-62.830	8.104	1.00	80.00	MOL3	C
ATOM	9900	NE1	TRP	G	163	-5.076	-64.084	8.394	1.00	80.39	MOL3	N
ATOM	9901	CZ2	TRP	G	163	-6.281	-65.834	7.060	1.00	85.36	MOL3	C
ATOM	9902	CZ3	TRP	G	163	-6.648	-65.160	4.766	1.00	84.45	MOL3	C
ATOM	9903	CH2	TRP	G	163	-6.770	-66.092	5.807	1.00	87.80	MOL3	C
ATOM	9904	C	TRP	G	163	-4.982	-59.033	5.036	1.00	60.39	MOL3	C
ATOM	9905	O	TRP	G	163	-5.153	-59.050	3.818	1.00	60.85	MOL3	O
ATOM	9906	N	THR	G	164	-4.342	-58.045	5.650	1.00	56.00	MOL3	N
ATOM	9907	CA	THR	G	164	-3.800	-56.913	4.909	1.00	56.33	MOL3	C
ATOM	9908	CB	THR	G	164	-4.027	-55.612	5.673	1.00	54.45	MOL3	C
ATOM	9909	OG1	ASP	G	164	-3.045	-55.487	6.712	1.00	41.34	MOL3	O
ATOM	9910	CG2	THR	G	164	-5.413	-55.610	6.283	1.00	48.18	MOL3	C
ATOM	9911	C	THR	G	164	-2.292	-57.082	4.717	1.00	59.82	MOL3	C
ATOM	9912	O	THR	G	164	-1.705	-58.035	5.205	1.00	56.32	MOL3	O
ATOM	9913	N	ASP	G	165	-1.658	-56.166	3.999	1.00	68.37	MOL3	N
ATOM	9914	CA	ASP	G	165	-0.215	-56.272	3.819	1.00	72.80	MOL3	C
ATOM	9915	CB	ASP	G	165	0.195	-55.934	2.387	1.00	88.52	MOL3	C
ATOM	9916	CG	ASP	G	165	0.372	-57.179	1.528	1.00	101.27	MOL3	C
ATOM	9917	OD1	ASP	G	165	1.022	-58.140	2.009	1.00	108.00	MOL3	O
ATOM	9918	OD2	ASP	G	165	-0.128	-57.195	0.378	1.00	107.68	MOL3	O
ATOM	9919	C	ASP	G	165	0.513	-55.375	4.803	1.00	68.97	MOL3	C
ATOM	9920	O	ASP	G	165	-0.095	-54.527	5.447	1.00	69.68	MOL3	O
ATOM	9921	N	GLN	G	166	1.817	-55.566	4.930	1.00	64.10	MOL3	N
ATOM	9922	CA	GLN	G	166	2.572	-54.768	5.880	1.00	66.76	MOL3	C
ATOM	9923	CB	GLN	G	166	4.072	-54.971	5.684	1.00	70.21	MOL3	C
ATOM	9924	CG	GLN	G	166	4.544	-56.407	5.851	1.00	69.53	MOL3	C
ATOM	9925	CD	GLN	G	166	5.937	-56.477	6.448	1.00	69.81	MOL3	C
ATOM	9926	OE1	GLN	G	166	6.139	-56.096	7.598	1.00	68.78	MOL3	O
ATOM	9927	NE2	GLN	G	166	6.903	-56.949	5.669	1.00	66.64	MOL3	N
ATOM	9928	C	GLN	G	166	2.234	-53.286	5.792	1.00	68.28	MOL3	C
ATOM	9929	O	GLN	G	166	2.546	-52.622	4.806	1.00	76.25	MOL3	O
ATOM	9930	N	ASP	G	167	1.588	-52.780	6.837	1.00	67.95	MOL3	N
ATOM	9931	CA	ASP	G	167	1.176	-51.380	6.925	1.00	72.67	MOL3	C
ATOM	9932	CB	ASP	G	167	0.516	-51.125	8.284	1.00	75.03	MOL3	C
ATOM	9933	CG	ASP	G	167	0.059	-49.683	8.463	1.00	79.58	MOL3	C
ATOM	9934	OD1	ASP	G	167	-0.983	-49.295	7.876	1.00	80.64	MOL3	O
ATOM	9935	OD2	ASP	G	167	0.747	-48.939	9.198	1.00	79.05	MOL3	O
ATOM	9936	C	ASP	G	167	2.353	-50.438	6.779	1.00	74.31	MOL3	C
ATOM	9937	O	ASP	G	167	3.114	-50.286	7.716	1.00	76.93	MOL3	O
ATOM	9938	N	SER	G	168	2.481	-49.800	5.616	1.00	79.70	MOL3	N
ATOM	9939	CA	SER	G	168	3.563	-48.851	5.322	1.00	82.79	MOL3	C
ATOM	9940	CB	SER	G	168	3.085	-47.838	4.290	1.00	86.90	MOL3	C
ATOM	9941	OG	SER	G	168	2.048	-47.042	4.840	1.00	93.16	MOL3	O
ATOM	9942	C	SER	G	168	4.104	-48.080	6.530	1.00	83.03	MOL3	C
ATOM	9943	O	SER	G	168	5.310	-47.868	6.651	1.00	86.44	MOL3	O
ATOM	9944	N	LYS	G	169	3.209	-47.646	7.409	1.00	81.18	MOL3	N
ATOM	9945	CA	LYS	G	169	3.594	-46.903	8.606	1.00	86.39	MOL3	C
ATOM	9946	CB	LYS	G	169	2.340	-46.462	9.375	1.00	92.95	MOL3	C
ATOM	9947	CG	LYS	G	169	1.747	-45.123	8.946	1.00	106.84	MOL3	C
ATOM	9948	CD	LYS	G	169	2.542	-43.944	9.520	1.00	112.36	MOL3	C
ATOM	9949	CE	LYS	G	169	2.008	-42.599	9.026	1.00	113.28	MOL3	C
ATOM	9950	NZ	LYS	G	169	2.110	-42.459	7.540	1.00	112.32	MOL3	N
ATOM	9951	C	LYS	G	169	4.492	-47.692	9.565	1.00	86.36	MOL3	C
ATOM	9952	O	LYS	G	169	5.699	-47.446	9.655	1.00	88.48	MOL3	O
ATOM	9953	N	ASP	G	170	3.888	-48.642	10.281	1.00	82.00	MOL3	N
ATOM	9954	CA	ASP	G	170	4.612	-49.451	11.264	1.00	70.61	MOL3	C
ATOM	9955	CB	ASP	G	170	3.832	-49.494	12.566	1.00	71.34	MOL3	C
ATOM	9956	CG	ASP	G	170	2.594	-50.323	12.450	1.00	74.59	MOL3	C
ATOM	9957	OD1	ASP	G	170	1.832	-50.374	13.439	1.00	79.81	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	9958	OD2	ASP	G	170	2.393	-50.924	11.365	1.00	65.94	MOL3	O
ATOM	9959	C	ASP	G	170	4.950	-50.886	10.860	1.00	62.81	MOL3	C
ATOM	9960	O	ASP	G	170	5.218	-51.724	11.707	1.00	56.54	MOL3	O
ATOM	9961	N	SER	G	171	4.929	-51.174	9.571	1.00	62.07	MOL3	N
ATOM	9962	CA	SER	G	171	5.273	-52.508	9.086	1.00	58.38	MOL3	C
ATOM	9963	CB	SER	G	171	6.782	-52.725	9.214	1.00	50.52	MOL3	C
ATOM	9964	OG	SER	G	171	7.489	-51.576	8.807	1.00	49.85	MOL3	O
ATOM	9965	C	SER	G	171	4.561	-53.681	9.774	1.00	57.67	MOL3	C
ATOM	9966	O	SER	G	171	5.067	-54.800	9.736	1.00	58.28	MOL3	O
ATOM	9967	N	THR	G	172	3.406	-53.446	10.397	1.00	54.13	MOL3	N
ATOM	9968	CA	THR	G	172	2.664	-54.527	11.063	1.00	53.93	MOL3	C
ATOM	9969	CB	THR	G	172	1.859	-54.026	12.256	1.00	58.95	MOL3	C
ATOM	9970	OG1	THR	G	172	0.843	-53.126	11.793	1.00	57.39	MOL3	O
ATOM	9971	CG2	THR	G	172	2.758	-53.332	13.257	1.00	69.20	MOL3	C
ATOM	9972	C	THR	G	172	1.639	-55.170	10.144	1.00	53.31	MOL3	C
ATOM	9973	O	THR	G	172	1.560	-54.837	8.973	1.00	66.87	MOL3	O
ATOM	9974	N	TYR	G	173	0.836	-56.080	10.685	1.00	48.31	MOL3	N
ATOM	9975	CA	TYR	G	173	-0.211	-56.742	9.911	1.00	47.98	MOL3	C
ATOM	9976	CB	TYR	G	173	0.036	-58.239	9.835	1.00	43.77	MOL3	C
ATOM	9977	CG	TYR	G	173	1.259	-58.612	9.060	1.00	44.45	MOL3	C
ATOM	9978	CD1	TYR	G	173	2.425	-58.940	9.697	1.00	48.66	MOL3	C
ATOM	9979	CE1	TYR	G	173	3.559	-59.283	8.982	1.00	61.26	MOL3	C
ATOM	9980	CD2	TYR	G	173	1.246	-58.630	7.681	1.00	52.61	MOL3	C
ATOM	9981	CE2	TYR	G	173	2.374	-58.967	6.948	1.00	59.87	MOL3	C
ATOM	9982	CZ	TYR	G	173	3.533	-59.295	7.605	1.00	62.30	MOL3	C
ATOM	9983	OH	TYR	G	173	4.672	-59.634	6.897	1.00	63.25	MOL3	O
ATOM	9984	C	TYR	G	173	-1.567	-56.517	10.557	1.00	50.67	MOL3	C
ATOM	9985	O	TYR	G	173	-1.649	-55.969	11.650	1.00	58.20	MOL3	O
ATOM	9986	N	SER	G	174	-2.628	-56.948	9.883	1.00	48.70	MOL3	N
ATOM	9987	CA	SER	G	174	-3.988	-56.805	10.400	1.00	50.67	MOL3	C
ATOM	9988	CB	SER	G	174	-4.544	-55.400	10.147	1.00	50.56	MOL3	C
ATOM	9989	OG	SER	G	174	-4.494	-54.599	11.311	1.00	52.36	MOL3	O
ATOM	9990	C	SER	G	174	-4.886	-57.806	9.710	1.00	51.11	MOL3	C
ATOM	9991	O	SER	G	174	-4.674	-58.138	8.550	1.00	52.00	MOL3	O
ATOM	9992	N	MET	G	175	-5.898	-58.280	10.423	1.00	53.77	MOL3	N
ATOM	9993	CA	MET	G	175	-5.830	-59.247	9.864	1.00	51.80	MOL3	C
ATOM	9994	CB	MET	G	175	-5.387	-60.659	10.206	1.00	55.64	MOL3	C
ATOM	9995	CG	MET	G	175	-7.512	-61.550	10.678	1.00	61.16	MOL3	C
ATOM	9996	SD	MET	G	175	-6.922	-63.203	11.089	1.00	65.42	MOL3	S
ATOM	9997	CE	MET	G	175	-8.312	-64.181	10.519	1.00	62.23	MOL3	C
ATOM	9998	C	MET	G	175	-8.251	-59.038	10.348	1.00	53.07	MOL3	C
ATOM	9999	O	MET	G	175	-8.491	-58.573	11.470	1.00	51.37	MOL3	O
ATOM	10000	N	SER	G	176	-9.193	-59.406	9.492	1.00	52.08	MOL3	N
ATOM	10001	CA	SER	G	176	-10.600	-59.251	9.805	1.00	56.47	MOL3	C
ATOM	10002	CB	SER	G	176	-11.217	-58.188	8.907	1.00	52.46	MOL3	C
ATOM	10003	OG	SER	G	176	-12.607	-58.410	8.761	1.00	55.22	MOL3	O
ATOM	10004	C	SER	G	176	-11.398	-60.530	9.647	1.00	62.89	MOL3	C
ATOM	10005	O	SER	G	176	-11.744	-60.919	8.525	1.00	63.70	MOL3	O
ATOM	10006	N	SER	G	177	-11.711	-61.173	10.771	1.00	67.40	MOL3	N
ATOM	10007	CA	SER	G	177	-12.504	-62.403	10.746	1.00	65.51	MOL3	C
ATOM	10008	CB	SER	G	177	-12.038	-63.372	11.830	1.00	67.97	MOL3	C
ATOM	10009	OG	SER	G	177	-12.620	-64.648	11.628	1.00	69.26	MOL3	O
ATOM	10010	C	SER	G	177	-13.980	-62.078	10.953	1.00	62.13	MOL3	C
ATOM	10011	O	SER	G	177	-14.354	-61.357	11.877	1.00	57.16	MOL3	O
ATOM	10012	N	THR	G	178	-14.814	-62.633	10.088	1.00	64.74	MOL3	N
ATOM	10013	CA	THR	G	178	-16.249	-62.391	10.129	1.00	71.96	MOL3	C
ATOM	10014	CB	THR	G	178	-16.683	-61.613	8.857	1.00	75.70	MOL3	C
ATOM	10015	OG1	THR	G	178	-16.030	-60.336	8.829	1.00	76.12	MOL3	O
ATOM	10016	CG2	THR	G	178	-18.195	-61.443	8.811	1.00	73.86	MOL3	C
ATOM	10017	C	THR	G	178	-17.072	-63.683	10.213	1.00	72.48	MOL3	C
ATOM	10018	O	THR	G	178	-17.084	-64.490	9.281	1.00	73.46	MOL3	O
ATOM	10019	N	LEU	G	179	-17.765	-63.877	11.327	1.00	72.44	MOL3	N
ATOM	10020	CA	LEU	G	179	-18.606	-65.056	11.494	1.00	73.90	MOL3	C
ATOM	10021	CB	LEU	G	179	-18.697	-65.433	12.974	1.00	68.50	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10022	CG	LEU	G	179	-19.314	-66.790	13.310	1.00	58.82	MOL3	C
ATOM	10023	CD1	LEU	G	179	-19.602	-66.819	14.790	1.00	47.08	MOL3	C
ATOM	10024	CD2	LEU	G	179	-20.581	-67.025	12.506	1.00	45.68	MOL3	C
ATOM	10025	C	LEU	G	179	-20.002	-64.718	10.968	1.00	76.98	MOL3	C
ATOM	10026	O	LEU	G	179	-20.728	-63.922	11.567	1.00	76.00	MOL3	O
ATOM	10027	N	THR	G	180	-20.380	-65.319	9.849	1.00	80.86	MOL3	N
ATOM	10028	CA	THR	G	180	-21.694	-65.052	9.286	1.00	86.01	MOL3	C
ATOM	10029	CB	THR	G	180	-21.614	-64.782	7.772	1.00	90.77	MOL3	C
ATOM	10030	OG1	THR	G	180	-20.824	-63.605	7.537	1.00	95.99	MOL3	O
ATOM	10031	CG2	THR	G	180	-23.006	-64.576	7.199	1.00	89.94	MOL3	C
ATOM	10032	C	THR	G	180	-22.652	-66.205	9.554	1.00	88.98	MOL3	C
ATOM	10033	O	THR	G	180	-22.431	-67.346	9.140	1.00	90.30	MOL3	O
ATOM	10034	N	LEU	G	181	-23.722	-65.874	10.266	1.00	93.59	MOL3	N
ATOM	10035	CA	LEU	G	181	-24.768	-66.813	10.663	1.00	96.51	MOL3	C
ATOM	10036	CB	LEU	G	181	-24.936	-66.802	12.181	1.00	91.11	MOL3	C
ATOM	10037	CG	LEU	G	181	-23.812	-67.221	13.108	1.00	90.42	MOL3	C
ATOM	10038	CD1	LEU	G	181	-24.134	-66.766	14.525	1.00	86.50	MOL3	C
ATOM	10039	CD2	LEU	G	181	-23.645	-68.735	13.029	1.00	96.53	MOL3	C
ATOM	10040	C	LEU	G	181	-26.103	-66.368	10.095	1.00	100.13	MOL3	C
ATOM	10041	O	LEU	G	181	-26.216	-65.306	9.477	1.00	98.69	MOL3	O
ATOM	10042	N	THR	G	182	-27.125	-67.181	10.340	1.00	105.38	MOL3	N
ATOM	10043	CA	THR	G	182	-28.477	-66.844	9.914	1.00	107.74	MOL3	C
ATOM	10044	CB	THR	G	182	-29.257	-68.074	9.395	1.00	110.79	MOL3	C
ATOM	10045	OG1	THR	G	182	-30.540	-67.644	8.915	1.00	109.92	MOL3	O
ATOM	10046	CG2	THR	G	182	-29.438	-69.123	10.507	1.00	108.26	MOL3	C
ATOM	10047	C	THR	G	182	-29.171	-66.309	11.163	1.00	107.32	MOL3	C
ATOM	10048	O	THR	G	182	-28.976	-66.841	12.259	1.00	109.13	MOL3	O
ATOM	10049	N	LYS	G	183	-29.967	-65.258	11.001	1.00	104.23	MOL3	N
ATOM	10050	CA	LYS	G	183	-30.668	-64.653	12.129	1.00	104.07	MOL3	C
ATOM	10051	CB	LYS	G	183	-31.821	-63.787	11.612	1.00	102.44	MOL3	C
ATOM	10052	CG	LYS	G	183	-32.242	-62.680	12.572	1.00	105.36	MOL3	C
ATOM	10053	CD	LYS	G	183	-33.511	-61.955	12.110	1.00	109.07	MOL3	C
ATOM	10054	CE	LYS	G	183	-34.050	-61.024	13.207	1.00	110.44	MOL3	C
ATOM	10055	NZ	LYS	G	183	-35.418	-60.484	12.935	1.00	107.50	MOL3	N
ATOM	10056	C	LYS	G	183	-31.194	-65.718	13.102	1.00	105.08	MOL3	C
ATOM	10057	O	LYS	G	183	-31.237	-65.505	14.319	1.00	102.43	MOL3	O
ATOM	10058	N	ASP	G	184	-31.580	-66.870	12.559	1.00	105.91	MOL3	N
ATOM	10059	CA	ASP	G	184	-32.094	-67.967	13.373	1.00	107.91	MOL3	C
ATOM	10060	CB	ASP	G	184	-32.557	-69.140	12.498	1.00	117.94	MOL3	C
ATOM	10061	CG	ASP	G	184	-33.616	-68.747	11.486	1.00	126.79	MOL3	C
ATOM	10062	OD1	ASP	G	184	-34.290	-67.708	11.690	1.00	127.71	MOL3	O
ATOM	10063	OD2	ASP	G	184	-33.777	-69.497	10.491	1.00	128.78	MOL3	O
ATOM	10064	C	ASP	G	184	-31.043	-68.494	14.341	1.00	104.94	MOL3	C
ATOM	10065	O	ASP	G	184	-31.191	-68.358	15.558	1.00	104.52	MOL3	O
ATOM	10066	N	GLU	G	185	-29.991	-69.102	13.789	1.00	101.31	MOL3	N
ATOM	10067	CA	GLU	G	185	-28.907	-69.688	14.584	1.00	98.96	MOL3	C
ATOM	10068	CB	GLU	G	185	-27.840	-70.296	13.650	1.00	108.09	MOL3	C
ATOM	10069	CG	GLU	G	185	-26.705	-71.111	14.332	1.00	117.38	MOL3	C
ATOM	10070	CD	GLU	G	185	-27.117	-72.518	14.798	1.00	123.07	MOL3	C
ATOM	10071	OE1	GLU	G	185	-26.212	-73.311	15.148	1.00	124.88	MOL3	O
ATOM	10072	OE2	GLU	G	185	-28.328	-72.835	14.823	1.00	125.11	MOL3	O
ATOM	10073	C	GLU	G	185	-28.282	-68.661	15.536	1.00	93.54	MOL3	C
ATOM	10074	O	GLU	G	185	-27.782	-69.011	16.610	1.00	89.75	MOL3	O
ATOM	10075	N	TYR	G	186	-28.325	-67.394	15.141	1.00	88.78	MOL3	N
ATOM	10076	CA	TYR	G	186	-27.785	-66.304	15.944	1.00	86.97	MOL3	C
ATOM	10077	CB	TYR	G	186	-27.950	-64.989	15.161	1.00	82.46	MOL3	C
ATOM	10078	CG	TYR	G	186	-27.565	-63.729	15.910	1.00	77.50	MOL3	C
ATOM	10079	CD1	TYR	G	186	-28.173	-62.518	15.618	1.00	73.38	MOL3	C
ATOM	10080	CE1	TYR	G	186	-27.861	-61.371	16.324	1.00	70.40	MOL3	C
ATOM	10081	CD2	TYR	G	186	-26.623	-63.754	16.925	1.00	75.60	MOL3	C
ATOM	10082	CE2	TYR	G	186	-26.306	-62.613	17.634	1.00	73.45	MOL3	C
ATOM	10083	CZ	TYR	G	186	-26.930	-61.427	17.334	1.00	73.00	MOL3	C
ATOM	10084	OH	TYR	G	186	-26.645	-60.304	18.078	1.00	75.84	MOL3	O
ATOM	10085	C	TYR	G	186	-28.556	-66.233	17.262	1.00	88.23	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10086	O	TYR	G	186	-27.981	-66.039	18.333	1.00	88.50	MOL3	O
ATOM	10087	N	GLU	G	187	-29.868	-66.402	17.157	1.00	91.02	MOL3	N
ATOM	10088	CA	GLU	G	187	-30.778	-66.351	18.297	1.00	94.93	MOL3	C
ATOM	10089	CB	GLU	G	187	-32.207	-66.253	17.766	1.00	102.44	MOL3	C
ATOM	10090	CG	GLU	G	187	-32.416	-65.167	16.721	1.00	105.29	MOL3	C
ATOM	10091	CD	GLU	G	187	-32.148	-63.778	17.267	1.00	110.80	MOL3	C
ATOM	10092	OE1	GLU	G	187	-32.541	-62.790	16.608	1.00	112.95	MOL3	O
ATOM	10093	OE2	GLU	G	187	-31.541	-63.671	18.355	1.00	110.62	MOL3	O
ATOM	10094	C	GLU	G	187	-30.676	-67.550	19.252	1.00	94.53	MOL3	C
ATOM	10095	O	GLU	G	187	-30.734	-67.401	20.477	1.00	88.00	MOL3	O
ATOM	10096	N	ARG	G	188	-30.537	-68.736	18.668	1.00	96.61	MOL3	N
ATOM	10097	CA	ARG	G	188	-30.443	-69.985	19.415	1.00	101.16	MOL3	C
ATOM	10098	CB	ARG	G	188	-30.269	-71.148	18.419	1.00	104.44	MOL3	C
ATOM	10099	CG	ARG	G	188	-31.359	-71.174	17.348	1.00	110.74	MOL3	C
ATOM	10100	CD	ARG	G	188	-30.994	-72.003	16.116	1.00	120.65	MOL3	C
ATOM	10101	NE	ARG	G	188	-31.985	-71.825	15.047	1.00	132.41	MOL3	N
ATOM	10102	CZ	ARG	G	188	-31.869	-72.307	13.808	1.00	138.16	MOL3	C
ATOM	10103	NH1	ARG	G	188	-30.797	-73.009	13.458	1.00	140.93	MOL3	N
ATOM	10104	NH2	ARG	G	188	-32.829	-72.085	12.913	1.00	137.85	MOL3	N
ATOM	10105	C	ARG	G	188	-29.336	-70.007	20.486	1.00	103.12	MOL3	C
ATOM	10106	O	ARG	G	188	-29.368	-70.847	21.394	1.00	107.79	MOL3	O
ATOM	10107	N	HIS	G	189	-28.369	-69.094	20.403	1.00	99.75	MOL3	N
ATOM	10108	CA	HIS	G	189	-27.293	-69.071	21.393	1.00	98.72	MOL3	C
ATOM	10109	CB	HIS	G	189	-26.008	-69.609	20.773	1.00	106.66	MOL3	C
ATOM	10110	CG	HIS	G	189	-26.170	-70.941	20.109	1.00	115.83	MOL3	C
ATOM	10111	CD2	HIS	G	189	-25.758	-72.179	20.475	1.00	120.97	MOL3	C
ATOM	10112	ND1	HIS	G	189	-26.831	-71.099	18.909	1.00	119.62	MOL3	N
ATOM	10113	CE1	HIS	G	189	-26.818	-72.375	18.564	1.00	122.11	MOL3	C
ATOM	10114	NE2	HIS	G	189	-26.173	-73.051	19.497	1.00	124.75	MOL3	N
ATOM	10115	C	HIS	G	189	-27.065	-67.677	21.966	1.00	97.69	MOL3	C
ATOM	10116	O	HIS	G	189	-27.562	-66.694	21.418	1.00	96.04	MOL3	O
ATOM	10117	N	ASN	G	190	-26.317	-67.581	23.064	1.00	97.69	MOL3	N
ATOM	10118	CA	ASN	G	190	-26.090	-66.271	23.673	1.00	101.88	MOL3	C
ATOM	10119	CB	ASN	G	190	-26.754	-66.199	25.066	1.00	111.52	MOL3	C
ATOM	10120	CG	ASN	G	190	-26.257	-67.279	26.033	1.00	118.94	MOL3	C
ATOM	10121	OD1	ASN	G	190	-25.113	-67.242	26.503	1.00	121.56	MOL3	O
ATOM	10122	ND2	ASN	G	190	-27.129	-68.240	26.342	1.00	118.18	MOL3	N
ATOM	10123	C	ASN	G	190	-24.658	-65.739	23.755	1.00	101.17	MOL3	C
ATOM	10124	O	ASN	G	190	-24.443	-64.544	23.542	1.00	98.80	MOL3	O
ATOM	10125	N	SER	G	191	-23.682	-66.600	24.051	1.00	101.74	MOL3	N
ATOM	10126	CA	SER	G	191	-22.289	-66.148	24.155	1.00	99.25	MOL3	C
ATOM	10127	CB	SER	G	191	-21.549	-66.894	25.280	1.00	103.81	MOL3	C
ATOM	10128	OG	SER	G	191	-21.036	-68.143	24.845	1.00	107.17	MOL3	O
ATOM	10129	C	SER	G	191	-21.504	-66.288	22.849	1.00	95.81	MOL3	C
ATOM	10130	O	SER	G	191	-21.521	-67.340	22.197	1.00	92.47	MOL3	O
ATOM	10131	N	TYR	G	192	-20.810	-65.207	22.495	1.00	93.09	MOL3	N
ATOM	10132	CA	TYR	G	192	-20.004	-65.120	21.277	1.00	87.50	MOL3	C
ATOM	10133	CB	TYR	G	192	-20.645	-64.109	20.328	1.00	85.26	MOL3	C
ATOM	10134	CG	TYR	G	192	-21.857	-64.646	19.624	1.00	84.55	MOL3	C
ATOM	10135	CD1	TYR	G	192	-23.026	-63.913	19.552	1.00	83.90	MOL3	C
ATOM	10136	CE1	TYR	G	192	-24.122	-64.393	18.861	1.00	83.21	MOL3	C
ATOM	10137	CD2	TYR	G	192	-21.816	-65.877	18.991	1.00	86.20	MOL3	C
ATOM	10138	CE2	TYR	G	192	-22.903	-66.362	18.297	1.00	85.84	MOL3	C
ATOM	10139	CZ	TYR	G	192	-24.055	-65.618	18.229	1.00	84.00	MOL3	C
ATOM	10140	OH	TYR	G	192	-25.121	-66.094	17.493	1.00	77.64	MOL3	O
ATOM	10141	C	TYR	G	192	-18.575	-64.676	21.568	1.00	82.36	MOL3	C
ATOM	10142	O	TYR	G	192	-18.354	-63.550	22.011	1.00	74.42	MOL3	O
ATOM	10143	N	THR	G	193	-17.604	-65.547	21.319	1.00	81.47	MOL3	N
ATOM	10144	CA	THR	G	193	-16.225	-65.165	21.564	1.00	82.88	MOL3	C
ATOM	10145	CB	THR	G	193	-15.598	-65.942	22.746	1.00	84.76	MOL3	C
ATOM	10146	OG1	THR	G	193	-15.403	-67.308	22.367	1.00	92.41	MOL3	O
ATOM	10147	CG2	THR	G	193	-16.501	-65.899	23.964	1.00	86.43	MOL3	C
ATOM	10148	C	THR	G	193	-15.337	-65.351	20.335	1.00	83.61	MOL3	C
ATOM	10149	O	THR	G	193	-15.567	-66.204	19.463	1.00	76.78	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	10150	N	CYS	G	194	-14.309	-64.518	20.298	1.00	86.39	MOL3	N
ATOM	10151	CA	CYS	G	194	-13.326	-64.489	19.236	1.00	84.64	MOL3	C
ATOM	10152	C	CYS	G	194	-11.977	-64.646	19.959	1.00	83.31	MOL3	C
ATOM	10153	O	CYS	G	194	-11.527	-63.745	20.670	1.00	79.54	MOL3	O
ATOM	10154	CB	CYS	G	194	-13.474	-63.143	18.519	1.00	82.79	MOL3	C
ATOM	10155	SG	CYS	G	194	-12.135	-62.657	17.402	1.00	90.85	MOL3	S
ATOM	10156	N	GLU	G	195	-11.357	-65.812	19.793	1.00	83.79	MOL3	N
ATOM	10157	CA	GLU	G	195	-10.098	-66.126	20.461	1.00	85.48	MOL3	C
ATOM	10158	CB	GLU	G	195	-10.225	-67.519	21.088	1.00	96.62	MOL3	C
ATOM	10159	CG	GLU	G	195	-9.171	-67.893	22.116	1.00	106.95	MOL3	C
ATOM	10160	CD	GLU	G	195	-9.346	-69.322	22.613	1.00	112.29	MOL3	C
ATOM	10161	OE1	GLU	G	195	-9.191	-70.258	21.796	1.00	111.34	MOL3	O
ATOM	10162	OE2	GLU	G	195	-9.646	-69.508	23.816	1.00	117.09	MOL3	O
ATOM	10163	C	GLU	G	195	-8.906	-66.075	19.503	1.00	82.05	MOL3	C
ATOM	10164	O	GLU	G	195	-8.790	-66.886	18.579	1.00	76.55	MOL3	O
ATOM	10165	N	ALA	G	196	-8.013	-65.124	19.743	1.00	79.13	MOL3	N
ATOM	10166	CA	ALA	G	196	-6.848	-64.961	18.894	1.00	76.76	MOL3	C
ATOM	10167	CB	ALA	G	196	-6.714	-63.504	18.491	1.00	82.89	MOL3	C
ATOM	10168	C	ALA	G	196	-5.567	-65.437	19.558	1.00	74.35	MOL3	C
ATOM	10169	O	ALA	G	196	-5.144	-64.892	20.584	1.00	72.00	MOL3	O
ATOM	10170	N	THR	G	197	-4.948	-66.451	18.965	1.00	70.32	MOL3	N
ATOM	10171	CA	THR	G	197	-3.704	-66.970	19.498	1.00	71.07	MOL3	C
ATOM	10172	CB	THR	G	197	-3.787	-68.487	19.597	1.00	77.77	MOL3	C
ATOM	10173	OG1	THR	G	197	-2.517	-69.003	20.010	1.00	89.33	MOL3	O
ATOM	10174	CG2	THR	G	197	-4.228	-69.084	18.266	1.00	82.46	MOL3	C
ATOM	10175	C	THR	G	197	-2.499	-66.494	18.657	1.00	65.77	MOL3	C
ATOM	10176	O	THR	G	197	-2.459	-66.648	17.432	1.00	61.20	MOL3	O
ATOM	10177	N	HIS	G	198	-1.517	-65.910	19.341	1.00	63.27	MOL3	N
ATOM	10178	CA	HIS	G	198	-0.356	-65.341	18.679	1.00	61.38	MOL3	C
ATOM	10179	CB	HIS	G	198	-0.638	-63.860	18.447	1.00	60.91	MOL3	C
ATOM	10180	CG	HIS	G	198	0.358	-63.187	17.567	1.00	69.52	MOL3	C
ATOM	10181	CD2	HIS	G	198	1.128	-62.092	17.767	1.00	69.32	MOL3	C
ATOM	10182	ND1	HIS	G	198	0.648	-63.636	16.296	1.00	71.63	MOL3	N
ATOM	10183	CE1	HIS	G	198	1.556	-62.846	15.751	1.00	77.19	MOL3	C
ATOM	10184	NE2	HIS	G	198	1.864	-61.901	16.623	1.00	76.10	MOL3	N
ATOM	10185	C	HIS	G	198	0.986	-65.508	19.409	1.00	58.64	MOL3	C
ATOM	10186	O	HIS	G	198	1.064	-65.443	20.627	1.00	55.62	MOL3	O
ATOM	10187	N	LYS	G	199	2.041	-65.712	18.630	1.00	61.35	MOL3	N
ATOM	10188	CA	LYS	G	199	3.400	-65.882	19.136	1.00	60.15	MOL3	C
ATOM	10189	CB	LYS	G	199	4.402	-65.647	17.992	1.00	62.47	MOL3	C
ATOM	10190	CG	LYS	G	199	5.857	-65.529	18.439	1.00	65.67	MOL3	C
ATOM	10191	CD	LYS	G	199	6.779	-65.126	17.299	1.00	64.96	MOL3	C
ATOM	10192	CE	LYS	G	199	6.775	-66.158	16.187	1.00	69.07	MOL3	C
ATOM	10193	NZ	LYS	G	199	7.322	-67.468	16.637	1.00	72.23	MOL3	N
ATOM	10194	C	LYS	G	199	3.757	-64.969	20.312	1.00	59.42	MOL3	C
ATOM	10195	O	LYS	G	199	4.593	-65.326	21.144	1.00	60.57	MOL3	O
ATOM	10196	N	THR	G	200	3.129	-63.798	20.374	1.00	57.91	MOL3	N
ATOM	10197	CA	THR	G	200	3.394	-62.822	21.431	1.00	63.29	MOL3	C
ATOM	10198	CB	THR	G	200	2.626	-61.515	21.200	1.00	67.33	MOL3	C
ATOM	10199	OG1	THR	G	200	1.234	-61.807	20.997	1.00	73.03	MOL3	O
ATOM	10200	CG2	THR	G	200	3.189	-60.775	20.011	1.00	73.14	MOL3	C
ATOM	10201	C	THR	G	200	3.037	-63.276	22.839	1.00	68.06	MOL3	C
ATOM	10202	O	THR	G	200	3.555	-62.727	23.821	1.00	64.89	MOL3	O
ATOM	10203	N	SER	G	201	2.132	-64.250	22.941	1.00	73.50	MOL3	N
ATOM	10204	CA	SER	G	201	1.714	-64.753	24.247	1.00	74.67	MOL3	C
ATOM	10205	CB	SER	G	201	0.534	-63.945	24.789	1.00	82.63	MOL3	C
ATOM	10206	CG	SER	G	201	0.280	-64.276	26.147	1.00	89.89	MOL3	O
ATOM	10207	C	SER	G	201	1.344	-66.227	24.253	1.00	71.10	MOL3	C
ATOM	10208	O	SER	G	201	0.992	-66.807	23.227	1.00	69.80	MOL3	O
ATOM	10209	N	THR	G	202	1.434	-66.811	25.443	1.00	69.54	MOL3	N
ATOM	10210	CA	THR	G	202	1.135	-68.216	25.684	1.00	65.82	MOL3	C
ATOM	10211	CB	THR	G	202	1.889	-68.733	26.934	1.00	64.23	MOL3	C
ATOM	10212	OG1	THR	G	202	1.654	-67.841	28.034	1.00	63.14	MOL3	O
ATOM	10213	CG2	THR	G	202	3.383	-68.831	26.668	1.00	57.12	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10214	C	THR	G	202	-0.352	-68.370	25.950	1.00	65.86	MOL3	C
ATOM	10215	O	THR	G	202	-0.910	-69.460	25.864	1.00	66.45	MOL3	O
ATOM	10216	N	SER	G	203	-0.988	-67.260	26.284	1.00	67.90	MOL3	N
ATOM	10217	CA	SER	G	203	-2.400	-67.276	26.589	1.00	74.26	MOL3	C
ATOM	10218	CB	SER	G	203	-2.615	-66.792	28.022	1.00	86.52	MOL3	C
ATOM	10219	OG	SER	G	203	-1.850	-67.582	28.928	1.00	98.19	MOL3	O
ATOM	10220	C	SER	G	203	-3.117	-66.390	25.602	1.00	73.09	MOL3	C
ATOM	10221	O	SER	G	203	-2.874	-65.180	25.550	1.00	75.09	MOL3	O
ATOM	10222	N	PRO	G	204	-4.018	-66.989	24.804	1.00	70.86	MOL3	N
ATOM	10223	CD	PRO	G	204	-4.427	-68.387	25.007	1.00	67.00	MOL3	C
ATOM	10224	CA	PRO	G	204	-4.842	-66.366	23.760	1.00	67.61	MOL3	C
ATOM	10225	CB	PRO	G	204	-5.745	-67.511	23.299	1.00	64.27	MOL3	C
ATOM	10226	CG	PRO	G	204	-5.844	-68.363	24.497	1.00	68.63	MOL3	C
ATOM	10227	C	PRO	G	204	-5.634	-65.139	24.186	1.00	65.42	MOL3	C
ATOM	10228	O	PRO	G	204	-6.176	-65.091	25.294	1.00	65.92	MOL3	O
ATOM	10229	N	ILE	G	205	-5.679	-64.142	23.301	1.00	63.63	MOL3	N
ATOM	10230	CA	ILE	G	205	-6.429	-62.921	23.571	1.00	61.97	MOL3	C
ATOM	10231	CB	ILE	G	205	-6.025	-61.735	22.666	1.00	58.63	MOL3	C
ATOM	10232	CG2	ILE	G	205	-6.863	-60.528	23.044	1.00	52.45	MOL3	C
ATOM	10233	CG1	ILE	G	205	-4.531	-61.395	22.814	1.00	61.60	MOL3	C
ATOM	10234	CD1	ILE	G	205	-4.220	-60.163	23.701	1.00	58.09	MOL3	C
ATOM	10235	C	ILE	G	205	-7.862	-63.266	23.235	1.00	64.06	MOL3	C
ATOM	10236	O	ILE	G	205	-8.161	-63.712	22.125	1.00	58.68	MOL3	O
ATOM	10237	N	VAL	G	206	-8.750	-63.058	24.198	1.00	71.48	MOL3	N
ATOM	10238	CA	VAL	G	206	-10.148	-63.387	23.985	1.00	78.37	MOL3	C
ATOM	10239	CB	VAL	G	206	-10.588	-64.517	24.915	1.00	81.01	MOL3	C
ATOM	10240	CG1	VAL	G	206	-12.056	-64.852	24.669	1.00	84.85	MOL3	C
ATOM	10241	CG2	VAL	G	206	-9.697	-65.731	24.690	1.00	86.24	MOL3	C
ATOM	10242	C	VAL	G	206	-11.068	-62.201	24.202	1.00	79.75	MOL3	C
ATOM	10243	O	VAL	G	206	-10.978	-61.504	25.218	1.00	82.00	MOL3	O
ATOM	10244	N	LYS	G	207	-11.944	-61.974	23.229	1.00	80.26	MOL3	N
ATOM	10245	CA	LYS	G	207	-12.915	-60.896	23.298	1.00	84.36	MOL3	C
ATOM	10246	CB	LYS	G	207	-12.578	-59.794	22.295	1.00	86.52	MOL3	C
ATOM	10247	CG	LYS	G	207	-11.353	-58.973	22.673	1.00	98.47	MOL3	C
ATOM	10248	CD	LYS	G	207	-11.526	-58.294	24.037	1.00	111.91	MOL3	C
ATOM	10249	CE	LYS	G	207	-10.304	-57.448	24.421	1.00	116.09	MOL3	C
ATOM	10250	NZ	LYS	G	207	-10.490	-56.698	25.704	1.00	120.25	MOL3	N
ATOM	10251	C	LYS	G	207	-14.268	-61.506	22.972	1.00	88.09	MOL3	C
ATOM	10252	O	LYS	G	207	-14.384	-62.316	22.048	1.00	87.63	MOL3	O
ATOM	10253	N	SER	G	208	-15.287	-61.130	23.739	1.00	91.76	MOL3	N
ATOM	10254	CA	SER	G	208	-16.626	-61.667	23.528	1.00	91.34	MOL3	C
ATOM	10255	CB	SER	G	208	-16.802	-62.950	24.336	1.00	93.27	MOL3	C
ATOM	10256	OG	SER	G	208	-16.601	-62.715	25.722	1.00	92.76	MOL3	O
ATOM	10257	C	SER	G	208	-17.720	-60.687	23.920	1.00	91.18	MOL3	C
ATOM	10258	O	SER	G	208	-17.450	-59.577	24.381	1.00	87.72	MOL3	O
ATOM	10259	N	PHE	G	209	-18.961	-61.119	23.732	1.00	92.63	MOL3	N
ATOM	10260	CA	PHE	G	209	-20.115	-60.304	24.073	1.00	97.21	MOL3	C
ATOM	10261	CB	PHE	G	209	-20.281	-59.167	23.057	1.00	95.06	MOL3	C
ATOM	10262	CG	PHE	G	209	-20.996	-59.572	21.793	1.00	93.57	MOL3	C
ATOM	10263	CD1	PHE	G	209	-22.350	-59.352	21.647	1.00	90.72	MOL3	C
ATOM	10264	CD2	PHE	G	209	-20.315	-60.185	20.758	1.00	95.77	MOL3	C
ATOM	10265	CE1	PHE	G	209	-23.009	-59.734	20.496	1.00	92.12	MOL3	C
ATOM	10266	CE2	PHE	G	209	-20.973	-60.569	19.604	1.00	92.90	MOL3	C
ATOM	10267	CZ	PHE	G	209	-22.321	-60.343	19.475	1.00	91.92	MOL3	C
ATOM	10268	C	PHE	G	209	-21.353	-61.195	24.088	1.00	103.82	MOL3	C
ATOM	10269	O	PHE	G	209	-21.449	-62.160	23.314	1.00	102.26	MOL3	O
ATOM	10270	N	ASN	G	210	-22.290	-60.873	24.978	1.00	110.23	MOL3	N
ATOM	10271	CA	ASN	G	210	-23.531	-61.633	25.117	1.00	117.84	MOL3	C
ATOM	10272	CB	ASN	G	210	-23.762	-61.980	26.594	1.00	123.10	MOL3	C
ATOM	10273	CG	ASN	G	210	-22.563	-62.675	27.228	1.00	129.22	MOL3	C
ATOM	10274	OD1	ASN	G	210	-22.209	-63.796	26.852	1.00	133.16	MOL3	O
ATOM	10275	ND2	ASN	G	210	-21.927	-62.007	28.190	1.00	129.15	MOL3	N
ATOM	10276	C	ASN	G	210	-24.693	-60.789	24.602	1.00	120.46	MOL3	C
ATOM	10277	O	ASN	G	210	-24.560	-59.571	24.462	1.00	119.58	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	10278	N	ARG	G	211	-25.829	-61.423	24.320	1.00124.75	MOL3	N
ATOM	10279	CA	ARG	G	211	-26.979	-60.670	23.839	1.00130.59	MOL3	C
ATOM	10280	CB	ARG	G	211	-27.890	-61.539	22.977	1.00131.16	MOL3	C
ATOM	10281	CG	ARG	G	211	-27.566	-61.483	21.503	1.00130.04	MOL3	C
ATOM	10282	CD	ARG	G	211	-27.004	-62.801	21.041	1.00133.22	MOL3	C
ATOM	10283	NE	ARG	G	211	-27.930	-63.897	21.313	1.00137.59	MOL3	N
ATOM	10284	CZ	ARG	G	211	-29.186	-63.941	20.877	1.00138.83	MOL3	C
ATOM	10285	NH1	ASN	G	211	-29.673	-62.944	20.148	1.00138.40	MOL3	N
ATOM	10286	NH2	ASN	G	211	-29.955	-64.985	21.163	1.00137.56	MOL3	N
ATOM	10287	C	ARG	G	211	-27.795	-60.035	24.958	1.00137.45	MOL3	C
ATOM	10288	O	ARG	G	211	-28.240	-60.705	25.901	1.00135.00	MOL3	O
ATOM	10289	N	ASN	G	212	-27.967	-58.721	24.837	1.00146.87	MOL3	N
ATOM	10290	CA	ASN	G	212	-28.733	-57.921	25.787	1.00155.81	MOL3	C
ATOM	10291	CB	ASN	G	212	-27.832	-56.886	26.487	1.00155.75	MOL3	C
ATOM	10292	CG	ASN	G	212	-26.473	-56.724	25.813	1.00156.88	MOL3	C
ATOM	10293	OD1	ASN	G	212	-26.382	-56.437	24.615	1.00158.35	MOL3	O
ATOM	10294	ND2	ASN	G	212	-25.408	-56.898	26.589	1.00155.49	MOL3	N
ATOM	10295	C	ASN	G	212	-29.864	-57.214	25.031	1.00161.50	MOL3	C
ATOM	10296	O	ASN	G	212	-30.919	-56.922	25.600	1.00162.29	MOL3	O
ATOM	10297	N	GLU	G	213	-29.621	-56.951	23.745	1.00167.90	MOL3	N
ATOM	10298	CA	GLU	G	213	-30.572	-56.302	22.833	1.00173.47	MOL3	C
ATOM	10299	CB	GLU	G	213	-31.773	-57.228	22.588	1.00173.00	MOL3	C
ATOM	10300	CG	GLU	G	213	-32.233	-57.300	21.128	1.00170.59	MOL3	C
ATOM	10301	CD	GLU	G	213	-31.234	-58.015	20.224	1.00169.54	MOL3	C
ATOM	10302	OE1	GLU	G	213	-31.531	-58.181	19.020	1.00167.25	MOL3	O
ATOM	10303	OE2	GLU	G	213	-30.155	-58.412	20.714	1.00169.23	MOL3	O
ATOM	10304	C	GLU	G	213	-31.069	-54.906	23.246	1.00176.92	MOL3	C
ATOM	10305	O	GLU	G	213	-31.944	-54.770	24.108	1.00177.92	MOL3	O
ATOM	10306	N	CYS	G	214	-30.508	-53.875	22.612	1.00179.94	MOL3	N
ATOM	10307	CA	CYS	G	214	-30.882	-52.482	22.879	1.00182.62	MOL3	C
ATOM	10308	CB	CYS	G	214	-30.427	-52.051	24.283	1.00184.29	MOL3	C
ATOM	10309	SG	CYS	G	214	-31.491	-50.813	25.116	1.00183.85	MOL3	S
ATOM	10310	C	CYS	G	214	-30.238	-51.559	21.840	1.00183.45	MOL3	C
ATOM	10311	O	CYS	G	214	-29.526	-52.080	20.951	1.00184.03	MOL3	O
ATOM	10312	OXT	CYS	G	214	-30.454	-50.329	21.926	1.00183.24	MOL3	O
ATOM	10313	CB	GLU	H	1	12.319	-45.817	-24.866	1.00 80.69	MOL3	C
ATOM	10314	CG	GLU	H	1	12.972	-44.504	-24.427	1.00 96.38	MOL3	C
ATOM	10315	CD	GLU	H	1	14.460	-44.643	-24.132	1.00103.23	MOL3	C
ATOM	10316	OE1	GLU	H	1	15.209	-45.116	-25.019	1.00106.26	MOL3	O
ATOM	10317	OE2	GLU	H	1	14.875	-44.275	-23.007	1.00104.29	MOL3	O
ATOM	10318	C	GLU	H	1	10.202	-47.001	-25.487	1.00 70.52	MOL3	C
ATOM	10319	O	GLU	H	1	10.107	-46.972	-26.716	1.00 78.90	MOL3	O
ATOM	10320	N	GLU	H	1	10.426	-45.808	-23.286	1.00 67.19	MOL3	N
ATOM	10321	CA	GLU	H	1	10.796	-45.818	-24.727	1.00 71.31	MOL3	C
ATOM	10322	N	VAL	H	2	9.781	-48.028	-24.758	1.00 63.85	MOL3	N
ATOM	10323	CA	VAL	H	2	9.219	-49.211	-25.381	1.00 56.70	MOL3	C
ATOM	10324	CB	VAL	H	2	10.013	-50.434	-25.007	1.00 49.62	MOL3	C
ATOM	10325	CG1	VAL	H	2	9.649	-51.582	-25.928	1.00 34.77	MOL3	C
ATOM	10326	CG2	VAL	H	2	11.493	-50.104	-25.018	1.00 51.72	MOL3	C
ATOM	10327	C	VAL	H	2	7.806	-49.477	-24.927	1.00 61.99	MOL3	C
ATOM	10328	O	VAL	H	2	7.545	-50.540	-24.386	1.00 73.31	MOL3	O
ATOM	10329	N	GLN	H	3	6.889	-48.543	-25.158	1.00 61.09	MOL3	N
ATOM	10330	CA	GLN	H	3	5.497	-48.718	-24.730	1.00 57.29	MOL3	C
ATOM	10331	CB	GLN	H	3	4.665	-47.496	-25.096	1.00 67.65	MOL3	C
ATOM	10332	CG	GLN	H	3	5.258	-46.184	-24.650	1.00 91.59	MOL3	C
ATOM	10333	CD	GLN	H	3	5.242	-45.147	-25.770	1.00104.67	MOL3	C
ATOM	10334	OE1	GLN	H	3	4.181	-44.834	-26.333	1.00109.12	MOL3	O
ATOM	10335	NE2	GLN	H	3	6.421	-44.612	-26.103	1.00104.81	MOL3	N
ATOM	10336	C	GLN	H	3	4.758	-49.954	-25.240	1.00 47.41	MOL3	C
ATOM	10337	O	GLN	H	3	4.892	-50.377	-26.385	1.00 47.05	MOL3	O
ATOM	10338	N	LEU	H	4	3.950	-50.502	-24.353	1.00 41.92	MOL3	N
ATOM	10339	CA	LEU	H	4	3.135	-51.674	-24.608	1.00 43.25	MOL3	C
ATOM	10340	CB	LEU	H	4	3.844	-52.888	-24.022	1.00 40.95	MOL3	C
ATOM	10341	CG	LEU	H	4	3.979	-54.166	-24.842	1.00 45.87	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10342	CD1	LEU	H	4	4.318	-53.862	-26.299	1.00	43.17	MOL3	C
ATOM	10343	CD2	LEU	H	4	5.065	-55.009	-24.198	1.00	42.82	MOL3	C
ATOM	10344	C	LEU	H	4	1.834	-51.381	-23.847	1.00	44.33	MOL3	C
ATOM	10345	O	LEU	H	4	1.867	-51.103	-22.635	1.00	45.49	MOL3	O
ATOM	10346	N	VAL	H	5	0.700	-51.414	-24.541	1.00	40.36	MOL3	N
ATOM	10347	CA	VAL	H	5	-0.565	-51.117	-23.886	1.00	43.21	MOL3	C
ATOM	10348	CB	VAL	H	5	-1.029	-49.715	-24.222	1.00	35.32	MOL3	C
ATOM	10349	CG1	VAL	H	5	-2.317	-49.418	-23.491	1.00	30.52	MOL3	C
ATOM	10350	CG2	VAL	H	5	0.037	-48.732	-23.841	1.00	28.24	MOL3	C
ATOM	10351	C	VAL	H	5	-1.695	-52.065	-24.235	1.00	49.10	MOL3	C
ATOM	10352	O	VAL	H	5	-2.084	-52.181	-25.396	1.00	51.42	MOL3	O
ATOM	10353	N	GLU	H	6	-2.232	-52.723	-23.212	1.00	53.46	MOL3	N
ATOM	10354	CA	GLU	H	6	-3.316	-53.678	-23.381	1.00	55.93	MOL3	C
ATOM	10355	CB	GLU	H	6	-3.160	-54.803	-22.358	1.00	53.21	MOL3	C
ATOM	10356	CG	GLU	H	6	-2.063	-54.533	-21.321	1.00	56.79	MOL3	C
ATOM	10357	CD	GLU	H	6	-0.982	-55.607	-21.310	1.00	64.46	MOL3	C
ATOM	10358	OE1	GLU	H	6	-0.073	-55.560	-20.452	1.00	62.83	MOL3	O
ATOM	10359	OE2	GLU	H	6	-1.041	-56.508	-22.169	1.00	72.08	MOL3	O
ATOM	10360	C	GLU	H	6	-4.662	-52.995	-23.211	1.00	57.62	MOL3	C
ATOM	10361	O	GLU	H	6	-4.752	-51.909	-22.632	1.00	57.43	MOL3	O
ATOM	10362	N	SER	H	7	-5.707	-53.633	-23.723	1.00	59.33	MOL3	N
ATOM	10363	CA	SER	H	7	-7.051	-53.084	-23.625	1.00	62.56	MOL3	C
ATOM	10364	CB	SER	H	7	-7.209	-51.891	-24.564	1.00	66.75	MOL3	C
ATOM	10365	OG	SER	H	7	-6.737	-52.205	-25.866	1.00	77.01	MOL3	O
ATOM	10366	C	SER	H	7	-8.072	-54.140	-23.967	1.00	62.44	MOL3	C
ATOM	10367	O	SER	H	7	-7.735	-55.183	-24.524	1.00	61.19	MOL3	O
ATOM	10368	N	GLY	H	8	-9.321	-53.865	-23.619	1.00	67.04	MOL3	N
ATOM	10369	CA	GLY	H	8	-10.386	-54.809	-23.895	1.00	76.02	MOL3	C
ATOM	10370	C	GLY	H	8	-10.749	-55.612	-22.665	1.00	81.10	MOL3	C
ATOM	10371	O	GLY	H	8	-11.307	-56.702	-22.754	1.00	79.02	MOL3	O
ATOM	10372	N	GLY	H	9	-10.429	-55.070	-21.499	1.00	88.12	MOL3	N
ATOM	10373	CA	GLY	H	9	-10.737	-55.776	-20.273	1.00	90.21	MOL3	C
ATOM	10374	C	GLY	H	9	-12.179	-55.589	-19.862	1.00	91.24	MOL3	C
ATOM	10375	O	GLY	H	9	-12.856	-54.671	-20.339	1.00	94.44	MOL3	O
ATOM	10376	N	GLY	H	10	-12.647	-56.465	-18.976	1.00	91.00	MOL3	N
ATOM	10377	CA	GLY	H	10	-14.016	-56.389	-18.485	1.00	88.13	MOL3	C
ATOM	10378	C	GLY	H	10	-14.495	-57.727	-17.962	1.00	82.14	MOL3	C
ATOM	10379	O	GLY	H	10	-13.719	-58.681	-17.906	1.00	79.67	MOL3	O
ATOM	10380	N	LEU	H	11	-15.759	-57.810	-17.562	1.00	77.90	MOL3	N
ATOM	10381	CA	LEU	H	11	-16.270	-59.082	-17.077	1.00	74.98	MOL3	C
ATOM	10382	CB	LEU	H	11	-17.031	-58.934	-15.764	1.00	71.57	MOL3	C
ATOM	10383	CG	LEU	H	11	-18.320	-58.134	-15.791	1.00	77.35	MOL3	C
ATOM	10384	CD1	LEU	H	11	-18.985	-58.225	-14.436	1.00	82.67	MOL3	C
ATOM	10385	CD2	LEU	H	11	-18.023	-56.693	-16.147	1.00	85.15	MOL3	C
ATOM	10386	C	LEU	H	11	-17.163	-59.671	-18.139	1.00	74.43	MOL3	C
ATOM	10387	O	LEU	H	11	-17.611	-58.973	-19.045	1.00	72.67	MOL3	O
ATOM	10388	N	VAL	H	12	-17.405	-60.968	-18.043	1.00	77.54	MOL3	N
ATOM	10389	CA	VAL	H	12	-18.235	-61.637	-19.026	1.00	84.43	MOL3	C
ATOM	10390	CB	VAL	H	12	-17.499	-61.779	-20.365	1.00	86.47	MOL3	C
ATOM	10391	CG1	VAL	H	12	-16.214	-62.564	-20.172	1.00	85.38	MOL3	C
ATOM	10392	CG2	VAL	H	12	-18.397	-62.472	-21.373	1.00	95.20	MOL3	C
ATOM	10393	C	VAL	H	12	-18.656	-63.020	-18.561	1.00	87.93	MOL3	C
ATOM	10394	O	VAL	H	12	-17.820	-63.846	-18.206	1.00	92.06	MOL3	O
ATOM	10395	N	GLN	H	13	-19.963	-63.264	-18.570	1.00	93.30	MOL3	N
ATOM	10396	CA	GLN	H	13	-20.525	-64.547	-18.144	1.00	93.98	MOL3	C
ATOM	10397	CB	GLN	H	13	-22.020	-64.630	-18.507	1.00	101.62	MOL3	C
ATOM	10398	CG	GLN	H	13	-22.372	-64.091	-19.903	1.00	114.56	MOL3	C
ATOM	10399	CD	GLN	H	13	-22.366	-62.559	-19.985	1.00	122.12	MOL3	C
ATOM	10400	OE1	GLN	H	13	-23.149	-61.885	-19.306	1.00	124.57	MOL3	O
ATOM	10401	NE2	GLN	H	13	-21.484	-62.009	-20.823	1.00	120.27	MOL3	N
ATOM	10402	C	GLN	H	13	-19.771	-65.715	-18.767	1.00	86.99	MOL3	C
ATOM	10403	O	GLN	H	13	-19.267	-65.613	-19.887	1.00	82.90	MOL3	O
ATOM	10404	N	PRO	H	14	-19.676	-66.839	-18.040	1.00	80.78	MOL3	N
ATOM	10405	CD	PRO	H	14	-20.285	-67.128	-16.734	1.00	79.55	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10406	CA	PRO	H	14	-18.973	-68.015	-18.546	1.00	80.09	MOL3	C
ATOM	10407	CB	PRO	H	14	-19.374	-69.102	-17.563	1.00	75.48	MOL3	C
ATOM	10408	CG	PRO	H	14	-19.520	-68.359	-16.300	1.00	73.51	MOL3	C
ATOM	10409	C	PRO	H	14	-19.422	-68.318	-19.965	1.00	85.55	MOL3	C
ATOM	10410	O	PRO	H	14	-20.480	-67.866	-20.394	1.00	90.37	MOL3	O
ATOM	10411	N	GLY	H	15	-18.618	-69.080	-20.695	1.00	89.51	MOL3	N
ATOM	10412	CA	GLY	H	15	-18.963	-69.397	-22.068	1.00	91.81	MOL3	C
ATOM	10413	C	GLY	H	15	-18.782	-68.213	-23.009	1.00	94.38	MOL3	C
ATOM	10414	O	GLY	H	15	-18.402	-68.390	-24.168	1.00	96.38	MOL3	O
ATOM	10415	N	GLY	H	16	-19.052	-67.005	-22.515	1.00	95.37	MOL3	N
ATOM	10416	CA	GLY	H	16	-18.916	-65.807	-23.329	1.00	93.58	MOL3	C
ATOM	10417	C	GLY	H	16	-17.553	-65.651	-23.983	1.00	91.42	MOL3	C
ATOM	10418	O	GLY	H	16	-16.675	-66.494	-23.818	1.00	89.53	MOL3	O
ATOM	10419	N	SER	H	17	-17.368	-64.569	-24.729	1.00	90.50	MOL3	N
ATOM	10420	CA	SER	H	17	-16.096	-64.345	-25.399	1.00	88.77	MOL3	C
ATOM	10421	CB	SER	H	17	-16.183	-64.769	-26.872	1.00	93.79	MOL3	C
ATOM	10422	OG	SER	H	17	-16.939	-63.845	-27.646	1.00	101.08	MOL3	O
ATOM	10423	C	SER	H	17	-15.603	-62.904	-25.315	1.00	86.43	MOL3	C
ATOM	10424	O	SER	H	17	-16.389	-61.956	-25.176	1.00	85.00	MOL3	O
ATOM	10425	N	LEU	H	18	-14.284	-62.761	-25.408	1.00	80.10	MOL3	N
ATOM	10426	CA	LEU	H	18	-13.633	-61.465	-25.353	1.00	75.09	MOL3	C
ATOM	10427	CB	LEU	H	18	-13.170	-61.178	-23.933	1.00	68.07	MOL3	C
ATOM	10428	CG	LEU	H	18	-13.953	-60.096	-23.210	1.00	62.48	MOL3	C
ATOM	10429	CD1	LEU	H	18	-13.285	-59.884	-21.891	1.00	62.03	MOL3	C
ATOM	10430	CD2	LEU	H	18	-13.989	-58.799	-24.016	1.00	59.71	MOL3	C
ATOM	10431	C	LEU	H	18	-12.427	-61.428	-26.273	1.00	73.76	MOL3	C
ATOM	10432	O	LEU	H	18	-11.813	-62.463	-26.530	1.00	71.85	MOL3	O
ATOM	10433	N	ARG	H	19	-12.098	-60.234	-26.762	1.00	71.25	MOL3	N
ATOM	10434	CA	ARG	H	19	-10.945	-60.046	-27.633	1.00	70.80	MOL3	C
ATOM	10435	CB	ARG	H	19	-11.393	-59.676	-29.046	1.00	76.31	MOL3	C
ATOM	10436	CG	ARG	H	19	-10.262	-59.469	-30.054	1.00	81.86	MOL3	C
ATOM	10437	CD	ARG	H	19	-10.782	-59.612	-31.486	1.00	87.72	MOL3	C
ATOM	10438	NE	ARG	H	19	-9.862	-59.094	-32.497	1.00	89.33	MOL3	N
ATOM	10439	CZ	ARG	H	19	-9.536	-57.810	-32.623	1.00	94.54	MOL3	C
ATOM	10440	NH1	ARG	H	19	-10.051	-56.903	-31.800	1.00	93.84	MOL3	N
ATOM	10441	NH2	ARG	H	19	-8.706	-57.428	-33.584	1.00	97.79	MOL3	N
ATOM	10442	C	ARG	H	19	-10.071	-58.947	-27.051	1.00	69.54	MOL3	C
ATOM	10443	O	ARG	H	19	-10.500	-57.795	-26.937	1.00	70.47	MOL3	O
ATOM	10444	N	LEU	H	20	-8.847	-59.324	-26.682	1.00	63.89	MOL3	N
ATOM	10445	CA	LEU	H	20	-7.877	-58.417	-26.090	1.00	56.44	MOL3	C
ATOM	10446	CB	LEU	H	20	-7.129	-59.149	-24.985	1.00	53.18	MOL3	C
ATOM	10447	CG	LEU	H	20	-7.988	-59.770	-23.877	1.00	53.71	MOL3	C
ATOM	10448	CD1	LEU	H	20	-7.117	-60.610	-22.954	1.00	49.56	MOL3	C
ATOM	10449	CD2	LEU	H	20	-8.680	-58.672	-23.084	1.00	52.72	MOL3	C
ATOM	10450	C	LEU	H	20	-6.891	-57.895	-27.127	1.00	55.93	MOL3	C
ATOM	10451	O	LEU	H	20	-6.503	-58.621	-28.043	1.00	55.63	MOL3	O
ATOM	10452	N	SER	H	21	-6.486	-56.638	-26.971	1.00	53.32	MOL3	N
ATOM	10453	CA	SER	H	21	-5.549	-56.011	-27.892	1.00	55.06	MOL3	C
ATOM	10454	CB	SER	H	21	-6.246	-54.909	-28.674	1.00	58.91	MOL3	C
ATOM	10455	OG	SER	H	21	-7.620	-55.205	-28.830	1.00	74.44	MOL3	O
ATOM	10456	C	SER	H	21	-4.388	-55.399	-27.131	1.00	55.70	MOL3	C
ATOM	10457	O	SER	H	21	-4.523	-55.019	-25.971	1.00	57.26	MOL3	O
ATOM	10458	N	CYS	H	22	-3.248	-55.300	-27.802	1.00	56.67	MOL3	N
ATOM	10459	CA	CYS	H	22	-2.046	-54.727	-27.220	1.00	56.43	MOL3	C
ATOM	10460	C	CYS	H	22	-1.400	-53.853	-28.269	1.00	50.74	MOL3	C
ATOM	10461	O	CYS	H	22	-1.092	-54.322	-29.352	1.00	52.24	MOL3	O
ATOM	10462	CB	CYS	H	22	-1.077	-55.840	-26.817	1.00	63.13	MOL3	C
ATOM	10463	SG	CYS	H	22	0.529	-55.285	-26.142	1.00	72.78	MOL3	S
ATOM	10464	N	ALA	H	23	-1.210	-52.581	-27.961	1.00	48.24	MOL3	N
ATOM	10465	CA	ALA	H	23	-0.590	-51.687	-28.912	1.00	51.21	MOL3	C
ATOM	10466	CB	ALA	H	23	-1.292	-50.353	-28.892	1.00	57.28	MOL3	C
ATOM	10467	C	ALA	H	23	0.869	-51.532	-28.519	1.00	52.95	MOL3	C
ATOM	10468	O	ALA	H	23	1.175	-51.127	-27.402	1.00	56.88	MOL3	O
ATOM	10469	N	ALA	H	24	1.771	-51.865	-29.431	1.00	50.57	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	10470	CA	ALA	H	24	3.187	-51.762	-29.132	1.00	51.81	MOL3	C
ATOM	10471	CB	ALA	H	24	3.903	-53.016	-29.587	1.00	62.83	MOL3	C
ATOM	10472	C	ALA	H	24	3.811	-50.547	-29.783	1.00	49.99	MOL3	C
ATOM	10473	O	ALA	H	24	3.286	-50.016	-30.759	1.00	53.01	MOL3	O
ATOM	10474	N	SER	H	25	4.949	-50.123	-29.249	1.00	45.42	MOL3	N
ATOM	10475	CA	SER	H	25	5.651	-48.962	-29.775	1.00	48.13	MOL3	C
ATOM	10476	CB	SER	H	25	4.977	-47.677	-29.318	1.00	46.68	MOL3	C
ATOM	10477	OG	SER	H	25	5.893	-46.919	-28.544	1.00	47.00	MOL3	O
ATOM	10478	C	SER	H	25	7.057	-48.935	-29.230	1.00	47.04	MOL3	C
ATOM	10479	O	SER	H	25	7.347	-49.595	-28.252	1.00	52.69	MOL3	O
ATOM	10480	N	GLY	H	26	7.919	-48.140	-29.842	1.00	49.40	MOL3	N
ATOM	10481	CA	GLY	H	26	9.279	-48.038	-29.359	1.00	47.23	MOL3	C
ATOM	10482	C	GLY	H	26	10.185	-49.149	-29.838	1.00	46.49	MOL3	C
ATOM	10483	O	GLY	H	26	11.295	-49.289	-29.328	1.00	46.28	MOL3	O
ATOM	10484	N	PHE	H	27	9.727	-49.944	-30.802	1.00	43.77	MOL3	N
ATOM	10485	CA	PHE	H	27	10.566	-51.014	-31.318	1.00	51.46	MOL3	C
ATOM	10486	CB	PHE	H	27	10.827	-52.049	-30.222	1.00	48.70	MOL3	C
ATOM	10487	CG	PHE	H	27	9.601	-52.772	-29.752	1.00	49.82	MOL3	C
ATOM	10488	CD1	PHE	H	27	9.280	-54.017	-30.247	1.00	48.99	MOL3	C
ATOM	10489	CD2	PHE	H	27	8.782	-52.216	-28.793	1.00	57.82	MOL3	C
ATOM	10490	CE1	PHE	H	27	8.168	-54.692	-29.790	1.00	47.68	MOL3	C
ATOM	10491	CE2	PHE	H	27	7.667	-52.888	-28.334	1.00	55.96	MOL3	C
ATOM	10492	CZ	PHE	H	27	7.363	-54.127	-28.836	1.00	51.20	MOL3	C
ATOM	10493	C	PHE	H	27	10.027	-51.696	-32.566	1.00	56.33	MOL3	C
ATOM	10494	O	PHE	H	27	8.831	-51.653	-32.848	1.00	57.40	MOL3	O
ATOM	10495	N	THR	H	28	10.921	-52.318	-33.326	1.00	59.29	MOL3	N
ATOM	10496	CA	THR	H	28	10.506	-53.000	-34.536	1.00	59.20	MOL3	C
ATOM	10497	CB	THR	H	28	11.727	-53.364	-35.386	1.00	62.43	MOL3	C
ATOM	10498	OG1	THR	H	28	12.903	-53.377	-34.559	1.00	75.00	MOL3	O
ATOM	10499	CG2	THR	H	28	11.912	-52.336	-36.478	1.00	62.63	MOL3	C
ATOM	10500	C	THR	H	28	9.666	-54.231	-34.202	1.00	53.56	MOL3	C
ATOM	10501	O	THR	H	28	10.155	-55.353	-34.154	1.00	51.45	MOL3	O
ATOM	10502	N	PHE	H	29	8.389	-53.973	-33.954	1.00	50.42	MOL3	N
ATOM	10503	CA	PHE	H	29	7.392	-54.982	-33.621	1.00	52.34	MOL3	C
ATOM	10504	CB	PHE	H	29	6.010	-54.327	-33.673	1.00	49.86	MOL3	C
ATOM	10505	CG	PHE	H	29	4.895	-55.191	-33.169	1.00	46.09	MOL3	C
ATOM	10506	CD1	PHE	H	29	4.605	-55.248	-31.817	1.00	41.19	MOL3	C
ATOM	10507	CD2	PHE	H	29	4.123	-55.937	-34.054	1.00	47.78	MOL3	C
ATOM	10508	CE1	PHE	H	29	3.565	-56.032	-31.352	1.00	45.08	MOL3	C
ATOM	10509	CE2	PHE	H	29	3.079	-56.725	-33.597	1.00	44.39	MOL3	C
ATOM	10510	CZ	PHE	H	29	2.801	-56.770	-32.241	1.00	47.36	MOL3	C
ATOM	10511	C	PHE	H	29	7.413	-56.189	-34.565	1.00	57.28	MOL3	C
ATOM	10512	O	PHE	H	29	7.488	-57.338	-34.119	1.00	58.37	MOL3	O
ATOM	10513	N	SER	H	30	7.335	-55.921	-35.867	1.00	58.55	MOL3	N
ATOM	10514	CA	SER	H	30	7.323	-56.967	-36.882	1.00	58.10	MOL3	C
ATOM	10515	CB	SER	H	30	7.137	-56.339	-38.262	1.00	60.76	MOL3	C
ATOM	10516	OG	SER	H	30	6.942	-54.932	-38.165	1.00	73.31	MOL3	O
ATOM	10517	C	SER	H	30	8.578	-57.832	-36.872	1.00	60.85	MOL3	C
ATOM	10518	O	SER	H	30	8.715	-58.739	-37.697	1.00	59.99	MOL3	O
ATOM	10519	N	ASP	H	31	9.484	-57.557	-35.932	1.00	64.35	MOL3	N
ATOM	10520	CA	ASP	H	31	10.736	-58.305	-35.805	1.00	64.12	MOL3	C
ATOM	10521	CB	ASP	H	31	11.916	-57.376	-35.534	1.00	66.03	MOL3	C
ATOM	10522	CG	ASP	H	31	12.343	-56.599	-36.745	1.00	76.69	MOL3	C
ATOM	10523	OD1	ASP	H	31	13.473	-56.066	-36.714	1.00	82.61	MOL3	O
ATOM	10524	OD2	ASP	H	31	11.562	-56.510	-37.719	1.00	83.16	MOL3	O
ATOM	10525	C	ASP	H	31	10.754	-59.337	-34.699	1.00	61.93	MOL3	C
ATOM	10526	O	ASP	H	31	11.432	-60.345	-34.820	1.00	70.22	MOL3	O
ATOM	10527	N	TYR	H	32	10.025	-59.084	-33.620	1.00	58.60	MOL3	N
ATOM	10528	CA	TYR	H	32	10.033	-59.983	-32.474	1.00	57.91	MOL3	C
ATOM	10529	CB	TYR	H	32	10.303	-59.176	-31.209	1.00	58.87	MOL3	C
ATOM	10530	CG	TYR	H	32	11.612	-58.433	-31.201	1.00	56.33	MOL3	C
ATOM	10531	CD1	TYR	H	32	11.845	-57.382	-32.060	1.00	58.83	MOL3	C
ATOM	10532	CE1	TYR	H	32	13.049	-56.727	-32.049	1.00	71.93	MOL3	C
ATOM	10533	CD2	TYR	H	32	12.616	-58.801	-30.334	1.00	59.34	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10534	CE2	TYR	H	32	13.810	-58.163	-30.313	1.00	66.80	MOL3	C
ATOM	10535	CZ	TYR	H	32	14.035	-57.130	-31.166	1.00	74.47	MOL3	C
ATOM	10536	OH	TYR	H	32	15.270	-56.521	-31.141	1.00	84.60	MOL3	O
ATOM	10537	C	TYR	H	32	8.774	-60.790	-32.245	1.00	55.77	MOL3	C
ATOM	10538	O	TYR	H	32	7.702	-60.418	-32.703	1.00	58.85	MOL3	O
ATOM	10539	N	ASN	H	33	8.906	-61.889	-31.514	1.00	52.56	MOL3	N
ATOM	10540	CA	ASN	H	33	7.741	-62.695	-31.206	1.00	56.62	MOL3	C
ATOM	10541	CB	ASN	H	33	8.143	-64.085	-30.714	1.00	61.20	MOL3	C
ATOM	10542	CG	ASN	H	33	9.292	-64.670	-31.492	1.00	66.30	MOL3	C
ATOM	10543	OD1	ASN	H	33	9.240	-64.795	-32.724	1.00	68.76	MOL3	O
ATOM	10544	ND2	ASN	H	33	10.346	-65.043	-30.773	1.00	70.28	MOL3	N
ATOM	10545	C	ASN	H	33	7.027	-61.952	-30.081	1.00	56.59	MOL3	C
ATOM	10546	O	ASN	H	33	7.626	-61.124	-29.403	1.00	59.09	MOL3	O
ATOM	10547	N	MET	H	34	5.753	-62.249	-29.881	1.00	53.23	MOL3	N
ATOM	10548	CA	MET	H	34	4.987	-61.606	-28.834	1.00	48.63	MOL3	C
ATOM	10549	CB	MET	H	34	3.983	-60.650	-29.467	1.00	43.44	MOL3	C
ATOM	10550	CG	MET	H	34	4.614	-59.421	-30.057	1.00	40.62	MOL3	C
ATOM	10551	SD	MET	H	34	5.626	-58.584	-28.818	1.00	51.97	MOL3	S
ATOM	10552	CE	MET	H	34	4.381	-57.816	-27.805	1.00	46.46	MOL3	C
ATOM	10553	C	MET	H	34	4.267	-62.676	-28.020	1.00	51.21	MOL3	C
ATOM	10554	O	MET	H	34	4.102	-63.797	-28.488	1.00	53.62	MOL3	O
ATOM	10555	N	ALA	H	35	3.841	-62.346	-26.806	1.00	51.15	MOL3	N
ATOM	10556	CA	ALA	H	35	3.145	-63.323	-25.982	1.00	47.47	MOL3	C
ATOM	10557	CB	ALA	H	35	4.152	-64.228	-25.287	1.00	41.63	MOL3	C
ATOM	10558	C	ALA	H	35	2.226	-62.704	-24.944	1.00	47.83	MOL3	C
ATOM	10559	O	ALA	H	35	2.284	-61.508	-24.654	1.00	49.61	MOL3	O
ATOM	10560	N	TRP	H	36	1.361	-63.545	-24.395	1.00	47.61	MOL3	N
ATOM	10561	CA	TRP	H	36	0.443	-63.127	-23.356	1.00	45.28	MOL3	C
ATOM	10562	CB	TRP	H	36	-1.001	-63.401	-23.743	1.00	38.09	MOL3	C
ATOM	10563	CG	TRP	H	36	-1.506	-62.574	-24.843	1.00	35.79	MOL3	C
ATOM	10564	CD2	TRP	H	36	-2.105	-61.286	-24.731	1.00	39.24	MOL3	C
ATOM	10565	CE2	TRP	H	36	-2.485	-60.884	-26.030	1.00	43.04	MOL3	C
ATOM	10566	CE3	TRP	H	36	-2.361	-60.431	-23.661	1.00	34.67	MOL3	C
ATOM	10567	CD1	TRP	H	36	-1.537	-62.897	-26.166	1.00	44.70	MOL3	C
ATOM	10568	NE1	TRP	H	36	-2.131	-61.889	-26.892	1.00	43.27	MOL3	N
ATOM	10569	CZ2	TRP	H	36	-3.104	-59.666	-26.283	1.00	33.90	MOL3	C
ATOM	10570	CZ3	TRP	H	36	-2.975	-59.228	-23.917	1.00	38.12	MOL3	C
ATOM	10571	CH2	TRP	H	36	-3.340	-58.854	-25.217	1.00	30.70	MOL3	C
ATOM	10572	C	TRP	H	36	0.780	-63.956	-22.137	1.00	45.18	MOL3	C
ATOM	10573	O	TRP	H	36	1.065	-65.147	-22.241	1.00	48.92	MOL3	O
ATOM	10574	N	VAL	H	37	0.758	-63.321	-20.983	1.00	39.79	MOL3	N
ATOM	10575	CA	VAL	H	37	1.052	-64.005	-19.747	1.00	40.84	MOL3	C
ATOM	10576	CB	VAL	H	37	2.428	-63.617	-19.209	1.00	37.48	MOL3	C
ATOM	10577	CG1	VAL	H	37	2.698	-64.337	-17.922	1.00	31.38	MOL3	C
ATOM	10578	CG2	VAL	H	37	3.479	-63.954	-20.221	1.00	31.44	MOL3	C
ATOM	10579	C	VAL	H	37	-0.014	-63.499	-18.814	1.00	49.24	MOL3	C
ATOM	10580	O	VAL	H	37	-0.270	-62.293	-18.745	1.00	54.99	MOL3	O
ATOM	10581	N	ARG	H	38	-0.643	-64.415	-18.097	1.00	49.75	MOL3	N
ATOM	10582	CA	ARG	H	38	-1.713	-64.038	-17.196	1.00	52.55	MOL3	C
ATOM	10583	CB	ARG	H	38	-2.929	-64.875	-17.509	1.00	56.84	MOL3	C
ATOM	10584	CG	ARG	H	38	-2.602	-66.341	-17.420	1.00	62.25	MOL3	C
ATOM	10585	CD	ARG	H	38	-3.791	-67.152	-16.954	1.00	69.06	MOL3	C
ATOM	10586	NE	ARG	H	38	-4.874	-67.146	-17.923	1.00	61.89	MOL3	N
ATOM	10587	CZ	ARG	H	38	-5.525	-68.241	-18.271	1.00	64.52	MOL3	C
ATOM	10588	NH1	ARG	H	38	-5.191	-69.404	-17.722	1.00	62.42	MOL3	N
ATOM	10589	NH2	ARG	H	38	-6.493	-68.177	-19.168	1.00	67.54	MOL3	N
ATOM	10590	C	ARG	H	38	-1.335	-64.261	-15.750	1.00	51.86	MOL3	C
ATOM	10591	O	ARG	H	38	-0.419	-65.013	-15.450	1.00	48.15	MOL3	O
ATOM	10592	N	GLN	H	39	-2.070	-63.621	-14.851	1.00	55.25	MOL3	N
ATOM	10593	CA	GLN	H	39	-1.810	-63.759	-13.429	1.00	54.03	MOL3	C
ATOM	10594	CB	GLN	H	39	-0.761	-62.737	-13.012	1.00	52.59	MOL3	C
ATOM	10595	CG	GLN	H	39	-0.508	-62.653	-11.540	1.00	49.71	MOL3	C
ATOM	10596	CD	GLN	H	39	0.474	-61.563	-11.214	1.00	49.39	MOL3	C
ATOM	10597	OE1	GLN	H	39	0.339	-60.433	-11.681	1.00	48.74	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	10598	NE2	GLN	H	39	1.467	-61.888	-10.405	1.00	45.99	MOL3	N
ATOM	10599	C	GLN	H	39	-3.106	-63.582	-12.637	1.00	57.67	MOL3	C
ATOM	10600	O	GLN	H	39	-3.627	-62.470	-12.479	1.00	61.21	MOL3	O
ATOM	10601	N	ALA	H	40	-3.626	-64.706	-12.156	1.00	55.62	MOL3	N
ATOM	10602	CA	ALA	H	40	-4.855	-64.734	-11.385	1.00	55.64	MOL3	C
ATOM	10603	CB	ALA	H	40	-5.244	-66.144	-11.145	1.00	53.44	MOL3	C
ATOM	10604	C	ALA	H	40	-4.697	-64.011	-10.060	1.00	63.02	MOL3	C
ATOM	10605	O	ALA	H	40	-3.658	-64.095	-9.421	1.00	70.41	MOL3	O
ATOM	10606	N	PRO	H	41	-5.745	-63.313	-9.612	1.00	67.97	MOL3	N
ATOM	10607	CD	PRO	H	41	-7.127	-63.480	-10.088	1.00	68.50	MOL3	C
ATOM	10608	CA	PRO	H	41	-5.713	-62.567	-8.349	1.00	71.98	MOL3	C
ATOM	10609	CB	PRO	H	41	-7.189	-62.398	-8.019	1.00	74.44	MOL3	C
ATOM	10610	CG	PRO	H	41	-7.839	-62.379	-9.373	1.00	70.53	MOL3	C
ATOM	10611	C	PRO	H	41	-4.972	-63.321	-7.252	1.00	74.99	MOL3	C
ATOM	10612	O	PRO	H	41	-5.248	-64.488	-6.987	1.00	76.25	MOL3	O
ATOM	10613	N	GLY	H	42	-4.021	-62.653	-6.620	1.00	78.76	MOL3	N
ATOM	10614	CA	GLY	H	42	-3.267	-63.297	-5.563	1.00	82.26	MOL3	C
ATOM	10615	C	GLY	H	42	-2.257	-64.326	-6.044	1.00	81.56	MOL3	C
ATOM	10616	O	GLY	H	42	-1.160	-64.421	-5.488	1.00	85.89	MOL3	O
ATOM	10617	N	LYS	H	43	-2.599	-65.090	-7.075	1.00	74.50	MOL3	N
ATOM	10618	CA	LYS	H	43	-1.675	-66.100	-7.555	1.00	74.34	MOL3	C
ATOM	10619	CB	LYS	H	43	-2.447	-67.170	-8.314	1.00	81.90	MOL3	C
ATOM	10620	CG	LYS	H	43	-3.471	-67.877	-7.436	1.00	93.04	MOL3	C
ATOM	10621	CD	LYS	H	43	-3.947	-69.194	-8.050	1.00	104.70	MOL3	C
ATOM	10622	CE	LYS	H	43	-2.781	-70.168	-8.263	1.00	110.69	MOL3	C
ATOM	10623	NZ	LYS	H	43	-3.221	-71.520	-8.733	1.00	110.14	MOL3	N
ATOM	10624	C	LYS	H	43	-0.457	-65.617	-8.368	1.00	73.13	MOL3	C
ATOM	10625	O	LYS	H	43	-0.224	-64.414	-8.533	1.00	71.85	MOL3	O
ATOM	10626	N	GLY	H	44	0.326	-66.578	-8.853	1.00	69.00	MOL3	N
ATOM	10627	CA	GLY	H	44	1.528	-66.272	-9.606	1.00	62.52	MOL3	C
ATOM	10628	C	GLY	H	44	1.356	-65.945	-11.075	1.00	64.11	MOL3	C
ATOM	10629	O	GLY	H	44	0.316	-65.431	-11.504	1.00	68.38	MOL3	O
ATOM	10630	N	LEU	H	45	2.383	-66.257	-11.858	1.00	58.47	MOL3	N
ATOM	10631	CA	LEU	H	45	2.376	-65.958	-13.285	1.00	54.84	MOL3	C
ATOM	10632	CB	LEU	H	45	3.660	-65.206	-13.657	1.00	51.82	MOL3	C
ATOM	10633	CG	LEU	H	45	3.926	-63.899	-12.905	1.00	48.64	MOL3	C
ATOM	10634	CD1	LEU	H	45	5.399	-63.508	-12.993	1.00	43.07	MOL3	C
ATOM	10635	CD2	LEU	H	45	3.016	-62.828	-13.473	1.00	42.51	MOL3	C
ATOM	10636	C	LEU	H	45	2.258	-67.213	-14.132	1.00	54.17	MOL3	C
ATOM	10637	O	LEU	H	45	2.986	-68.183	-13.944	1.00	50.26	MOL3	O
ATOM	10638	N	GLU	H	46	1.339	-67.180	-15.084	1.00	58.43	MOL3	N
ATOM	10639	CA	GLU	H	46	1.123	-68.311	-15.965	1.00	60.38	MOL3	C
ATOM	10640	CB	GLU	H	46	-0.250	-68.919	-15.686	1.00	71.49	MOL3	C
ATOM	10641	CG	GLU	H	46	-0.426	-70.361	-16.110	1.00	83.80	MOL3	C
ATOM	10642	CD	GLU	H	46	-1.757	-70.929	-15.654	1.00	91.71	MOL3	C
ATOM	10643	OE1	GLU	H	46	-2.779	-70.679	-16.336	1.00	91.50	MOL3	O
ATOM	10644	OE2	GLU	H	46	-1.775	-71.611	-14.602	1.00	92.19	MOL3	O
ATOM	10645	C	GLU	H	46	1.200	-67.805	-17.395	1.00	60.49	MOL3	C
ATOM	10646	O	GLU	H	46	0.626	-66.760	-17.740	1.00	61.39	MOL3	O
ATOM	10647	N	TRP	H	47	1.926	-68.537	-18.227	1.00	57.40	MOL3	N
ATOM	10648	CA	TRP	H	47	2.071	-68.147	-19.617	1.00	57.25	MOL3	C
ATOM	10649	CB	TRP	H	47	3.319	-68.772	-20.211	1.00	51.55	MOL3	C
ATOM	10650	CG	TRP	H	47	3.294	-68.709	-21.680	1.00	58.49	MOL3	C
ATOM	10651	CD2	TRP	H	47	3.195	-69.816	-22.571	1.00	65.35	MOL3	C
ATOM	10652	CE2	TRP	H	47	3.104	-69.298	-23.875	1.00	68.55	MOL3	C
ATOM	10653	CE3	TRP	H	47	3.171	-71.200	-22.394	1.00	68.81	MOL3	C
ATOM	10654	CD1	TRP	H	47	3.268	-67.586	-22.455	1.00	62.40	MOL3	C
ATOM	10655	NE1	TRP	H	47	3.152	-67.930	-23.782	1.00	67.20	MOL3	N
ATOM	10656	CZ2	TRP	H	47	2.987	-70.117	-24.991	1.00	70.75	MOL3	C
ATOM	10657	CZ3	TRP	H	47	3.057	-72.007	-23.503	1.00	70.26	MOL3	C
ATOM	10658	CH2	TRP	H	47	2.965	-71.466	-24.783	1.00	69.71	MOL3	C
ATOM	10659	C	TRP	H	47	0.870	-68.584	-20.432	1.00	56.11	MOL3	C
ATOM	10660	O	TRP	H	47	0.484	-69.739	-20.377	1.00	62.69	MOL3	O
ATOM	10661	N	VAL	H	48	0.272	-67.673	-21.188	1.00	55.01	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	10662	CA	VAL	H	48	-0.879	-68.039	-22.005	1.00	53.56	MOL3	C
ATOM	10663	CB	VAL	H	48	-1.857	-66.856	-22.151	1.00	51.33	MOL3	C
ATOM	10664	CG1	VAL	H	48	-2.811	-67.067	-23.312	1.00	44.69	MOL3	C
ATOM	10665	CG2	VAL	H	48	-2.653	-66.732	-20.880	1.00	56.05	MOL3	C
ATOM	10666	C	VAL	H	48	-0.444	-68.539	-23.376	1.00	54.95	MOL3	C
ATOM	10667	O	VAL	H	48	-0.430	-69.739	-23.625	1.00	53.09	MOL3	O
ATOM	10668	N	ALA	H	49	-0.068	-67.631	-24.265	1.00	58.16	MOL3	N
ATOM	10669	CA	ALA	H	49	0.362	-68.046	-25.590	1.00	62.56	MOL3	C
ATOM	10670	CB	ALA	H	49	-0.830	-68.144	-25.509	1.00	61.76	MOL3	C
ATOM	10671	C	ALA	H	49	1.374	-67.081	-26.176	1.00	66.37	MOL3	C
ATOM	10672	O	ALA	H	49	1.571	-65.980	-25.660	1.00	69.42	MOL3	O
ATOM	10673	N	THR	H	50	2.025	-67.514	-27.249	1.00	65.01	MOL3	N
ATOM	10674	CA	THR	H	50	2.987	-66.675	-27.948	1.00	65.55	MOL3	C
ATOM	10675	CB	THR	H	50	4.472	-66.949	-27.505	1.00	66.68	MOL3	C
ATOM	10676	OG1	THR	H	50	5.249	-67.338	-28.641	1.00	71.68	MOL3	O
ATOM	10677	CG2	THR	H	50	4.559	-68.028	-26.459	1.00	56.41	MOL3	C
ATOM	10678	C	THR	H	50	2.843	-66.898	-29.457	1.00	62.54	MOL3	C
ATOM	10679	O	THR	H	50	2.513	-67.993	-29.897	1.00	66.24	MOL3	O
ATOM	10680	N	ILE	H	51	3.061	-65.848	-30.239	1.00	57.78	MOL3	N
ATOM	10681	CA	ILE	H	51	2.970	-65.925	-31.688	1.00	58.59	MOL3	C
ATOM	10682	CB	ILE	H	51	1.789	-65.127	-32.221	1.00	61.74	MOL3	C
ATOM	10683	CG2	ILE	H	51	1.719	-63.778	-31.532	1.00	65.58	MOL3	C
ATOM	10684	CG1	ILE	H	51	1.924	-64.965	-33.736	1.00	63.13	MOL3	C
ATOM	10685	CD1	ILE	H	51	0.898	-64.033	-34.342	1.00	60.29	MOL3	C
ATOM	10686	C	ILE	H	51	4.247	-65.335	-32.244	1.00	61.40	MOL3	C
ATOM	10687	O	ILE	H	51	4.776	-64.383	-31.686	1.00	63.89	MOL3	O
ATOM	10688	N	THR	H	52	4.743	-65.884	-33.347	1.00	65.83	MOL3	N
ATOM	10689	CA	THR	H	52	6.002	-65.409	-33.917	1.00	69.29	MOL3	C
ATOM	10690	CB	THR	H	52	6.639	-66.493	-34.770	1.00	68.24	MOL3	C
ATOM	10691	OG1	THR	H	52	5.882	-66.647	-35.975	1.00	78.52	MOL3	O
ATOM	10692	CG2	THR	H	52	6.650	-67.819	-34.006	1.00	60.36	MOL3	C
ATOM	10693	C	THR	H	52	5.919	-64.120	-34.725	1.00	71.78	MOL3	C
ATOM	10694	O	THR	H	52	4.839	-63.665	-35.092	1.00	71.56	MOL3	O
ATOM	10695	N	TYR	H	53	7.078	-63.538	-35.004	1.00	76.82	MOL3	N
ATOM	10696	CA	TYR	H	53	7.134	-62.279	-35.728	1.00	83.93	MOL3	C
ATOM	10697	CB	TYR	H	53	8.586	-61.813	-35.844	1.00	81.83	MOL3	C
ATOM	10698	CG	TYR	H	53	9.427	-62.665	-36.751	1.00	82.92	MOL3	C
ATOM	10699	CD1	TYR	H	53	9.616	-62.317	-38.080	1.00	81.60	MOL3	C
ATOM	10700	CE1	TYR	H	53	10.367	-63.106	-38.924	1.00	85.19	MOL3	C
ATOM	10701	CD2	TYR	H	53	10.013	-63.831	-36.287	1.00	86.43	MOL3	C
ATOM	10702	CE2	TYR	H	53	10.767	-64.630	-37.126	1.00	89.89	MOL3	C
ATOM	10703	CZ	TYR	H	53	10.942	-64.263	-38.445	1.00	87.12	MOL3	C
ATOM	10704	OH	TYR	H	53	11.703	-65.053	-39.280	1.00	88.25	MOL3	O
ATOM	10705	C	TYR	H	53	6.476	-62.296	-37.105	1.00	89.59	MOL3	C
ATOM	10706	O	TYR	H	53	5.673	-61.411	-37.414	1.00	90.27	MOL3	O
ATOM	10707	N	GLU	H	54	6.807	-63.291	-37.930	1.00	95.40	MOL3	N
ATOM	10708	CA	GLU	H	54	6.237	-63.378	-39.276	1.00	97.31	MOL3	C
ATOM	10709	CB	GLU	H	54	6.765	-64.602	-40.025	1.00	98.84	MOL3	C
ATOM	10710	CG	GLU	H	54	5.928	-65.850	-39.812	1.00	108.31	MOL3	C
ATOM	10711	CD	GLU	H	54	6.561	-66.823	-38.845	1.00	112.31	MOL3	C
ATOM	10712	OE1	GLU	H	54	5.872	-67.781	-38.434	1.00	111.19	MOL3	O
ATOM	10713	OE2	GLU	H	54	7.751	-66.635	-38.506	1.00	114.93	MOL3	O
ATOM	10714	C	GLU	H	54	4.722	-63.464	-39.168	1.00	97.26	MOL3	C
ATOM	10715	O	GLU	H	54	3.994	-63.033	-40.061	1.00	94.50	MOL3	O
ATOM	10716	N	GLY	H	55	4.256	-64.024	-38.059	1.00	96.91	MOL3	N
ATOM	10717	CA	GLY	H	55	2.832	-64.135	-37.846	1.00	99.34	MOL3	C
ATOM	10718	C	GLY	H	55	2.269	-65.493	-38.188	1.00	102.51	MOL3	C
ATOM	10719	O	GLY	H	55	1.053	-65.678	-38.161	1.00	104.24	MOL3	O
ATOM	10720	N	ARG	H	56	3.130	-66.452	-38.510	1.00	105.17	MOL3	N
ATOM	10721	CA	ARG	H	56	2.632	-67.782	-38.849	1.00	110.29	MOL3	C
ATOM	10722	CB	ARG	H	56	2.876	-68.087	-40.341	1.00	117.75	MOL3	C
ATOM	10723	CG	ARG	H	56	1.864	-69.075	-40.980	1.00	124.33	MOL3	C
ATOM	10724	CD	ARG	H	56	0.399	-68.588	-40.858	1.00	128.22	MOL3	C
ATOM	10725	NE	ARG	H	56	-0.565	-69.460	-41.539	1.00	127.99	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	10726	CZ	ARG	H	56	-1.888	-69.376	-41.404	1.00127.35	MOL3	C
ATOM	10727	NH1	ARG	H	56	-2.421	-68.456	-40.608	1.00124.80	MOL3	N
ATOM	10728	NH2	ARG	H	56	-2.682	-70.212	-42.067	1.00122.83	MOL3	N
ATOM	10729	C	ARG	H	56	3.244	-68.873	-37.971	1.00107.22	MOL3	C
ATOM	10730	O	ARG	H	56	4.154	-69.588	-38.386	1.00107.49	MOL3	O
ATOM	10731	N	ASN	H	57	2.722	-68.984	-36.753	1.00104.15	MOL3	N
ATOM	10732	CA	ASN	H	57	3.172	-69.969	-35.776	1.00101.40	MOL3	C
ATOM	10733	CB	ASN	H	57	4.701	-70.090	-35.799	1.00104.71	MOL3	C
ATOM	10734	CG	ASN	H	57	5.173	-71.513	-36.054	1.00106.01	MOL3	C
ATOM	10735	OD1	ASN	H	57	4.768	-72.146	-37.029	1.00104.49	MOL3	O
ATOM	10736	ND2	ASN	H	57	6.038	-72.020	-35.178	1.00104.68	MOL3	N
ATOM	10737	C	ASN	H	57	2.714	-69.536	-34.386	1.00 95.59	MOL3	C
ATOM	10738	O	ASN	H	57	3.310	-68.656	-33.777	1.00 92.89	MOL3	O
ATOM	10739	N	THR	H	58	1.649	-70.156	-33.898	1.00 89.66	MOL3	N
ATOM	10740	CA	THR	H	58	1.117	-69.833	-32.590	1.00 87.41	MOL3	C
ATOM	10741	C	THR	H	58	-0.370	-69.535	-32.690	1.00 88.89	MOL3	C
ATOM	10742	OG1	THR	H	58	-1.049	-70.677	-33.219	1.00 93.56	MOL3	O
ATOM	10743	CG2	THR	H	58	-0.603	-68.357	-33.616	1.00 89.97	MOL3	C
ATOM	10744	C	THR	H	58	1.364	-71.033	-31.697	1.00 86.81	MOL3	C
ATOM	10745	O	THR	H	58	1.544	-72.135	-32.205	1.00 87.41	MOL3	O
ATOM	10746	N	TYR	H	59	1.375	-70.837	-30.377	1.00 87.09	MOL3	N
ATOM	10747	CA	TYR	H	59	1.656	-71.949	-29.477	1.00 87.89	MOL3	C
ATOM	10748	CB	TYR	H	59	3.011	-71.724	-28.815	1.00 86.52	MOL3	C
ATOM	10749	CG	TYR	H	59	4.159	-71.914	-29.785	1.00 92.68	MOL3	C
ATOM	10750	CD1	TYR	H	59	4.409	-70.987	-30.789	1.00 93.63	MOL3	C
ATOM	10751	CE1	TYR	H	59	5.423	-71.186	-31.715	1.00 97.03	MOL3	C
ATOM	10752	CD2	TYR	H	59	4.962	-73.050	-29.730	1.00 95.37	MOL3	C
ATOM	10753	CE2	TYR	H	59	5.980	-73.258	-30.651	1.00 96.17	MOL3	C
ATOM	10754	CZ	TYR	H	59	6.205	-72.324	-31.643	1.00 98.10	MOL3	C
ATOM	10755	OH	TYR	H	59	7.201	-72.536	-32.575	1.00100.34	MOL3	O
ATOM	10756	C	TYR	H	59	0.620	-72.348	-28.434	1.00 88.98	MOL3	C
ATOM	10757	O	TYR	H	59	0.255	-73.522	-28.352	1.00 97.11	MOL3	O
ATOM	10758	N	TYR	H	60	0.159	-71.411	-27.619	1.00 84.78	MOL3	N
ATOM	10759	CA	TYR	H	60	-0.870	-71.736	-26.621	1.00 83.82	MOL3	C
ATOM	10760	CB	TYR	H	60	-2.136	-72.260	-27.327	1.00 72.84	MOL3	C
ATOM	10761	CG	TYR	H	60	-2.630	-71.361	-28.436	1.00 65.27	MOL3	C
ATOM	10762	CD1	TYR	H	60	-2.171	-71.509	-29.735	1.00 61.04	MOL3	C
ATOM	10763	CE1	TYR	H	60	-2.547	-70.630	-30.726	1.00 61.15	MOL3	C
ATOM	10764	CD2	TYR	H	60	-3.490	-70.307	-28.164	1.00 64.94	MOL3	C
ATOM	10765	CE2	TYR	H	60	-3.870	-69.418	-29.149	1.00 63.80	MOL3	C
ATOM	10766	CZ	TYR	H	60	-3.392	-69.582	-30.427	1.00 65.02	MOL3	C
ATOM	10767	OH	TYR	H	60	-3.741	-68.673	-31.397	1.00 65.42	MOL3	O
ATOM	10768	C	TYR	H	60	-0.499	-72.730	-25.513	1.00 83.92	MOL3	C
ATOM	10769	O	TYR	H	60	0.293	-73.649	-25.708	1.00 83.62	MOL3	O
ATOM	10770	N	ARG	H	61	-1.107	-72.546	-24.348	1.00 87.10	MOL3	N
ATOM	10771	CA	ARG	H	61	-0.863	-73.432	-23.227	1.00 90.67	MOL3	C
ATOM	10772	CB	ARG	H	61	-0.879	-72.648	-21.910	1.00 89.04	MOL3	C
ATOM	10773	CG	ARG	H	61	-1.978	-73.017	-20.925	1.00 88.73	MOL3	C
ATOM	10774	CD	ARG	H	61	-1.397	-73.411	-19.565	1.00 91.73	MOL3	C
ATOM	10775	NE	ARG	H	61	-0.283	-72.553	-19.170	1.00 93.52	MOL3	N
ATOM	10776	CZ	ARG	H	61	0.477	-72.744	-18.093	1.00 96.29	MOL3	C
ATOM	10777	NH1	ARG	H	61	0.252	-73.767	-17.278	1.00 97.97	MOL3	N
ATOM	10778	NH2	ARG	H	61	1.486	-71.918	-17.844	1.00100.59	MOL3	N
ATOM	10779	C	ARG	H	61	-1.919	-74.527	-23.227	1.00 97.16	MOL3	C
ATOM	10780	O	ARG	H	61	-3.079	-74.294	-23.582	1.00102.79	MOL3	O
ATOM	10781	N	ASP	H	62	-1.502	-75.736	-22.867	1.00100.75	MOL3	N
ATOM	10782	CA	ASP	H	62	-2.410	-76.881	-22.803	1.00103.41	MOL3	C
ATOM	10783	CB	ASP	H	62	-1.659	-78.133	-22.330	1.00108.69	MOL3	C
ATOM	10784	CG	ASP	H	62	-1.031	-78.913	-23.464	1.00115.91	MOL3	C
ATOM	10785	OD1	ASP	H	62	-0.409	-79.959	-23.175	1.00117.07	MOL3	O
ATOM	10786	OD2	ASP	H	62	-1.162	-78.488	-24.634	1.00120.19	MOL3	O
ATOM	10787	C	ASP	H	62	-3.499	-76.590	-21.783	1.00100.29	MOL3	C
ATOM	10788	O	ASP	H	62	-3.495	-77.191	-20.711	1.00102.03	MOL3	O
ATOM	10789	N	SER	H	63	-4.423	-75.687	-22.095	1.00 93.82	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	10790	CA	SER	H	63	-5.476	-75.357	-21.147	1.00	90.28	MOL3	C
ATOM	10791	CB	SER	H	63	-4.859	-74.879	-19.835	1.00	87.21	MOL3	C
ATOM	10792	OG	SER	H	63	-5.861	-74.488	-18.921	1.00	92.41	MOL3	O
ATOM	10793	C	SER	H	63	-6.394	-74.284	-21.701	1.00	91.17	MOL3	C
ATOM	10794	O	SER	H	63	-7.370	-73.886	-21.059	1.00	91.75	MOL3	O
ATOM	10795	N	VAL	H	64	-6.069	-73.811	-22.896	1.00	91.49	MOL3	N
ATOM	10796	CA	VAL	H	64	-6.865	-72.787	-23.553	1.00	94.39	MOL3	C
ATOM	10797	CB	VAL	H	64	-6.385	-71.370	-23.201	1.00	93.70	MOL3	C
ATOM	10798	CG1	VAL	H	64	-6.499	-71.140	-21.711	1.00	96.30	MOL3	C
ATOM	10799	CG2	VAL	H	64	-4.954	-71.175	-23.674	1.00	94.32	MOL3	C
ATOM	10800	C	VAL	H	64	-6.748	-72.961	-25.053	1.00	96.79	MOL3	C
ATOM	10801	O	VAL	H	64	-7.037	-72.035	-25.816	1.00	96.76	MOL3	O
ATOM	10802	N	LYS	H	65	-6.308	-74.145	-25.473	1.00	95.31	MOL3	N
ATOM	10803	CA	LYS	H	65	-6.168	-74.411	-26.892	1.00	94.68	MOL3	C
ATOM	10804	CB	LYS	H	65	-5.389	-75.703	-27.120	1.00	97.79	MOL3	C
ATOM	10805	CG	LYS	H	65	-3.917	-75.620	-26.727	1.00	105.41	MOL3	C
ATOM	10806	CD	LYS	H	65	-3.130	-76.823	-27.248	1.00	111.88	MOL3	C
ATOM	10807	CE	LYS	H	65	-3.241	-76.949	-28.776	1.00	117.99	MOL3	C
ATOM	10808	NZ	LYS	H	65	-2.605	-78.188	-29.340	1.00	117.99	MOL3	N
ATOM	10809	C	LYS	H	65	-7.548	-74.499	-27.519	1.00	93.17	MOL3	C
ATOM	10810	O	LYS	H	65	-8.502	-74.954	-26.891	1.00	90.62	MOL3	O
ATOM	10811	N	GLY	H	66	-7.654	-74.041	-28.758	1.00	94.38	MOL3	N
ATOM	10812	CA	GLY	H	66	-8.934	-74.064	-29.441	1.00	97.52	MOL3	C
ATOM	10813	C	GLY	H	66	-9.857	-72.956	-28.961	1.00	98.00	MOL3	C
ATOM	10814	O	GLY	H	66	-10.562	-72.320	-29.757	1.00	100.20	MOL3	O
ATOM	10815	N	ARG	H	67	-9.843	-72.716	-27.652	1.00	91.62	MOL3	N
ATOM	10816	CA	ARG	H	67	-10.680	-71.694	-27.043	1.00	83.37	MOL3	C
ATOM	10817	CB	ARG	H	67	-10.836	-72.011	-25.561	1.00	73.95	MOL3	C
ATOM	10818	CG	ARG	H	67	-10.741	-73.499	-25.317	1.00	73.72	MOL3	C
ATOM	10819	CD	ARG	H	67	-11.347	-73.936	-24.004	1.00	80.67	MOL3	C
ATOM	10820	NE	ARG	H	67	-10.576	-73.505	-22.843	1.00	82.41	MOL3	N
ATOM	10821	CZ	ARG	H	67	-10.706	-72.323	-22.254	1.00	76.67	MOL3	C
ATOM	10822	NH1	ARG	H	67	-9.953	-72.026	-21.200	1.00	69.65	MOL3	N
ATOM	10823	NH2	ARG	H	67	-11.596	-71.449	-22.715	1.00	72.65	MOL3	N
ATOM	10824	C	ARG	H	67	-10.089	-70.305	-27.247	1.00	83.65	MOL3	C
ATOM	10825	O	ARG	H	67	-10.817	-69.342	-27.477	1.00	86.32	MOL3	O
ATOM	10826	N	PHE	H	68	-8.764	-70.212	-27.171	1.00	81.89	MOL3	N
ATOM	10827	CA	PHE	H	68	-8.058	-68.948	-27.352	1.00	81.08	MOL3	C
ATOM	10828	CB	PHE	H	68	-6.939	-68.819	-26.321	1.00	72.92	MOL3	C
ATOM	10829	CG	PHE	H	68	-7.395	-68.365	-24.971	1.00	71.33	MOL3	C
ATOM	10830	CD1	PHE	H	68	-8.714	-68.485	-24.589	1.00	73.75	MOL3	C
ATOM	10831	CD2	PHE	H	68	-6.487	-67.856	-24.061	1.00	72.40	MOL3	C
ATOM	10832	CE1	PHE	H	68	-9.123	-68.109	-23.320	1.00	69.11	MOL3	C
ATOM	10833	CE2	PHE	H	68	-6.887	-67.480	-22.795	1.00	70.70	MOL3	C
ATOM	10834	CZ	PHE	H	68	-8.210	-67.609	-22.425	1.00	69.29	MOL3	C
ATOM	10835	C	PHE	H	68	-7.436	-68.881	-28.743	1.00	84.69	MOL3	C
ATOM	10836	O	PHE	H	68	-7.245	-69.911	-29.399	1.00	84.19	MOL3	O
ATOM	10837	N	THR	H	69	-7.117	-67.665	-29.184	1.00	85.37	MOL3	N
ATOM	10838	CA	THR	H	69	-6.479	-67.449	-30.480	1.00	81.81	MOL3	C
ATOM	10839	CB	THR	H	69	-7.502	-67.428	-31.627	1.00	85.13	MOL3	C
ATOM	10840	OG1	THR	H	69	-7.912	-68.771	-31.927	1.00	89.96	MOL3	O
ATOM	10841	CG2	THR	H	69	-6.892	-66.806	-32.868	1.00	86.41	MOL3	C
ATOM	10842	C	THR	H	69	-5.675	-66.154	-30.484	1.00	78.76	MOL3	C
ATOM	10843	O	THR	H	69	-6.221	-65.056	-30.378	1.00	81.27	MOL3	O
ATOM	10844	N	ILE	H	70	-4.364	-66.309	-30.612	1.00	72.91	MOL3	N
ATOM	10845	CA	ILE	H	70	-3.426	-65.196	-30.602	1.00	70.91	MOL3	C
ATOM	10846	CB	ILE	H	70	-2.139	-65.656	-29.849	1.00	65.12	MOL3	C
ATOM	10847	CG2	ILE	H	70	-1.458	-66.745	-30.625	1.00	66.98	MOL3	C
ATOM	10848	CG1	ILE	H	70	-1.180	-64.495	-29.604	1.00	60.99	MOL3	C
ATOM	10849	CD1	ILE	H	70	0.021	-64.911	-28.791	1.00	42.86	MOL3	C
ATOM	10850	C	ILE	H	70	-3.125	-64.740	-32.035	1.00	71.17	MOL3	C
ATOM	10851	O	ILE	H	70	-2.949	-65.561	-32.926	1.00	72.08	MOL3	O
ATOM	10852	N	SER	H	71	-3.070	-63.431	-32.260	1.00	74.25	MOL3	N
ATOM	10853	CA	SER	H	71	-2.810	-62.913	-33.600	1.00	77.76	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10854	CB	SER	H	71	-4.120	-62.832	-34.368	1.00	84.72	MOL3	C
ATOM	10855	OG	SER	H	71	-5.076	-62.078	-33.634	1.00	92.41	MOL3	O
ATOM	10856	C	SER	H	71	-2.167	-61.537	-33.575	1.00	78.41	MOL3	C
ATOM	10857	O	SER	H	71	-2.275	-60.818	-32.583	1.00	80.38	MOL3	O
ATOM	10858	N	ARG	H	72	-1.517	-61.162	-34.673	1.00	76.70	MOL3	N
ATOM	10859	CA	ARG	H	72	-0.866	-59.857	-34.754	1.00	77.38	MOL3	C
ATOM	10860	CB	ARG	H	72	0.632	-60.005	-34.480	1.00	75.59	MOL3	C
ATOM	10861	CG	ARG	H	72	1.340	-60.977	-35.391	1.00	72.05	MOL3	C
ATOM	10862	CD	ARG	H	72	2.717	-61.268	-34.866	1.00	71.05	MOL3	C
ATOM	10863	NE	ARG	H	72	3.498	-60.050	-34.695	1.00	74.56	MOL3	N
ATOM	10864	CZ	ARG	H	72	4.619	-59.986	-33.984	1.00	78.18	MOL3	C
ATOM	10865	NH1	ARG	H	72	5.084	-61.071	-33.378	1.00	76.57	MOL3	N
ATOM	10866	NH2	ARG	H	72	5.280	-58.841	-33.881	1.00	79.10	MOL3	N
ATOM	10867	C	ARG	H	72	-1.073	-59.198	-36.108	1.00	78.26	MOL3	C
ATOM	10868	O	ARG	H	72	-1.565	-59.838	-37.040	1.00	80.43	MOL3	O
ATOM	10869	N	ASP	H	73	-0.701	-57.922	-36.215	1.00	79.15	MOL3	N
ATOM	10870	CA	ASP	H	73	-0.842	-57.204	-37.478	1.00	83.39	MOL3	C
ATOM	10871	CB	ASP	H	73	-1.724	-55.968	-37.318	1.00	87.45	MOL3	C
ATOM	10872	CG	ASP	H	73	-2.487	-55.623	-38.597	1.00	95.41	MOL3	C
ATOM	10873	OD1	ASP	H	73	-1.859	-55.575	-39.682	1.00	100.81	MOL3	O
ATOM	10874	OD2	ASP	H	73	-3.718	-55.399	-38.520	1.00	97.72	MOL3	O
ATOM	10875	C	ASP	H	73	0.498	-56.785	-38.083	1.00	84.03	MOL3	C
ATOM	10876	O	ASP	H	73	0.688	-56.864	-39.295	1.00	89.76	MOL3	O
ATOM	10877	N	ASN	H	74	1.425	-56.354	-37.240	1.00	83.32	MOL3	N
ATOM	10878	CA	ASN	H	74	2.731	-55.913	-37.701	1.00	83.34	MOL3	C
ATOM	10879	CB	ASN	H	74	3.367	-56.961	-38.605	1.00	84.66	MOL3	C
ATOM	10880	CG	ASN	H	74	3.817	-58.182	-37.827	1.00	89.27	MOL3	C
ATOM	10881	OD1	ASN	H	74	4.520	-59.046	-38.351	1.00	93.50	MOL3	O
ATOM	10882	ND2	ASN	H	74	3.411	-58.257	-36.562	1.00	85.97	MOL3	N
ATOM	10883	C	ASN	H	74	2.581	-54.581	-38.400	1.00	83.52	MOL3	C
ATOM	10884	O	ASN	H	74	3.550	-53.856	-38.603	1.00	89.31	MOL3	O
ATOM	10885	N	ALA	H	75	1.348	-54.272	-38.776	1.00	84.62	MOL3	N
ATOM	10886	CA	ALA	H	75	1.014	-52.986	-39.371	1.00	85.59	MOL3	C
ATOM	10887	CB	ALA	H	75	0.045	-53.148	-40.524	1.00	81.20	MOL3	C
ATOM	10888	C	ALA	H	75	0.299	-52.415	-38.165	1.00	89.52	MOL3	C
ATOM	10889	O	ALA	H	75	-0.260	-53.180	-37.374	1.00	92.00	MOL3	O
ATOM	10890	N	LYS	H	76	0.328	-51.101	-37.989	1.00	91.06	MOL3	N
ATOM	10891	CA	LYS	H	76	-0.327	-50.490	-36.828	1.00	93.31	MOL3	C
ATOM	10892	CB	LYS	H	76	-1.851	-50.634	-36.941	1.00	90.27	MOL3	C
ATOM	10893	CG	LYS	H	76	-2.399	-51.881	-36.289	1.00	82.81	MOL3	C
ATOM	10894	CD	LYS	H	76	-3.886	-52.035	-36.517	1.00	82.37	MOL3	C
ATOM	10895	CE	LYS	H	76	-4.199	-52.498	-37.922	1.00	76.83	MOL3	C
ATOM	10896	NZ	LYS	H	76	-5.476	-53.263	-37.927	1.00	76.47	MOL3	N
ATOM	10897	C	LYS	H	76	0.158	-51.097	-35.490	1.00	92.31	MOL3	C
ATOM	10898	O	LYS	H	76	-0.420	-50.837	-34.432	1.00	94.15	MOL3	O
ATOM	10899	N	ASN	H	77	1.212	-51.912	-35.550	1.00	87.30	MOL3	N
ATOM	10900	CA	ASN	H	77	1.806	-52.529	-34.363	1.00	78.14	MOL3	C
ATOM	10901	CB	ASN	H	77	2.726	-51.536	-33.656	1.00	83.99	MOL3	C
ATOM	10902	CG	ASN	H	77	3.860	-51.068	-34.518	1.00	82.72	MOL3	C
ATOM	10903	OD1	ASN	H	77	4.629	-50.196	-34.108	1.00	80.57	MOL3	O
ATOM	10904	ND2	ASN	H	77	3.986	-51.642	-35.714	1.00	84.30	MOL3	N
ATOM	10905	C	ASN	H	77	0.819	-53.012	-33.314	1.00	70.11	MOL3	C
ATOM	10906	O	ASN	H	77	0.691	-52.382	-32.267	1.00	66.82	MOL3	O
ATOM	10907	N	SER	H	78	0.143	-54.124	-33.550	1.00	60.84	MOL3	N
ATOM	10908	CA	SER	H	78	-0.807	-54.606	-32.554	1.00	57.37	MOL3	C
ATOM	10909	CB	SER	H	78	-2.229	-54.175	-32.905	1.00	56.83	MOL3	C
ATOM	10910	OG	SER	H	78	-2.395	-52.781	-32.769	1.00	66.79	MOL3	O
ATOM	10911	C	SER	H	78	-0.829	-56.101	-32.328	1.00	53.26	MOL3	C
ATOM	10912	O	SER	H	78	-0.669	-56.886	-33.244	1.00	52.52	MOL3	O
ATOM	10913	N	LEU	H	79	-1.060	-56.483	-31.083	1.00	56.04	MOL3	N
ATOM	10914	CA	LEU	H	79	-1.139	-57.886	-30.703	1.00	58.73	MOL3	C
ATOM	10915	CB	LEU	H	79	-0.110	-58.233	-29.627	1.00	63.94	MOL3	C
ATOM	10916	CG	LEU	H	79	-0.303	-59.632	-29.027	1.00	67.03	MOL3	C
ATOM	10917	CD1	LEU	H	79	-0.069	-60.710	-30.095	1.00	61.98	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10918	CD2	LEU	H	79	0.653	-59.813	-27.860	1.00	69.74	MOL3	C
ATOM	10919	C	LEU	H	79	-2.525	-58.127	-30.140	1.00	59.16	MOL3	C
ATOM	10920	O	LEU	H	79	-3.005	-57.355	-29.310	1.00	60.85	MOL3	O
ATOM	10921	N	TYR	H	80	-3.160	-59.207	-30.581	1.00	59.60	MOL3	N
ATOM	10922	CA	TYR	H	80	-4.511	-59.533	-30.129	1.00	58.99	MOL3	C
ATOM	10923	CB	TYR	H	80	-5.503	-59.465	-31.293	1.00	55.82	MOL3	C
ATOM	10924	CG	TYR	H	80	-5.399	-58.235	-32.150	1.00	59.36	MOL3	C
ATOM	10925	CD1	TYR	H	80	-5.652	-56.974	-31.629	1.00	64.60	MOL3	C
ATOM	10926	CE1	TYR	H	80	-5.537	-55.843	-32.416	1.00	65.64	MOL3	C
ATOM	10927	CD2	TYR	H	80	-5.030	-58.329	-33.481	1.00	61.01	MOL3	C
ATOM	10928	CE2	TYR	H	80	-4.910	-57.204	-34.271	1.00	59.14	MOL3	C
ATOM	10929	CZ	TYR	H	80	-5.165	-55.971	-33.735	1.00	60.95	MOL3	C
ATOM	10930	OH	TYR	H	80	-5.060	-54.859	-34.522	1.00	67.08	MOL3	O
ATOM	10931	C	TYR	H	80	-4.644	-60.919	-29.513	1.00	60.27	MOL3	C
ATOM	10932	O	TYR	H	80	-3.871	-61.833	-29.806	1.00	60.76	MOL3	O
ATOM	10933	N	LEU	H	81	-5.644	-61.063	-28.655	1.00	58.53	MOL3	N
ATOM	10934	CA	LEU	H	81	-5.931	-62.346	-28.044	1.00	59.99	MOL3	C
ATOM	10935	CB	LEU	H	81	-5.462	-62.403	-26.595	1.00	50.64	MOL3	C
ATOM	10936	CG	LEU	H	81	-5.792	-63.749	-25.952	1.00	44.10	MOL3	C
ATOM	10937	CD1	LEU	H	81	-4.999	-64.816	-26.630	1.00	40.53	MOL3	C
ATOM	10938	CD2	LEU	H	81	-5.475	-63.740	-24.477	1.00	47.90	MOL3	C
ATOM	10939	C	LEU	H	81	-7.438	-62.530	-28.110	1.00	65.84	MOL3	C
ATOM	10940	O	LEU	H	81	-8.195	-61.711	-27.584	1.00	68.73	MOL3	O
ATOM	10941	N	GLN	H	82	-7.866	-63.592	-28.785	1.00	71.66	MOL3	N
ATOM	10942	CA	GLN	H	82	-9.286	-63.898	-28.925	1.00	76.01	MOL3	C
ATOM	10943	CB	GLN	H	82	-9.612	-64.394	-30.326	1.00	77.87	MOL3	C
ATOM	10944	CG	GLN	H	82	-11.094	-64.592	-30.554	1.00	79.24	MOL3	C
ATOM	10945	CD	GLN	H	82	-11.871	-63.287	-30.477	1.00	82.83	MOL3	C
ATOM	10946	OE1	GLN	H	82	-11.562	-62.321	-31.183	1.00	79.11	MOL3	O
ATOM	10947	NE2	GLN	H	82	-12.891	-63.255	-29.623	1.00	82.97	MOL3	N
ATOM	10948	C	GLN	H	82	-9.655	-64.982	-27.940	1.00	78.00	MOL3	C
ATOM	10949	O	GLN	H	82	-9.270	-66.141	-28.104	1.00	75.52	MOL3	O
ATOM	10950	N	MET	H	83	-10.409	-64.603	-26.919	1.00	81.38	MOL3	N
ATOM	10951	CA	MET	H	83	-10.813	-65.556	-25.904	1.00	83.45	MOL3	C
ATOM	10952	CB	MET	H	83	-10.563	-64.971	-24.517	1.00	83.00	MOL3	C
ATOM	10953	CG	MET	H	83	-9.147	-64.454	-24.314	1.00	73.51	MOL3	C
ATOM	10954	SD	MET	H	83	-8.778	-64.189	-22.577	1.00	72.08	MOL3	S
ATOM	10955	CE	MET	H	83	-9.688	-62.657	-22.254	1.00	75.89	MOL3	C
ATOM	10956	C	MET	H	83	-12.271	-65.983	-26.062	1.00	86.73	MOL3	C
ATOM	10957	O	MET	H	83	-13.200	-65.215	-25.790	1.00	89.34	MOL3	O
ATOM	10958	N	ASN	H	84	-12.450	-67.219	-26.522	1.00	87.09	MOL3	N
ATOM	10959	CA	ASN	H	84	-13.773	-67.799	-26.738	1.00	88.83	MOL3	C
ATOM	10960	CB	ASN	H	84	-13.856	-68.522	-28.095	1.00	87.32	MOL3	C
ATOM	10961	CG	ASN	H	84	-13.628	-67.600	-29.289	1.00	90.12	MOL3	C
ATOM	10962	OD1	ASN	H	84	-14.228	-66.531	-29.390	1.00	90.38	MOL3	O
ATOM	10963	ND2	ASN	H	84	-12.770	-68.030	-30.215	1.00	89.58	MOL3	N
ATOM	10964	C	ASN	H	84	-14.050	-68.823	-25.645	1.00	90.92	MOL3	C
ATOM	10965	O	ASN	H	84	-13.127	-69.347	-25.022	1.00	91.60	MOL3	O
ATOM	10966	N	SER	H	85	-15.325	-69.116	-25.422	1.00	92.60	MOL3	N
ATOM	10967	CA	SER	H	85	-15.709	-70.103	-24.419	1.00	92.77	MOL3	C
ATOM	10968	CB	SER	H	85	-15.327	-71.503	-24.898	1.00	93.17	MOL3	C
ATOM	10969	OG	SER	H	85	-15.907	-71.784	-26.162	1.00	95.37	MOL3	O
ATOM	10970	C	SER	H	85	-15.022	-69.832	-23.094	1.00	91.07	MOL3	C
ATOM	10971	O	SER	H	85	-14.607	-70.755	-22.399	1.00	92.03	MOL3	O
ATOM	10972	N	LEU	H	86	-14.907	-68.562	-22.745	1.00	89.75	MOL3	N
ATOM	10973	CA	LEU	H	86	-14.245	-68.194	-21.512	1.00	89.08	MOL3	C
ATOM	10974	CB	LEU	H	86	-14.381	-66.691	-21.274	1.00	85.61	MOL3	C
ATOM	10975	CG	LEU	H	86	-13.384	-65.865	-22.086	1.00	78.91	MOL3	C
ATOM	10976	CD1	LEU	H	86	-13.579	-64.384	-21.829	1.00	79.31	MOL3	C
ATOM	10977	CD2	LEU	H	86	-11.980	-66.292	-21.703	1.00	74.10	MOL3	C
ATOM	10978	C	LEU	H	86	-14.725	-68.960	-20.295	1.00	89.90	MOL3	C
ATOM	10979	O	LEU	H	86	-15.843	-68.768	-19.834	1.00	93.13	MOL3	O
ATOM	10980	N	ARG	H	87	-13.880	-69.847	-19.783	1.00	92.08	MOL3	N
ATOM	10981	CA	ARG	H	87	-14.232	-70.594	-18.584	1.00	96.78	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	10982	CB	ARG	H	87	-13.291	-71.787	-18.383	1.00102.37	MOL3	C
ATOM	10983	CG	ARG	H	87	-13.471	-72.934	-19.379	1.00112.26	MOL3	C
ATOM	10984	CD	ARG	H	87	-12.508	-74.078	-19.059	1.00120.23	MOL3	C
ATOM	10985	NE	ARG	H	87	-12.595	-75.188	-20.006	1.00131.15	MOL3	N
ATOM	10986	CZ	ARG	H	87	-11.737	-76.205	-20.039	1.00136.65	MOL3	C
ATOM	10987	NH1	ARG	H	87	-10.728	-76.251	-19.178	1.00139.89	MOL3	N
ATOM	10988	NH2	ARG	H	87	-11.882	-77.173	-20.934	1.00139.76	MOL3	N
ATOM	10989	C	ARG	H	87	-14.098	-69.607	-17.419	1.00 96.43	MOL3	C
ATOM	10990	O	ARG	H	87	-13.832	-68.430	-17.635	1.00 96.71	MOL3	O
ATOM	10991	N	ALA	H	88	-14.280	-70.071	-16.190	1.00 96.62	MOL3	N
ATOM	10992	CA	ALA	H	88	-14.184	-69.183	-15.038	1.00 95.02	MOL3	C
ATOM	10993	CB	ALA	H	88	-15.168	-69.617	-13.963	1.00100.74	MOL3	C
ATOM	10994	C	ALA	H	88	-12.777	-69.156	-14.472	1.00 92.76	MOL3	C
ATOM	10995	O	ALA	H	88	-12.364	-68.189	-13.845	1.00 90.60	MOL3	O
ATOM	10996	N	GLU	H	89	-12.045	-70.234	-14.693	1.00 92.27	MOL3	N
ATOM	10997	CA	GLU	H	89	-10.687	-70.326	-14.202	1.00 93.53	MOL3	C
ATOM	10998	CB	GLU	H	89	-10.242	-71.793	-14.182	1.00101.54	MOL3	C
ATOM	10999	CG	GLU	H	89	-10.041	-72.426	-15.559	1.00113.37	MOL3	C
ATOM	11000	CD	GLU	H	89	-10.782	-73.752	-15.724	1.00120.39	MOL3	C
ATOM	11001	OE1	GLU	H	89	-10.482	-74.489	-16.694	1.00121.99	MOL3	O
ATOM	11002	OE2	GLU	H	89	-11.670	-74.050	-14.890	1.00122.54	MOL3	O
ATOM	11003	C	GLU	H	89	-9.758	-69.493	-15.083	1.00 89.20	MOL3	C
ATOM	11004	O	GLU	H	89	-8.536	-69.547	-14.944	1.00 89.55	MOL3	O
ATOM	11005	N	ASP	H	90	-10.335	-68.715	-15.990	1.00 82.95	MOL3	N
ATOM	11006	CA	ASP	H	90	-9.517	-67.888	-16.867	1.00 80.12	MOL3	C
ATOM	11007	CB	ASP	H	90	-10.044	-67.903	-18.306	1.00 80.37	MOL3	C
ATOM	11008	CG	ASP	H	90	-9.933	-69.272	-18.969	1.00 82.38	MOL3	C
ATOM	11009	OD1	ASP	H	90	-8.988	-70.036	-18.662	1.00 79.57	MOL3	O
ATOM	11010	OD2	ASP	H	90	-10.794	-69.575	-19.823	1.00 83.84	MOL3	O
ATOM	11011	C	ASP	H	90	-9.427	-66.451	-16.384	1.00 78.47	MOL3	C
ATOM	11012	O	ASP	H	90	-8.768	-65.624	-17.011	1.00 78.94	MOL3	O
ATOM	11013	N	THR	H	91	-10.088	-66.159	-15.268	1.00 76.99	MOL3	N
ATOM	11014	CA	THR	H	91	-10.083	-64.820	-14.685	1.00 72.56	MOL3	C
ATOM	11015	CB	THR	H	91	-10.919	-64.779	-13.414	1.00 68.77	MOL3	C
ATOM	11016	OG1	THR	H	91	-12.197	-65.366	-13.658	1.00 66.56	MOL3	O
ATOM	11017	CG2	THR	H	91	-11.113	-63.356	-12.973	1.00 78.03	MOL3	C
ATOM	11018	C	THR	H	91	-8.665	-64.444	-14.295	1.00 71.90	MOL3	C
ATOM	11019	O	THR	H	91	-7.977	-65.248	-13.670	1.00 74.87	MOL3	O
ATOM	11020	N	ALA	H	92	-8.236	-63.233	-14.649	1.00 70.95	MOL3	N
ATOM	11021	CA	ALA	H	92	-6.886	-62.769	-14.318	1.00 71.24	MOL3	C
ATOM	11022	CB	ALA	H	92	-5.853	-63.826	-14.695	1.00 70.68	MOL3	C
ATOM	11023	C	ALA	H	92	-6.533	-61.467	-15.011	1.00 69.69	MOL3	C
ATOM	11024	O	ALA	H	92	-7.360	-60.858	-15.701	1.00 71.59	MOL3	O
ATOM	11025	N	VAL	H	93	-5.292	-61.043	-14.808	1.00 64.42	MOL3	N
ATOM	11026	CA	VAL	H	93	-4.786	-59.838	-15.432	1.00 61.96	MOL3	C
ATOM	11027	CB	VAL	H	93	-3.846	-59.099	-14.520	1.00 57.64	MOL3	C
ATOM	11028	CG1	VAL	H	93	-3.438	-57.804	-15.164	1.00 59.76	MOL3	C
ATOM	11029	CG2	VAL	H	93	-4.508	-58.870	-13.192	1.00 66.11	MOL3	C
ATOM	11030	C	VAL	H	93	-3.978	-60.333	-16.613	1.00 63.36	MOL3	C
ATOM	11031	O	VAL	H	93	-3.042	-61.113	-16.443	1.00 64.35	MOL3	O
ATOM	11032	N	TYR	H	94	-4.343	-59.898	-17.810	1.00 60.17	MOL3	N
ATOM	11033	CA	TYR	H	94	-3.636	-60.336	-18.988	1.00 56.31	MOL3	C
ATOM	11034	CB	TYR	H	94	-4.621	-60.527	-20.151	1.00 60.66	MOL3	C
ATOM	11035	CG	TYR	H	94	-5.413	-61.812	-20.006	1.00 62.05	MOL3	C
ATOM	11036	CD1	TYR	H	94	-6.233	-62.017	-18.902	1.00 62.04	MOL3	C
ATOM	11037	CE1	TYR	H	94	-6.836	-63.237	-18.674	1.00 64.76	MOL3	C
ATOM	11038	CD2	TYR	H	94	-5.235	-62.871	-20.896	1.00 59.57	MOL3	C
ATOM	11039	CE2	TYR	H	94	-5.836	-64.100	-20.674	1.00 60.07	MOL3	C
ATOM	11040	CZ	TYR	H	94	-6.628	-64.275	-19.554	1.00 64.86	MOL3	C
ATOM	11041	OH	TYR	H	94	-7.164	-65.503	-19.265	1.00 66.73	MOL3	O
ATOM	11042	C	TYR	H	94	-2.543	-59.355	-19.334	1.00 56.03	MOL3	C
ATOM	11043	O	TYR	H	94	-2.800	-58.162	-19.488	1.00 58.70	MOL3	O
ATOM	11044	N	TYR	H	95	-1.321	-59.881	-19.431	1.00 51.55	MOL3	N
ATOM	11045	CA	TYR	H	95	-0.137	-59.101	-19.744	1.00 42.22	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11046	CB	TYR	H	95	0.966	-59.419	-18.755	1.00	38.82	MOL3	C
ATOM	11047	CG	TYR	H	95	0.683	-58.970	-17.355	1.00	39.30	MOL3	C
ATOM	11048	CD1	TYR	H	95	0.518	-59.893	-16.326	1.00	37.89	MOL3	C
ATOM	11049	CE1	TYR	H	95	0.306	-59.476	-15.026	1.00	34.23	MOL3	C
ATOM	11050	CD2	TYR	H	95	0.621	-57.619	-17.047	1.00	34.46	MOL3	C
ATOM	11051	CE2	TYR	H	95	0.412	-57.199	-15.761	1.00	36.30	MOL3	C
ATOM	11052	CZ	TYR	H	95	0.256	-58.127	-14.750	1.00	34.68	MOL3	C
ATOM	11053	OH	TYR	H	95	0.062	-57.687	-13.461	1.00	39.66	MOL3	O
ATOM	11054	C	TYR	H	95	0.387	-59.354	-21.141	1.00	44.72	MOL3	C
ATOM	11055	O	TYR	H	95	0.356	-60.478	-21.658	1.00	46.91	MOL3	O
ATOM	11056	N	CYS	H	96	0.893	-58.288	-21.734	1.00	43.61	MOL3	N
ATOM	11057	CA	CYS	H	96	1.454	-58.327	-23.064	1.00	45.33	MOL3	C
ATOM	11058	C	CYS	H	96	2.967	-58.281	-22.830	1.00	43.95	MOL3	C
ATOM	11059	O	CYS	H	96	3.444	-57.446	-22.060	1.00	48.14	MOL3	O
ATOM	11060	CB	CYS	H	96	0.949	-57.104	-23.794	1.00	43.81	MOL3	C
ATOM	11061	SG	CYS	H	96	1.413	-57.008	-25.520	1.00	63.60	MOL3	S
ATOM	11062	N	ALA	H	97	3.731	-59.172	-23.455	1.00	39.34	MOL3	N
ATOM	11063	CA	ALA	H	97	5.169	-59.161	-23.208	1.00	39.98	MOL3	C
ATOM	11064	CB	ALA	H	97	5.505	-60.193	-22.169	1.00	41.47	MOL3	C
ATOM	11065	C	ALA	H	97	6.040	-59.369	-24.428	1.00	43.99	MOL3	C
ATOM	11066	O	ALA	H	97	5.839	-60.323	-25.185	1.00	49.59	MOL3	O
ATOM	11067	N	SER	H	98	7.029	-58.490	-24.599	1.00	45.50	MOL3	N
ATOM	11068	CA	SER	H	98	7.949	-58.582	-25.739	1.00	48.71	MOL3	C
ATOM	11069	CB	SER	H	98	8.040	-57.237	-26.455	1.00	47.09	MOL3	C
ATOM	11070	OG	SER	H	98	8.883	-56.349	-25.738	1.00	52.41	MOL3	O
ATOM	11071	C	SER	H	98	9.363	-59.014	-25.327	1.00	48.46	MOL3	C
ATOM	11072	O	SER	H	98	9.743	-58.927	-24.163	1.00	52.57	MOL3	O
ATOM	11073	N	PRO	H	99	10.160	-59.496	-26.284	1.00	46.43	MOL3	N
ATOM	11074	CD	PRO	H	99	9.820	-59.832	-27.673	1.00	45.79	MOL3	C
ATOM	11075	CA	PRO	H	99	11.522	-59.923	-25.968	1.00	47.57	MOL3	C
ATOM	11076	CB	PRO	H	99	11.836	-60.899	-27.084	1.00	47.27	MOL3	C
ATOM	11077	CG	PRO	H	99	11.155	-60.268	-28.228	1.00	45.69	MOL3	C
ATOM	11078	C	PRO	H	99	12.439	-58.718	-26.008	1.00	48.22	MOL3	C
ATOM	11079	O	PRO	H	99	12.025	-57.635	-26.412	1.00	46.92	MOL3	O
ATOM	11080	N	PRO	H	100	13.703	-58.899	-25.609	1.00	48.79	MOL3	N
ATOM	11081	CD	PRO	H	100	14.264	-60.173	-25.141	1.00	50.49	MOL3	C
ATOM	11082	CA	PRO	H	100	14.723	-57.852	-25.579	1.00	47.39	MOL3	C
ATOM	11083	CB	PRO	H	100	15.859	-58.518	-24.825	1.00	46.63	MOL3	C
ATOM	11084	CG	PRO	H	100	15.738	-59.919	-25.254	1.00	49.38	MOL3	C
ATOM	11085	C	PRO	H	100	15.133	-57.318	-26.954	1.00	48.05	MOL3	C
ATOM	11086	O	PRO	H	100	15.271	-58.067	-27.914	1.00	46.59	MOL3	O
ATOM	11087	N	GLN	H	101	15.311	-56.000	-27.015	1.00	52.43	MOL3	N
ATOM	11088	CA	GLN	H	101	15.673	-55.276	-28.222	1.00	47.42	MOL3	C
ATOM	11089	CB	GLN	H	101	15.685	-53.763	-27.932	1.00	50.83	MOL3	C
ATOM	11090	CG	GLN	H	101	14.380	-53.185	-27.330	1.00	56.39	MOL3	C
ATOM	11091	CD	GLN	H	101	14.554	-52.571	-25.905	1.00	67.61	MOL3	C
ATOM	11092	OE1	GLN	H	101	14.920	-53.261	-24.932	1.00	59.74	MOL3	O
ATOM	11093	NE2	GLN	H	101	14.282	-51.268	-25.790	1.00	69.40	MOL3	N
ATOM	11094	C	GLN	H	101	17.025	-55.755	-28.760	1.00	50.03	MOL3	C
ATOM	11095	O	GLN	H	101	17.267	-55.677	-29.967	1.00	48.86	MOL3	O
ATOM	11096	N	TYR	H	102	17.923	-56.221	-27.887	1.00	50.25	MOL3	N
ATOM	11097	CA	TYR	H	102	19.182	-56.772	-28.394	1.00	55.53	MOL3	C
ATOM	11098	CB	TYR	H	102	20.284	-56.770	-27.336	1.00	46.94	MOL3	C
ATOM	11099	CG	TYR	H	102	19.803	-56.769	-25.913	1.00	55.59	MOL3	C
ATOM	11100	CD1	TYR	H	102	19.351	-57.930	-25.316	1.00	69.84	MOL3	C
ATOM	11101	CE1	TYR	H	102	18.923	-57.950	-23.989	1.00	67.91	MOL3	C
ATOM	11102	CD2	TYR	H	102	19.816	-55.617	-25.154	1.00	53.29	MOL3	C
ATOM	11103	CE2	TYR	H	102	19.390	-55.623	-23.830	1.00	62.04	MOL3	C
ATOM	11104	CZ	TYR	H	102	18.944	-56.796	-23.256	1.00	63.06	MOL3	C
ATOM	11105	OH	TYR	H	102	18.500	-56.827	-21.958	1.00	65.21	MOL3	O
ATOM	11106	C	TYR	H	102	18.831	-58.200	-28.834	1.00	60.02	MOL3	C
ATOM	11107	O	TYR	H	102	17.725	-58.442	-29.325	1.00	64.79	MOL3	O
ATOM	11108	N	TYR	H	103	19.729	-59.156	-28.691	1.00	57.42	MOL3	N
ATOM	11109	CA	TYR	H	103	19.374	-60.518	-29.114	1.00	60.46	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11110	CB	TYR	H	103	18.664	-61.242	-27.961	1.00	45.82	MOL3	C
ATOM	11111	CG	TYR	H	103	19.618	-61.651	-26.880	1.00	39.77	MOL3	C
ATOM	11112	CD1	TYR	H	103	20.638	-62.551	-27.146	1.00	36.24	MOL3	C
ATOM	11113	CE1	TYR	H	103	21.625	-62.806	-26.220	1.00	34.88	MOL3	C
ATOM	11114	CD2	TYR	H	103	19.599	-61.029	-25.642	1.00	33.49	MOL3	C
ATOM	11115	CE2	TYR	H	103	20.582	-61.275	-24.704	1.00	34.89	MOL3	C
ATOM	11116	CZ	TYR	H	103	21.597	-62.163	-25.002	1.00	37.47	MOL3	C
ATOM	11117	OH	TYR	H	103	22.610	-62.383	-24.096	1.00	40.59	MOL3	O
ATOM	11118	C	TYR	H	103	18.557	-60.772	-30.413	1.00	62.77	MOL3	C
ATOM	11119	O	TYR	H	103	19.063	-60.708	-31.538	1.00	64.32	MOL3	O
ATOM	11120	N	GLU	H	104	17.281	-61.067	-30.219	1.00	68.52	MOL3	N
ATOM	11121	CA	GLU	H	104	16.352	-61.445	-31.280	1.00	73.65	MOL3	C
ATOM	11122	CB	GLU	H	104	15.765	-60.284	-32.065	1.00	75.49	MOL3	C
ATOM	11123	CG	GLU	H	104	14.287	-60.576	-32.462	1.00	79.39	MOL3	C
ATOM	11124	CD	GLU	H	104	14.026	-61.971	-33.098	1.00	81.53	MOL3	C
ATOM	11125	OE1	GLU	H	104	14.326	-62.152	-34.298	1.00	83.61	MOL3	O
ATOM	11126	OE2	GLU	H	104	13.504	-62.885	-32.412	1.00	71.90	MOL3	O
ATOM	11127	C	GLU	H	104	16.970	-62.390	-32.255	1.00	77.87	MOL3	C
ATOM	11128	O	GLU	H	104	17.094	-63.566	-31.945	1.00	82.18	MOL3	O
ATOM	11129	N	GLY	H	105	17.356	-61.883	-33.426	1.00	83.29	MOL3	N
ATOM	11130	CA	GLY	H	105	17.925	-62.738	-34.461	1.00	91.56	MOL3	C
ATOM	11131	C	GLY	H	105	16.860	-63.698	-35.008	1.00	94.92	MOL3	C
ATOM	11132	O	GLY	H	105	16.944	-64.140	-36.159	1.00	98.10	MOL3	O
ATOM	11133	N	SER	H	106	15.865	-63.993	-34.157	1.00	91.38	MOL3	N
ATOM	11134	CA	SER	H	106	14.724	-64.883	-34.406	1.00	79.67	MOL3	C
ATOM	11135	CB	SER	H	106	14.992	-65.830	-35.568	1.00	82.97	MOL3	C
ATOM	11136	OG	SER	H	106	15.976	-66.790	-35.220	1.00	87.86	MOL3	O
ATOM	11137	C	SER	H	106	14.516	-65.709	-33.135	1.00	76.13	MOL3	C
ATOM	11138	O	SER	H	106	13.424	-66.194	-32.874	1.00	74.49	MOL3	O
ATOM	11139	N	ILE	H	107	15.595	-65.862	-32.368	1.00	70.79	MOL3	N
ATOM	11140	CA	ILE	H	107	15.648	-66.599	-31.103	1.00	65.83	MOL3	C
ATOM	11141	CB	ILE	H	107	16.545	-65.844	-30.114	1.00	57.68	MOL3	C
ATOM	11142	CG2	ILE	H	107	16.497	-66.513	-28.753	1.00	52.02	MOL3	C
ATOM	11143	CG1	ILE	H	107	17.965	-65.767	-30.680	1.00	53.71	MOL3	C
ATOM	11144	CD1	ILE	H	107	18.924	-64.891	-29.897	1.00	51.07	MOL3	C
ATOM	11145	C	ILE	H	107	14.305	-66.864	-30.423	1.00	71.45	MOL3	C
ATOM	11146	O	ILE	H	107	13.680	-65.946	-29.897	1.00	75.63	MOL3	O
ATOM	11147	N	TYR	H	108	13.877	-68.122	-30.395	1.00	72.70	MOL3	N
ATOM	11148	CA	TYR	H	108	12.590	-68.453	-29.788	1.00	70.96	MOL3	C
ATOM	11149	CB	TYR	H	108	12.095	-69.821	-30.276	1.00	75.57	MOL3	C
ATOM	11150	CG	TYR	H	108	10.795	-70.266	-29.633	1.00	76.72	MOL3	C
ATOM	11151	CD1	TYR	H	108	9.587	-69.672	-29.968	1.00	79.87	MOL3	C
ATOM	11152	CE1	TYR	H	108	8.398	-70.052	-29.342	1.00	84.10	MOL3	C
ATOM	11153	CD2	TYR	H	108	10.785	-71.254	-28.658	1.00	79.63	MOL3	C
ATOM	11154	CE2	TYR	H	108	9.607	-71.638	-28.026	1.00	84.89	MOL3	C
ATOM	11155	CZ	TYR	H	108	8.418	-71.033	-28.367	1.00	85.99	MOL3	C
ATOM	11156	OH	TYR	H	108	7.262	-71.382	-27.698	1.00	85.76	MOL3	O
ATOM	11157	C	TYR	H	108	12.582	-68.447	-28.269	1.00	66.39	MOL3	C
ATOM	11158	O	TYR	H	108	11.756	-67.763	-27.662	1.00	66.11	MOL3	O
ATOM	11159	N	ARG	H	109	13.501	-69.210	-27.672	1.00	60.68	MOL3	N
ATOM	11160	CA	ARG	H	109	13.622	-69.367	-26.212	1.00	57.47	MOL3	C
ATOM	11161	CB	ARG	H	109	14.825	-70.256	-25.877	1.00	64.22	MOL3	C
ATOM	11162	CG	ARG	H	109	14.804	-71.664	-26.449	1.00	77.26	MOL3	C
ATOM	11163	CD	ARG	H	109	13.703	-72.498	-25.832	1.00	86.22	MOL3	C
ATOM	11164	NE	ARG	H	109	13.930	-73.935	-25.963	1.00	97.73	MOL3	N
ATOM	11165	CZ	ARG	H	109	13.978	-74.596	-27.117	1.00	105.94	MOL3	C
ATOM	11166	NH1	ARG	H	109	13.820	-73.958	-28.272	1.00	107.40	MOL3	N
ATOM	11167	NH2	ARG	H	109	14.172	-75.908	-27.113	1.00	113.45	MOL3	N
ATOM	11168	C	ARG	H	109	13.763	-68.076	-25.405	1.00	53.74	MOL3	C
ATOM	11169	O	ARG	H	109	13.870	-68.107	-24.178	1.00	50.39	MOL3	O
ATOM	11170	N	LEU	H	110	13.764	-66.950	-26.104	1.00	52.94	MOL3	N
ATOM	11171	CA	LEU	H	110	13.920	-65.620	-25.516	1.00	44.20	MOL3	C
ATOM	11172	CB	LEU	H	110	13.718	-64.580	-26.611	1.00	44.89	MOL3	C
ATOM	11173	CG	LEU	H	110	14.757	-63.476	-26.691	1.00	42.03	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11174	CD1	LEU	H	110	15.903	-63.797	-25.744	1.00	44.64	MOL3	C
ATOM	11175	CD2	LEU	H	110	15.237	-63.363	-28.118	1.00	27.69	MOL3	C
ATOM	11176	C	LEU	H	110	12.999	-65.288	-24.367	1.00	40.38	MOL3	C
ATOM	11177	O	LEU	H	110	11.781	-65.399	-24.491	1.00	43.05	MOL3	O
ATOM	11178	N	TRP	H	111	13.580	-64.844	-23.259	1.00	41.21	MOL3	N
ATOM	11179	CA	TRP	H	111	12.796	-64.463	-22.081	1.00	46.91	MOL3	C
ATOM	11180	CB	TRP	H	111	13.723	-64.172	-20.927	1.00	44.02	MOL3	C
ATOM	11181	CG	TRP	H	111	14.741	-63.205	-21.304	1.00	44.21	MOL3	C
ATOM	11182	CD2	TRP	H	111	15.962	-63.484	-21.974	1.00	46.92	MOL3	C
ATOM	11183	CE2	TRP	H	111	16.635	-62.274	-22.132	1.00	47.79	MOL3	C
ATOM	11184	CE3	TRP	H	111	16.554	-64.646	-22.454	1.00	56.76	MOL3	C
ATOM	11185	CD1	TRP	H	111	14.713	-61.878	-21.092	1.00	51.48	MOL3	C
ATOM	11186	NE1	TRP	H	111	15.854	-61.298	-21.584	1.00	55.01	MOL3	N
ATOM	11187	CZ2	TRP	H	111	17.865	-62.190	-22.744	1.00	57.38	MOL3	C
ATOM	11188	CZ3	TRP	H	111	17.783	-64.560	-23.063	1.00	56.79	MOL3	C
ATOM	11189	CH2	TRP	H	111	18.424	-63.349	-23.202	1.00	57.16	MOL3	C
ATOM	11190	C	TRP	H	111	12.101	-63.190	-22.460	1.00	47.34	MOL3	C
ATOM	11191	O	TRP	H	111	12.016	-62.875	-23.645	1.00	58.35	MOL3	O
ATOM	11192	N	PHE	H	112	11.576	-62.454	-21.488	1.00	42.90	MOL3	N
ATOM	11193	CA	PHE	H	112	10.974	-61.191	-21.876	1.00	50.92	MOL3	C
ATOM	11194	CB	PHE	H	112	9.540	-61.348	-22.475	1.00	59.93	MOL3	C
ATOM	11195	CG	PHE	H	112	8.655	-62.430	-21.854	1.00	57.20	MOL3	C
ATOM	11196	CD1	PHE	H	112	7.995	-63.347	-22.687	1.00	51.87	MOL3	C
ATOM	11197	CD2	PHE	H	112	8.422	-62.496	-20.500	1.00	52.26	MOL3	C
ATOM	11198	CE1	PHE	H	112	7.135	-64.297	-22.191	1.00	34.50	MOL3	C
ATOM	11199	CE2	PHE	H	112	7.551	-63.459	-20.001	1.00	55.87	MOL3	C
ATOM	11200	CZ	PHE	H	112	6.911	-64.359	-20.860	1.00	43.50	MOL3	C
ATOM	11201	C	PHE	H	112	10.988	-60.016	-20.927	1.00	48.47	MOL3	C
ATOM	11202	O	PHE	H	112	10.466	-60.088	-19.814	1.00	42.85	MOL3	O
ATOM	11203	N	ALA	H	113	11.630	-58.941	-21.397	1.00	47.44	MOL3	N
ATOM	11204	CA	ALA	H	113	11.699	-57.677	-20.674	1.00	44.75	MOL3	C
ATOM	11205	CB	ALA	H	113	12.964	-56.955	-20.977	1.00	43.44	MOL3	C
ATOM	11206	C	ALA	H	113	10.540	-56.950	-21.298	1.00	45.85	MOL3	C
ATOM	11207	O	ALA	H	113	10.031	-57.385	-22.323	1.00	53.70	MOL3	O
ATOM	11208	N	HIS	H	114	10.101	-55.856	-20.706	1.00	44.73	MOL3	N
ATOM	11209	CA	HIS	H	114	8.965	-55.140	-21.275	1.00	43.87	MOL3	C
ATOM	11210	CB	HIS	H	114	9.236	-54.796	-22.734	1.00	47.49	MOL3	C
ATOM	11211	CG	HIS	H	114	10.571	-54.178	-22.965	1.00	47.48	MOL3	C
ATOM	11212	CD2	HIS	H	114	11.557	-54.489	-23.837	1.00	47.60	MOL3	C
ATOM	11213	ND1	HIS	H	114	11.019	-53.093	-22.241	1.00	52.82	MOL3	N
ATOM	11214	CE1	HIS	H	114	12.229	-52.764	-22.657	1.00	59.40	MOL3	C
ATOM	11215	NE2	HIS	H	114	12.579	-53.595	-23.625	1.00	58.20	MOL3	N
ATOM	11216	C	HIS	H	114	7.645	-55.916	-21.195	1.00	40.81	MOL3	C
ATOM	11217	O	HIS	H	114	7.375	-56.835	-21.978	1.00	35.72	MOL3	O
ATOM	11218	N	TRP	H	115	6.832	-55.519	-20.228	1.00	41.79	MOL3	N
ATOM	11219	CA	TRP	H	115	5.514	-56.086	-19.994	1.00	41.86	MOL3	C
ATOM	11220	CB	TRP	H	115	5.393	-56.663	-18.576	1.00	38.41	MOL3	C
ATOM	11221	CG	TRP	H	115	6.217	-57.853	-18.289	1.00	37.34	MOL3	C
ATOM	11222	CD2	TRP	H	115	5.746	-59.155	-17.909	1.00	43.06	MOL3	C
ATOM	11223	CE2	TRP	H	115	6.880	-59.982	-17.760	1.00	40.84	MOL3	C
ATOM	11224	CE3	TRP	H	115	4.477	-59.703	-17.688	1.00	39.73	MOL3	C
ATOM	11225	CD1	TRP	H	115	7.566	-57.939	-18.346	1.00	39.27	MOL3	C
ATOM	11226	NE1	TRP	H	115	7.980	-59.215	-18.032	1.00	41.55	MOL3	N
ATOM	11227	CZ2	TRP	H	115	6.786	-61.326	-17.400	1.00	35.42	MOL3	C
ATOM	11228	CZ3	TRP	H	115	4.386	-61.033	-17.335	1.00	37.87	MOL3	C
ATOM	11229	CH2	TRP	H	115	5.536	-61.831	-17.193	1.00	37.55	MOL3	C
ATOM	11230	C	TRP	H	115	4.580	-54.878	-20.081	1.00	45.00	MOL3	C
ATOM	11231	O	TRP	H	115	4.990	-53.743	-19.831	1.00	45.07	MOL3	O
ATOM	11232	N	GLY	H	116	3.324	-55.108	-20.427	1.00	43.82	MOL3	N
ATOM	11233	CA	GLY	H	116	2.408	-53.992	-20.479	1.00	47.62	MOL3	C
ATOM	11234	C	GLY	H	116	1.920	-53.792	-19.064	1.00	50.34	MOL3	C
ATOM	11235	O	GLY	H	116	2.449	-54.402	-18.154	1.00	45.88	MOL3	O
ATOM	11236	N	GLN	H	117	0.928	-52.937	-18.857	1.00	58.66	MOL3	N
ATOM	11237	CA	GLN	H	117	0.401	-52.751	-17.514	1.00	61.51	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11238	CB	GLN	H	117	-0.203	-51.349	-17.354	1.00	70.43	MOL3	C
ATOM	11239	CG	GLN	H	117	-0.659	-50.680	-18.656	1.00	87.36	MOL3	C
ATOM	11240	CD	GLN	H	117	-1.991	-51.204	-19.170	1.00	92.80	MOL3	C
ATOM	11241	OE1	GLN	H	117	-3.021	-51.085	-18.499	1.00	95.16	MOL3	O
ATOM	11242	NE2	GLN	H	117	-1.978	-51.780	-20.368	1.00	92.67	MOL3	N
ATOM	11243	C	GLN	H	117	-0.640	-53.844	-17.261	1.00	59.17	MOL3	C
ATOM	11244	O	GLN	H	117	-0.942	-54.172	-16.121	1.00	60.38	MOL3	O
ATOM	11245	N	GLY	H	118	-1.172	-54.415	-18.338	1.00	58.73	MOL3	N
ATOM	11246	CA	GLY	H	118	-2.146	-55.487	-18.216	1.00	52.72	MOL3	C
ATOM	11247	C	GLY	H	118	-3.582	-55.045	-18.058	1.00	50.79	MOL3	C
ATOM	11248	O	GLY	H	118	-3.842	-53.941	-17.590	1.00	52.19	MOL3	O
ATOM	11249	N	THR	H	119	-4.515	-55.903	-18.465	1.00	51.53	MOL3	N
ATOM	11250	CA	THR	H	119	-5.944	-55.609	-18.339	1.00	52.25	MOL3	C
ATOM	11251	CB	THR	H	119	-6.646	-55.514	-19.675	1.00	51.94	MOL3	C
ATOM	11252	OG1	THR	H	119	-6.441	-56.736	-20.390	1.00	46.45	MOL3	O
ATOM	11253	CG2	THR	H	119	-6.125	-54.334	-20.460	1.00	58.58	MOL3	C
ATOM	11254	C	THR	H	119	-6.629	-56.729	-17.591	1.00	49.07	MOL3	C
ATOM	11255	O	THR	H	119	-6.326	-57.904	-17.787	1.00	42.26	MOL3	O
ATOM	11256	N	LEU	H	120	-7.577	-56.356	-16.748	1.00	50.02	MOL3	N
ATOM	11257	CA	LEU	H	120	-8.294	-57.337	-15.965	0.50	47.90	MOL3	C
ATOM	11258	CB	LEU	H	120	-8.811	-56.699	-14.694	1.00	47.04	MOL3	C
ATOM	11259	CG	LEU	H	120	-9.591	-57.678	-13.851	1.00	42.65	MOL3	C
ATOM	11260	CD1	LEU	H	120	-8.945	-59.043	-13.898	1.00	42.81	MOL3	C
ATOM	11261	CD2	LEU	H	120	-9.648	-57.133	-12.443	1.00	57.87	MOL3	C
ATOM	11262	C	LEU	H	120	-9.446	-57.984	-16.711	1.00	47.31	MOL3	C
ATOM	11263	O	LEU	H	120	-10.246	-57.312	-17.360	1.00	53.62	MOL3	O
ATOM	11264	N	VAL	H	121	-9.526	-59.301	-16.615	1.00	43.57	MOL3	N
ATOM	11265	CA	VAL	H	121	-10.585	-60.048	-17.274	1.00	46.90	MOL3	C
ATOM	11266	CB	VAL	H	121	-10.028	-60.913	-18.431	1.00	42.22	MOL3	C
ATOM	11267	CG1	VAL	H	121	-11.013	-61.946	-18.860	1.00	35.72	MOL3	C
ATOM	11268	CG2	VAL	H	121	-9.749	-60.053	-19.608	1.00	57.37	MOL3	C
ATOM	11269	C	VAL	H	121	-11.228	-60.957	-16.247	1.00	54.19	MOL3	C
ATOM	11270	O	VAL	H	121	-10.612	-61.919	-15.795	1.00	54.20	MOL3	O
ATOM	11271	N	THR	H	122	-12.459	-60.648	-15.855	1.00	61.64	MOL3	N
ATOM	11272	CA	THR	H	122	-13.143	-61.485	-14.879	1.00	64.37	MOL3	C
ATOM	11273	CB	THR	H	122	-13.480	-60.709	-13.556	1.00	64.21	MOL3	C
ATOM	11274	OG1	THR	H	122	-14.752	-61.149	-13.063	1.00	63.64	MOL3	O
ATOM	11275	CG2	THR	H	122	-13.478	-59.192	-13.769	1.00	58.83	MOL3	C
ATOM	11276	C	THR	H	122	-14.389	-62.179	-15.417	1.00	64.05	MOL3	C
ATOM	11277	O	THR	H	122	-15.403	-61.563	-15.746	1.00	64.50	MOL3	O
ATOM	11278	N	VAL	H	123	-14.281	-63.491	-15.514	1.00	66.51	MOL3	N
ATOM	11279	CA	VAL	H	123	-15.375	-64.306	-15.995	1.00	75.45	MOL3	C
ATOM	11280	CB	VAL	H	123	-14.827	-65.500	-16.821	1.00	76.15	MOL3	C
ATOM	11281	CG1	VAL	H	123	-13.889	-66.316	-15.973	1.00	80.19	MOL3	C
ATOM	11282	CG2	VAL	H	123	-15.958	-66.356	-17.343	1.00	75.45	MOL3	C
ATOM	11283	C	VAL	H	123	-16.220	-64.801	-14.809	1.00	77.76	MOL3	C
ATOM	11284	O	VAL	H	123	-15.848	-65.743	-14.101	1.00	76.11	MOL3	O
ATOM	11285	N	SER	H	124	-17.353	-64.140	-14.587	1.00	80.57	MOL3	N
ATOM	11286	CA	SER	H	124	-18.257	-64.513	-13.505	1.00	86.50	MOL3	C
ATOM	11287	CB	SER	H	124	-18.024	-63.626	-12.277	1.00	93.22	MOL3	C
ATOM	11288	OG	SER	H	124	-18.629	-64.176	-11.112	1.00	98.83	MOL3	O
ATOM	11289	C	SER	H	124	-19.701	-64.392	-13.971	1.00	87.68	MOL3	C
ATOM	11290	O	SER	H	124	-20.028	-63.548	-14.803	1.00	90.87	MOL3	O
ATOM	11291	N	SER	H	125	-20.561	-65.248	-13.432	1.00	89.63	MOL3	N
ATOM	11292	CA	SER	H	125	-21.977	-65.265	-13.791	1.00	92.13	MOL3	C
ATOM	11293	CB	SER	H	125	-22.540	-66.674	-13.572	1.00	96.84	MOL3	C
ATOM	11294	OG	SER	H	125	-22.293	-67.117	-12.244	1.00	100.51	MOL3	O
ATOM	11295	C	SER	H	125	-22.800	-64.257	-12.991	1.00	88.79	MOL3	C
ATOM	11296	O	SER	H	125	-23.919	-63.917	-13.372	1.00	85.49	MOL3	O
ATOM	11297	N	ALA	H	126	-22.237	-63.790	-11.883	1.00	86.00	MOL3	N
ATOM	11298	CA	ALA	H	126	-22.907	-62.832	-11.016	1.00	84.53	MOL3	C
ATOM	11299	CB	ALA	H	126	-21.996	-62.442	-9.881	1.00	88.38	MOL3	C
ATOM	11300	C	ALA	H	126	-23.306	-61.596	-11.788	1.00	83.73	MOL3	C
ATOM	11301	O	ALA	H	126	-22.737	-61.307	-12.833	1.00	81.09	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	11302	N	LYS	H	127	-24.281	-60.863	-11.259	1.00	86.86	MOL3	N
ATOM	11303	CA	LYS	H	127	-24.763	-59.646	-11.906	1.00	87.73	MOL3	C
ATOM	11304	CB	LYS	H	127	-26.265	-59.743	-12.215	1.00	97.62	MOL3	C
ATOM	11305	CG	LYS	H	127	-26.743	-61.083	-12.805	1.00	110.82	MOL3	C
ATOM	11306	CD	LYS	H	127	-26.864	-62.183	-11.726	1.00	119.00	MOL3	C
ATOM	11307	CE	LYS	H	127	-27.463	-63.487	-12.279	1.00	121.43	MOL3	C
ATOM	11308	NZ	LYS	H	127	-27.600	-64.559	-11.240	1.00	119.53	MOL3	N
ATOM	11309	C	LYS	H	127	-24.508	-58.457	-10.997	1.00	83.80	MOL3	C
ATOM	11310	O	LYS	H	127	-24.482	-58.591	-9.773	1.00	88.07	MOL3	O
ATOM	11311	N	THR	H	128	-24.325	-57.289	-11.593	1.00	77.90	MOL3	N
ATOM	11312	CA	THR	H	128	-24.049	-56.092	-10.813	1.00	76.97	MOL3	C
ATOM	11313	CB	THR	H	128	-23.952	-54.860	-11.731	1.00	74.21	MOL3	C
ATOM	11314	OG1	THR	H	128	-22.834	-55.017	-12.615	1.00	70.27	MOL3	O
ATOM	11315	CG2	THR	H	128	-23.762	-53.599	-10.915	1.00	72.38	MOL3	C
ATOM	11316	C	THR	H	128	-25.057	-55.836	-9.686	1.00	77.21	MOL3	C
ATOM	11317	O	THR	H	128	-26.250	-55.648	-9.930	1.00	85.96	MOL3	O
ATOM	11318	N	THR	H	129	-24.572	-55.848	-8.448	1.00	69.74	MOL3	N
ATOM	11319	CA	THR	H	129	-25.438	-55.613	-7.310	1.00	67.73	MOL3	C
ATOM	11320	CB	THR	H	129	-25.731	-56.929	-6.519	1.00	69.81	MOL3	C
ATOM	11321	OG1	THR	H	129	-24.634	-57.234	-5.656	1.00	76.97	MOL3	O
ATOM	11322	CG2	THR	H	129	-25.943	-58.103	-7.461	1.00	65.64	MOL3	C
ATOM	11323	C	THR	H	129	-24.797	-54.596	-6.378	1.00	67.68	MOL3	C
ATOM	11324	O	THR	H	129	-23.605	-54.657	-6.103	1.00	71.46	MOL3	O
ATOM	11325	N	PRO	H	130	-25.565	-53.597	-5.933	1.00	66.63	MOL3	N
ATOM	11326	CD	PRO	H	130	-26.673	-52.937	-6.633	1.00	65.48	MOL3	C
ATOM	11327	CA	PRO	H	130	-24.896	-52.664	-5.031	1.00	65.88	MOL3	C
ATOM	11328	CB	PRO	H	130	-25.787	-51.419	-5.071	1.00	60.89	MOL3	C
ATOM	11329	CG	PRO	H	130	-27.069	-51.890	-5.649	1.00	62.80	MOL3	C
ATOM	11330	C	PRO	H	130	-24.710	-53.295	-3.652	1.00	69.90	MOL3	C
ATOM	11331	O	PRO	H	130	-25.303	-54.334	-3.345	1.00	73.73	MOL3	O
ATOM	11332	N	PRO	H	131	-23.857	-52.689	-2.817	1.00	70.45	MOL3	N
ATOM	11333	CD	PRO	H	131	-23.104	-51.471	-3.161	1.00	65.90	MOL3	C
ATOM	11334	CA	PRO	H	131	-23.512	-53.127	-1.465	1.00	73.01	MOL3	C
ATOM	11335	CB	PRO	H	131	-22.194	-52.427	-1.231	1.00	70.44	MOL3	C
ATOM	11336	CG	PRO	H	131	-22.474	-51.095	-1.841	1.00	64.04	MOL3	C
ATOM	11337	C	PRO	H	131	-24.497	-52.773	-0.386	1.00	76.32	MOL3	C
ATOM	11338	O	PRO	H	131	-25.164	-51.748	-0.462	1.00	76.84	MOL3	O
ATOM	11339	N	SER	H	132	-24.582	-53.634	0.619	1.00	77.23	MOL3	N
ATOM	11340	CA	SER	H	132	-25.444	-53.370	1.745	1.00	79.52	MOL3	C
ATOM	11341	CB	SER	H	132	-26.223	-54.626	2.136	1.00	79.39	MOL3	C
ATOM	11342	OG	SER	H	132	-27.347	-54.782	1.281	1.00	76.18	MOL3	O
ATOM	11343	C	SER	H	132	-24.429	-52.953	2.794	1.00	80.16	MOL3	C
ATOM	11344	O	SER	H	132	-23.408	-53.613	2.969	1.00	81.05	MOL3	O
ATOM	11345	N	VAL	H	133	-24.678	-51.833	3.462	1.00	80.73	MOL3	N
ATOM	11346	CA	VAL	H	133	-23.729	-51.354	4.456	1.00	77.55	MOL3	C
ATOM	11347	CB	VAL	H	133	-23.234	-49.961	4.068	1.00	74.70	MOL3	C
ATOM	11348	CG1	VAL	H	133	-22.156	-49.503	5.036	1.00	67.89	MOL3	C
ATOM	11349	CG2	VAL	H	133	-22.724	-49.992	2.636	1.00	67.06	MOL3	C
ATOM	11350	C	VAL	H	133	-24.230	-51.337	5.895	1.00	77.11	MOL3	C
ATOM	11351	O	VAL	H	133	-25.209	-50.671	6.229	1.00	79.78	MOL3	O
ATOM	11352	N	TYR	H	134	-23.532	-52.075	6.745	1.00	73.64	MOL3	N
ATOM	11353	CA	TYR	H	134	-23.893	-52.168	8.139	1.00	73.17	MOL3	C
ATOM	11354	CB	TYR	H	134	-24.151	-53.640	8.456	1.00	76.33	MOL3	C
ATOM	11355	CG	TYR	H	134	-25.084	-54.241	7.440	1.00	69.54	MOL3	C
ATOM	11356	CD1	TYR	H	134	-26.348	-53.716	7.255	1.00	70.76	MOL3	C
ATOM	11357	CE1	TYR	H	134	-27.185	-54.198	6.290	1.00	72.81	MOL3	C
ATOM	11358	CD2	TYR	H	134	-24.685	-55.279	6.628	1.00	67.53	MOL3	C
ATOM	11359	CE2	TYR	H	134	-25.522	-55.775	5.653	1.00	70.39	MOL3	C
ATOM	11360	CZ	TYR	H	134	-26.774	-55.229	5.487	1.00	71.99	MOL3	C
ATOM	11361	OH	TYR	H	134	-27.635	-55.711	4.521	1.00	73.51	MOL3	O
ATOM	11362	C	TYR	H	134	-22.760	-51.597	8.972	1.00	68.63	MOL3	C
ATOM	11363	O	TYR	H	134	-21.594	-51.752	8.631	1.00	65.24	MOL3	O
ATOM	11364	N	PRO	H	135	-23.096	-50.886	10.047	1.00	65.60	MOL3	N
ATOM	11365	CD	PRO	H	135	-24.381	-50.182	10.147	1.00	61.86	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11366	CA	PRO	H	135	-22.103	-50.284	10.938	1.00	69.19	MOL3	C
ATOM	11367	CB	PRO	H	135	-22.797	-49.015	11.403	1.00	69.64	MOL3	C
ATOM	11368	CG	PRO	H	135	-24.228	-49.433	11.438	1.00	70.95	MOL3	C
ATOM	11369	C	PRO	H	135	-21.665	-51.172	12.099	1.00	70.59	MOL3	C
ATOM	11370	O	PRO	H	135	-22.488	-51.757	12.802	1.00	78.60	MOL3	O
ATOM	11371	N	LEU	H	136	-20.359	-51.267	12.296	1.00	65.79	MOL3	N
ATOM	11372	CA	LEU	H	136	-19.826	-52.075	13.371	1.00	71.09	MOL3	C
ATOM	11373	CB	LEU	H	136	-18.494	-52.678	12.937	1.00	68.96	MOL3	C
ATOM	11374	CG	LEU	H	136	-18.519	-53.926	12.050	1.00	69.64	MOL3	C
ATOM	11375	CD1	LEU	H	136	-19.863	-54.060	11.356	1.00	72.74	MOL3	C
ATOM	11376	CD2	LEU	H	136	-17.374	-53.851	11.047	1.00	63.09	MOL3	C
ATOM	11377	C	LEU	H	136	-19.642	-51.218	14.618	1.00	76.09	MOL3	C
ATOM	11378	O	LEU	H	136	-18.699	-50.437	14.710	1.00	74.57	MOL3	O
ATOM	11379	N	ALA	H	137	-20.552	-51.365	15.577	1.00	81.71	MOL3	N
ATOM	11380	CA	ALA	H	137	-20.484	-50.606	16.817	1.00	84.93	MOL3	C
ATOM	11381	CB	ALA	H	137	-21.803	-49.900	17.054	1.00	82.25	MOL3	C
ATOM	11382	C	ALA	H	137	-20.158	-51.528	17.989	1.00	89.90	MOL3	C
ATOM	11383	O	ALA	H	137	-20.551	-52.699	18.003	1.00	93.75	MOL3	O
ATOM	11384	N	PRO	H	138	-19.433	-51.008	18.990	1.00	91.29	MOL3	N
ATOM	11385	CD	PRO	H	138	-18.930	-49.624	19.015	1.00	85.59	MOL3	C
ATOM	11386	CA	PRO	H	138	-19.019	-51.733	20.196	1.00	94.76	MOL3	C
ATOM	11387	CB	PRO	H	138	-18.372	-50.638	21.038	1.00	89.04	MOL3	C
ATOM	11388	CG	PRO	H	138	-17.817	-49.714	20.010	1.00	84.54	MOL3	C
ATOM	11389	C	PRO	H	138	-20.176	-52.407	20.937	1.00	100.89	MOL3	C
ATOM	11390	O	PRO	H	138	-21.345	-52.148	20.660	1.00	100.36	MOL3	O
ATOM	11391	N	GLY	H	139	-19.836	-53.279	21.878	1.00	109.51	MOL3	N
ATOM	11392	CA	GLY	H	139	-20.853	-53.941	22.670	1.00	120.98	MOL3	C
ATOM	11393	C	GLY	H	139	-20.971	-53.181	23.978	1.00	128.74	MOL3	C
ATOM	11394	O	GLY	H	139	-20.295	-52.169	24.177	1.00	128.54	MOL3	O
ATOM	11395	N	SER	H	140	-21.822	-53.650	24.878	1.00	135.63	MOL3	N
ATOM	11396	CA	SER	H	140	-21.972	-52.966	26.150	1.00	141.95	MOL3	C
ATOM	11397	CB	SER	H	140	-23.390	-53.172	26.677	1.00	144.66	MOL3	C
ATOM	11398	OG	SER	H	140	-24.334	-52.676	25.736	1.00	145.22	MOL3	O
ATOM	11399	C	SER	H	140	-20.926	-53.468	27.140	1.00	145.89	MOL3	C
ATOM	11400	O	SER	H	140	-21.219	-53.715	28.310	1.00	145.25	MOL3	O
ATOM	11401	N	ALA	H	141	-19.697	-53.609	26.647	1.00	151.86	MOL3	N
ATOM	11402	CA	ALA	H	141	-18.571	-54.078	27.451	1.00	157.16	MOL3	C
ATOM	11403	CB	ALA	H	141	-17.701	-55.025	26.630	1.00	156.03	MOL3	C
ATOM	11404	C	ALA	H	141	-17.730	-52.911	27.973	1.00	160.68	MOL3	C
ATOM	11405	O	ALA	H	141	-16.497	-52.990	28.026	1.00	160.33	MOL3	O
ATOM	11406	N	ALA	H	142	-18.412	-51.831	28.348	1.00	164.19	MOL3	N
ATOM	11407	CA	ALA	H	142	-17.776	-50.631	28.893	1.00	166.64	MOL3	C
ATOM	11408	CB	ALA	H	142	-17.255	-50.915	30.311	1.00	166.91	MOL3	C
ATOM	11409	C	ALA	H	142	-16.650	-50.055	28.032	1.00	166.72	MOL3	C
ATOM	11410	O	ALA	H	142	-16.377	-50.539	26.931	1.00	165.63	MOL3	O
ATOM	11411	N	GLN	H	143	-16.003	-49.013	28.554	1.00	166.73	MOL3	N
ATOM	11412	CA	GLN	H	143	-14.907	-48.341	27.859	1.00	164.95	MOL3	C
ATOM	11413	CB	GLN	H	143	-15.225	-46.854	27.665	1.00	163.69	MOL3	C
ATOM	11414	CG	GLN	H	143	-15.857	-46.513	26.323	1.00	161.37	MOL3	C
ATOM	11415	CD	GLN	H	143	-17.151	-47.261	26.071	1.00	160.20	MOL3	C
ATOM	11416	OE1	GLN	H	143	-18.101	-47.162	26.851	1.00	159.41	MOL3	O
ATOM	11417	NE2	GLN	H	143	-17.198	-48.014	24.974	1.00	156.54	MOL3	N
ATOM	11418	C	GLN	H	143	-13.556	-48.471	28.556	1.00	164.79	MOL3	C
ATOM	11419	O	GLN	H	143	-13.273	-47.779	29.540	1.00	163.41	MOL3	O
ATOM	11420	N	THR	H	144	-12.724	-49.365	28.034	1.00	164.54	MOL3	N
ATOM	11421	CA	THR	H	144	-11.390	-49.570	28.578	1.00	163.56	MOL3	C
ATOM	11422	CB	THR	H	144	-11.071	-51.078	28.775	1.00	165.35	MOL3	C
ATOM	11423	OG1	THR	H	144	-12.120	-51.698	29.532	1.00	165.87	MOL3	O
ATOM	11424	CG2	THR	H	144	-9.750	-51.250	29.533	1.00	164.82	MOL3	C
ATOM	11425	C	THR	H	144	-10.412	-48.956	27.575	1.00	160.51	MOL3	C
ATOM	11426	O	THR	H	144	-10.699	-48.883	26.377	1.00	157.79	MOL3	O
ATOM	11427	N	ASN	H	145	-9.266	-48.505	28.078	1.00	157.51	MOL3	N
ATOM	11428	CA	ASN	H	145	-8.235	-47.872	27.258	1.00	149.48	MOL3	C
ATOM	11429	CB	ASN	H	145	-7.789	-48.795	26.115	1.00	149.22	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11430	CG	ASN	H	145	-6.623	-48.222	25.324	1.00147.20	MOL3	C
ATOM	11431	OD1	ASN	H	145	-5.591	-47.849	25.889	1.00147.24	MOL3	O
ATOM	11432	ND2	ASN	H	145	-6.781	-48.153	24.010	1.00145.12	MOL3	N
ATOM	11433	C	ASN	H	145	-8.715	-46.538	26.693	1.00141.72	MOL3	C
ATOM	11434	O	ASN	H	145	-9.906	-46.215	26.720	1.00138.02	MOL3	O
ATOM	11435	N	SER	H	146	-7.766	-45.771	26.178	1.00133.95	MOL3	N
ATOM	11436	CA	SER	H	146	-8.045	-44.461	25.629	1.00128.86	MOL3	C
ATOM	11437	CB	SER	H	146	-6.769	-43.621	25.683	1.00132.13	MOL3	C
ATOM	11438	OG	SER	H	146	-6.175	-43.688	26.971	1.00137.19	MOL3	O
ATOM	11439	C	SER	H	146	-8.582	-44.487	24.198	1.00124.22	MOL3	C
ATOM	11440	O	SER	H	146	-9.107	-43.486	23.714	1.00124.12	MOL3	O
ATOM	11441	N	MET	H	147	-8.456	-45.623	23.520	1.00117.70	MOL3	N
ATOM	11442	CA	MET	H	147	-8.920	-45.725	22.137	1.00107.72	MOL3	C
ATOM	11443	CB	MET	H	147	-7.779	-46.181	21.230	1.00108.51	MOL3	C
ATOM	11444	CG	MET	H	147	-6.639	-45.192	21.135	1.00114.40	MOL3	C
ATOM	11445	SD	MET	H	147	-7.112	-43.663	20.310	1.00121.49	MOL3	S
ATOM	11446	CE	MET	H	147	-5.898	-43.614	18.963	1.00119.67	MOL3	C
ATOM	11447	C	MET	H	147	-10.103	-46.650	21.926	1.00102.40	MOL3	C
ATOM	11448	O	MET	H	147	-10.288	-47.627	22.645	1.00103.99	MOL3	O
ATOM	11449	N	VAL	H	148	-10.895	-46.335	20.910	1.00 97.82	MOL3	N
ATOM	11450	CA	VAL	H	148	-12.077	-47.113	20.555	1.00 92.16	MOL3	C
ATOM	11451	CB	VAL	H	148	-13.377	-46.307	20.788	1.00 86.31	MOL3	C
ATOM	11452	CG1	VAL	H	148	-13.307	-44.993	20.058	1.00 80.24	MOL3	C
ATOM	11453	CG2	VAL	H	148	-14.570	-47.084	20.279	1.00 81.35	MOL3	C
ATOM	11454	C	VAL	H	148	-12.029	-47.470	19.075	1.00 90.39	MOL3	C
ATOM	11455	O	VAL	H	148	-11.738	-46.616	18.238	1.00 85.60	MOL3	O
ATOM	11456	N	THR	H	149	-12.314	-48.725	18.749	1.00 88.35	MOL3	N
ATOM	11457	CA	THR	H	149	-12.312	-49.133	17.356	1.00 81.69	MOL3	C
ATOM	11458	CB	THR	H	149	-11.509	-50.407	17.126	1.00 83.07	MOL3	C
ATOM	11459	OG1	THR	H	149	-10.128	-50.075	16.934	1.00 84.79	MOL3	O
ATOM	11460	CG2	THR	H	149	-12.027	-51.128	15.903	1.00 82.03	MOL3	C
ATOM	11461	C	THR	H	149	-13.715	-49.371	16.858	1.00 77.72	MOL3	C
ATOM	11462	O	THR	H	149	-14.471	-50.136	17.453	1.00 78.65	MOL3	O
ATOM	11463	N	LEU	H	150	-14.050	-48.692	15.764	1.00 73.41	MOL3	N
ATOM	11464	CA	LEU	H	150	-15.356	-48.794	15.117	1.00 69.81	MOL3	C
ATOM	11465	CB	LEU	H	150	-15.953	-47.419	14.866	1.00 69.43	MOL3	C
ATOM	11466	CG	LEU	H	150	-16.775	-46.808	15.985	1.00 71.83	MOL3	C
ATOM	11467	CD1	LEU	H	150	-16.098	-47.048	17.320	1.00 73.94	MOL3	C
ATOM	11468	CD2	LEU	H	150	-16.953	-45.330	15.697	1.00 73.90	MOL3	C
ATOM	11469	C	LEU	H	150	-15.176	-49.456	13.778	1.00 66.09	MOL3	C
ATOM	11470	O	LEU	H	150	-14.083	-49.450	13.220	1.00 63.47	MOL3	O
ATOM	11471	N	GLY	H	151	-16.259	-49.998	13.244	1.00 65.92	MOL3	N
ATOM	11472	CA	GLY	H	151	-16.160	-50.668	11.968	1.00 70.49	MOL3	C
ATOM	11473	C	GLY	H	151	-17.302	-50.392	11.021	1.00 71.85	MOL3	C
ATOM	11474	O	GLY	H	151	-18.281	-49.731	11.361	1.00 73.68	MOL3	O
ATOM	11475	N	CYS	H	152	-17.176	-50.942	9.823	1.00 72.23	MOL3	N
ATOM	11476	CA	CYS	H	152	-18.170	-50.746	8.788	1.00 73.94	MOL3	C
ATOM	11477	C	CYS	H	152	-18.171	-51.956	7.841	1.00 67.77	MOL3	C
ATOM	11478	O	CYS	H	152	-17.260	-52.119	7.043	1.00 61.88	MOL3	O
ATOM	11479	CB	CYS	H	152	-17.806	-49.464	8.042	1.00 77.20	MOL3	C
ATOM	11480	SG	CYS	H	152	-18.839	-49.053	6.611	1.00 89.22	MOL3	S
ATOM	11481	N	LEU	H	153	-19.192	-52.802	7.933	1.00 64.17	MOL3	N
ATOM	11482	CA	LEU	H	153	-19.256	-53.985	7.085	1.00 62.43	MOL3	C
ATOM	11483	CB	LEU	H	153	-19.968	-55.131	7.799	1.00 67.70	MOL3	C
ATOM	11484	CG	LEU	H	153	-20.023	-56.468	7.047	1.00 69.14	MOL3	C
ATOM	11485	CD1	LEU	H	153	-18.611	-56.889	6.620	1.00 66.63	MOL3	C
ATOM	11486	CD2	LEU	H	153	-20.651	-57.528	7.947	1.00 67.24	MOL3	C
ATOM	11487	C	LEU	H	153	-19.989	-53.706	5.803	1.00 61.32	MOL3	C
ATOM	11488	O	LEU	H	153	-21.132	-53.258	5.832	1.00 66.08	MOL3	O
ATOM	11489	N	VAL	H	154	-19.325	-53.984	4.683	1.00 56.07	MOL3	N
ATOM	11490	CA	VAL	H	154	-19.893	-53.792	3.348	1.00 51.90	MOL3	C
ATOM	11491	CB	VAL	H	154	-18.903	-53.087	2.413	1.00 49.28	MOL3	C
ATOM	11492	CG1	VAL	H	154	-19.519	-52.892	1.049	1.00 46.64	MOL3	C
ATOM	11493	CG2	VAL	H	154	-18.506	-51.767	2.984	1.00 50.17	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11494	C	VAL	H	154	-20.160	-55.174	2.770	1.00	55.96	MOL3	C
ATOM	11495	O	VAL	H	154	-19.257	-55.819	2.240	1.00	54.62	MOL3	O
ATOM	11496	N	LYS	H	155	-21.403	-55.624	2.853	1.00	61.21	MOL3	N
ATOM	11497	CA	LYS	H	155	-21.742	-56.954	2.378	1.00	59.99	MOL3	C
ATOM	11498	CB	LYS	H	155	-22.627	-57.658	3.412	1.00	60.96	MOL3	C
ATOM	11499	CG	LYS	H	155	-22.704	-59.164	3.253	1.00	70.31	MOL3	C
ATOM	11500	CD	LYS	H	155	-23.715	-59.782	4.205	1.00	75.62	MOL3	C
ATOM	11501	CE	LYS	H	155	-23.523	-61.286	4.285	1.00	78.29	MOL3	C
ATOM	11502	NZ	LYS	H	155	-22.140	-61.628	4.748	1.00	76.71	MOL3	N
ATOM	11503	C	LYS	H	155	-22.408	-57.020	1.012	1.00	60.38	MOL3	C
ATOM	11504	O	LYS	H	155	-22.966	-56.040	0.508	1.00	53.20	MOL3	O
ATOM	11505	N	GLY	H	156	-22.309	-58.212	0.433	1.00	66.29	MOL3	C
ATOM	11506	CA	GLY	H	156	-22.888	-58.542	-0.855	1.00	70.93	MOL3	C
ATOM	11507	C	GLY	H	156	-22.985	-57.510	-1.963	1.00	73.35	MOL3	C
ATOM	11508	O	GLY	H	156	-24.077	-57.019	-2.270	1.00	77.12	MOL3	O
ATOM	11509	N	TYR	H	157	-21.853	-57.187	-2.577	1.00	70.56	MOL3	N
ATOM	11510	CA	TYR	H	157	-21.847	-56.244	-3.687	1.00	66.66	MOL3	C
ATOM	11511	CB	TYR	H	157	-21.221	-54.916	-3.296	1.00	63.22	MOL3	C
ATOM	11512	CG	TYR	H	157	-19.734	-54.992	-3.142	1.00	60.83	MOL3	C
ATOM	11513	CD1	TYR	H	157	-19.166	-55.498	-1.988	1.00	60.30	MOL3	C
ATOM	11514	CE1	TYR	H	157	-17.799	-55.579	-1.846	1.00	57.35	MOL3	C
ATOM	11515	CD2	TYR	H	157	-18.891	-54.571	-4.156	1.00	59.48	MOL3	C
ATOM	11516	CE2	TYR	H	157	-17.522	-54.652	-4.019	1.00	56.34	MOL3	C
ATOM	11517	CZ	TYR	H	157	-16.989	-55.155	-2.862	1.00	51.94	MOL3	C
ATOM	11518	OH	TYR	H	157	-15.638	-55.227	-2.706	1.00	57.08	MOL3	O
ATOM	11519	C	TYR	H	157	-21.035	-56.846	-4.821	1.00	67.40	MOL3	C
ATOM	11520	O	TYR	H	157	-20.214	-57.741	-4.609	1.00	65.47	MOL3	O
ATOM	11521	N	PHE	H	158	-21.265	-56.345	-6.028	1.00	70.19	MOL3	N
ATOM	11522	CA	PHE	H	158	-20.562	-56.839	-7.205	1.00	74.83	MOL3	C
ATOM	11523	CB	PHE	H	158	-21.124	-58.190	-7.631	1.00	71.48	MOL3	C
ATOM	11524	CG	PHE	H	158	-20.255	-58.940	-8.597	1.00	72.68	MOL3	C
ATOM	11525	CD1	PHE	H	158	-19.269	-59.804	-8.138	1.00	74.53	MOL3	C
ATOM	11526	CD2	PHE	H	158	-20.453	-58.823	-9.962	1.00	72.90	MOL3	C
ATOM	11527	CE1	PHE	H	158	-18.500	-60.546	-9.024	1.00	73.17	MOL3	C
ATOM	11528	CE2	PHE	H	158	-19.689	-59.559	-10.853	1.00	76.21	MOL3	C
ATOM	11529	CZ	PHE	H	158	-18.713	-60.423	-10.383	1.00	75.38	MOL3	C
ATOM	11530	C	PHE	H	158	-20.733	-55.855	-8.353	1.00	79.34	MOL3	C
ATOM	11531	O	PHE	H	158	-21.811	-55.278	-8.533	1.00	83.42	MOL3	O
ATOM	11532	N	PRO	H	159	-19.658	-55.637	-9.134	1.00	79.37	MOL3	N
ATOM	11533	CD	PRO	H	159	-19.671	-55.048	-10.487	1.00	75.33	MOL3	C
ATOM	11534	CA	PRO	H	159	-18.378	-56.304	-8.897	1.00	77.27	MOL3	C
ATOM	11535	CB	PRO	H	159	-17.912	-56.619	-10.301	1.00	70.82	MOL3	C
ATOM	11536	CG	PRO	H	159	-18.262	-55.354	-10.999	1.00	71.69	MOL3	C
ATOM	11537	C	PRO	H	159	-17.418	-55.350	-8.203	1.00	77.61	MOL3	C
ATOM	11538	O	PRO	H	159	-17.813	-54.276	-7.742	1.00	76.98	MOL3	O
ATOM	11539	N	GLU	H	160	-16.154	-55.747	-8.129	1.00	76.69	MOL3	N
ATOM	11540	CA	GLU	H	160	-15.153	-54.899	-7.523	1.00	79.57	MOL3	C
ATOM	11541	CB	GLU	H	160	-13.816	-55.640	-7.470	1.00	75.33	MOL3	C
ATOM	11542	CG	GLU	H	160	-13.705	-56.694	-6.357	1.00	80.58	MOL3	C
ATOM	11543	CD	GLU	H	160	-13.011	-56.177	-5.078	1.00	90.70	MOL3	C
ATOM	11544	OE1	GLU	H	160	-13.417	-55.118	-4.537	1.00	89.63	MOL3	O
ATOM	11545	OE2	GLU	H	160	-12.055	-56.841	-4.607	1.00	90.40	MOL3	O
ATOM	11546	C	GLU	H	160	-15.065	-53.677	-8.433	1.00	83.98	MOL3	C
ATOM	11547	O	GLU	H	160	-15.395	-53.757	-9.614	1.00	91.30	MOL3	O
ATOM	11548	N	PRO	H	161	-14.652	-52.524	-7.893	1.00	84.34	MOL3	N
ATOM	11549	CD	PRO	H	161	-13.856	-51.590	-8.710	1.00	81.86	MOL3	C
ATOM	11550	CA	PRO	H	161	-14.292	-52.377	-6.487	1.00	84.58	MOL3	C
ATOM	11551	CB	PRO	H	161	-12.863	-51.880	-6.568	1.00	82.05	MOL3	C
ATOM	11552	CG	PRO	H	161	-12.966	-50.900	-7.671	1.00	80.99	MOL3	C
ATOM	11553	C	PRO	H	161	-15.195	-51.383	-5.774	1.00	85.92	MOL3	C
ATOM	11554	O	PRO	H	161	-15.965	-50.641	-6.398	1.00	89.34	MOL3	O
ATOM	11555	N	VAL	H	162	-15.090	-51.382	-4.455	1.00	82.39	MOL3	N
ATOM	11556	CA	VAL	H	162	-15.858	-50.475	-3.642	1.00	78.67	MOL3	C
ATOM	11557	CB	VAL	H	162	-16.607	-51.238	-2.558	1.00	74.90	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11558	CG1	VAL	H	162	-15.645	-52.113	-1.794	1.00	72.98	MOL3	C
ATOM	11559	CG2	VAL	H	162	-17.295	-50.272	-1.636	1.00	79.19	MOL3	C
ATOM	11560	C	VAL	H	162	-14.808	-49.579	-3.017	1.00	77.99	MOL3	C
ATOM	11561	O	VAL	H	162	-13.655	-49.979	-2.863	1.00	72.49	MOL3	O
ATOM	11562	N	THR	H	163	-15.178	-48.354	-2.693	1.00	80.25	MOL3	N
ATOM	11563	CA	THR	H	163	-14.214	-47.474	-2.070	1.00	82.23	MOL3	C
ATOM	11564	CB	THR	H	163	-13.816	-46.332	-3.017	1.00	86.16	MOL3	C
ATOM	11565	OG1	THR	H	163	-12.847	-46.830	-3.954	1.00	77.67	MOL3	O
ATOM	11566	CG2	THR	H	163	-13.230	-45.153	-2.240	1.00	89.23	MOL3	C
ATOM	11567	C	THR	H	163	-14.761	-46.976	-0.743	1.00	83.40	MOL3	C
ATOM	11568	O	THR	H	163	-15.849	-46.384	-0.658	1.00	86.29	MOL3	O
ATOM	11569	N	THR	H	164	-13.993	-47.261	0.300	1.00	78.21	MOL3	N
ATOM	11570	CA	VAL	H	164	-14.364	-46.918	1.657	1.00	80.05	MOL3	C
ATOM	11571	CB	VAL	H	164	-14.114	-48.113	2.575	1.00	78.14	MOL3	C
ATOM	11572	CG1	VAL	H	164	-14.808	-47.911	3.914	1.00	76.92	MOL3	C
ATOM	11573	CG2	VAL	H	164	-14.579	-49.374	1.892	1.00	77.40	MOL3	C
ATOM	11574	C	VAL	H	164	-13.541	-45.762	2.169	1.00	82.24	MOL3	C
ATOM	11575	O	VAL	H	164	-12.367	-45.641	1.834	1.00	83.12	MOL3	O
ATOM	11576	N	THR	H	165	-14.149	-44.940	3.017	1.00	82.62	MOL3	N
ATOM	11577	CA	THR	H	165	-13.470	-43.786	3.566	1.00	79.38	MOL3	C
ATOM	11578	CB	THR	H	165	-13.472	-42.684	2.518	1.00	76.55	MOL3	C
ATOM	11579	OG1	THR	H	165	-12.133	-42.467	2.063	1.00	74.39	MOL3	O
ATOM	11580	CG2	THR	H	165	-14.068	-41.420	3.067	1.00	80.32	MOL3	C
ATOM	11581	C	THR	H	165	-14.174	-43.334	4.835	1.00	82.23	MOL3	C
ATOM	11582	O	THR	H	165	-15.369	-43.590	5.006	1.00	92.20	MOL3	O
ATOM	11583	N	TRP	H	166	-13.446	-42.676	5.730	1.00	78.45	MOL3	N
ATOM	11584	CA	TRP	H	166	-14.053	-42.227	6.974	1.00	83.57	MOL3	C
ATOM	11585	CB	TRP	H	166	-13.297	-42.835	8.154	1.00	75.83	MOL3	C
ATOM	11586	CG	TRP	H	166	-13.359	-44.331	8.178	1.00	61.73	MOL3	C
ATOM	11587	CD2	TRP	H	166	-14.374	-45.129	8.786	1.00	53.21	MOL3	C
ATOM	11588	CE2	TRP	H	166	-14.078	-46.473	8.497	1.00	50.56	MOL3	C
ATOM	11589	CE3	TRP	H	166	-15.509	-44.835	9.540	1.00	57.81	MOL3	C
ATOM	11590	CD1	TRP	H	166	-12.507	-45.196	7.565	1.00	56.26	MOL3	C
ATOM	11591	NE1	TRP	H	166	-12.933	-46.489	7.750	1.00	49.49	MOL3	N
ATOM	11592	CZ2	TRP	H	166	-14.871	-47.524	8.936	1.00	62.55	MOL3	C
ATOM	11593	CZ3	TRP	H	166	-16.303	-45.881	9.977	1.00	67.42	MOL3	C
ATOM	11594	CH2	TRP	H	166	-15.981	-47.211	9.674	1.00	69.04	MOL3	C
ATOM	11595	C	TRP	H	166	-14.110	-40.707	7.103	1.00	90.73	MOL3	C
ATOM	11596	O	TRP	H	166	-13.101	-40.024	6.953	1.00	90.08	MOL3	O
ATOM	11597	N	ASN	H	167	-15.299	-40.182	7.387	1.00	100.29	MOL3	N
ATOM	11598	CA	ASN	H	167	-15.482	-38.739	7.523	1.00	103.08	MOL3	C
ATOM	11599	CB	ASN	H	167	-14.688	-38.216	8.717	1.00	104.70	MOL3	C
ATOM	11600	CG	ASN	H	167	-15.454	-38.331	10.018	1.00	110.34	MOL3	C
ATOM	11601	OD1	ASN	H	167	-16.057	-39.366	10.309	1.00	114.18	MOL3	O
ATOM	11602	ND2	ASN	H	167	-15.431	-37.266	10.815	1.00	114.51	MOL3	N
ATOM	11603	C	ASN	H	167	-15.037	-38.025	6.261	1.00	101.78	MOL3	C
ATOM	11604	O	ASN	H	167	-14.484	-36.930	6.315	1.00	99.40	MOL3	O
ATOM	11605	N	SER	H	168	-15.267	-38.678	5.130	1.00	102.77	MOL3	N
ATOM	11606	CA	SER	H	168	-14.933	-38.133	3.828	1.00	105.60	MOL3	C
ATOM	11607	CB	SER	H	168	-15.753	-36.865	3.595	1.00	108.93	MOL3	C
ATOM	11608	OG	SER	H	168	-17.060	-37.011	4.130	1.00	112.36	MOL3	O
ATOM	11609	C	SER	H	168	-13.448	-37.825	3.656	1.00	105.78	MOL3	C
ATOM	11610	O	SER	H	168	-13.057	-37.168	2.695	1.00	107.78	MOL3	O
ATOM	11611	N	GLY	H	169	-12.621	-38.293	4.582	1.00	105.25	MOL3	N
ATOM	11612	CA	GLY	H	169	-11.197	-38.041	4.468	1.00	104.83	MOL3	C
ATOM	11613	C	GLY	H	169	-10.615	-37.471	5.740	1.00	106.28	MOL3	C
ATOM	11614	O	GLY	H	169	-9.393	-37.402	5.897	1.00	103.08	MOL3	O
ATOM	11615	N	SER	H	170	-11.495	-37.060	6.650	1.00	107.77	MOL3	N
ATOM	11616	CA	SER	H	170	-11.064	-36.497	7.924	1.00	111.76	MOL3	C
ATOM	11617	CB	SER	H	170	-12.291	-36.111	8.768	1.00	114.37	MOL3	C
ATOM	11618	OG	SER	H	170	-11.929	-35.539	10.020	1.00	113.88	MOL3	O
ATOM	11619	C	SER	H	170	-10.186	-37.510	8.676	1.00	112.11	MOL3	C
ATOM	11620	O	SER	H	170	-9.178	-37.145	9.287	1.00	113.84	MOL3	O
ATOM	11621	N	LEU	H	171	-10.565	-36.783	8.618	1.00	108.77	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	11622	CA	LEU	H	171	-9.811	-39.833	9.289	1.00103.21	MOL3	C
ATOM	11623	CB	LEU	H	171	-10.746	-40.733	10.098	1.00100.76	MOL3	C
ATOM	11624	CG	LEU	H	171	-11.514	-40.137	11.281	1.00 97.25	MOL3	C
ATOM	11625	CD1	LEU	H	171	-12.388	-38.985	10.826	1.00 95.97	MOL3	C
ATOM	11626	CD2	LEU	H	171	-12.369	-41.218	11.909	1.00 94.50	MOL3	C
ATOM	11627	C	LEU	H	171	-9.070	-40.670	8.262	1.00102.49	MOL3	C
ATOM	11628	O	LEU	H	171	-9.686	-41.390	7.478	1.00103.13	MOL3	O
ATOM	11629	N	SER	H	172	-7.747	-40.573	8.269	1.00103.04	MOL3	N
ATOM	11630	CA	SER	H	172	-6.919	-41.320	7.327	1.00104.87	MOL3	C
ATOM	11631	CB	SER	H	172	-6.076	-40.361	6.487	1.00106.36	MOL3	C
ATOM	11632	OG	SER	H	172	-5.095	-39.713	7.284	1.00107.12	MOL3	O
ATOM	11633	C	SER	H	172	-5.986	-42.257	8.068	1.00105.79	MOL3	C
ATOM	11634	O	SER	H	172	-5.656	-43.336	7.581	1.00106.18	MOL3	O
ATOM	11635	N	SER	H	173	-5.556	-41.822	9.247	1.00107.31	MOL3	N
ATOM	11636	CA	SER	H	173	-4.646	-42.595	10.081	1.00104.81	MOL3	C
ATOM	11637	CB	SER	H	173	-3.729	-41.646	10.866	1.00105.83	MOL3	C
ATOM	11638	OG	SER	H	173	-4.461	-40.605	11.499	1.00 98.57	MOL3	O
ATOM	11639	C	SER	H	173	-5.407	-43.495	11.038	1.00102.90	MOL3	C
ATOM	11640	O	SER	H	173	-6.477	-43.128	11.525	1.00104.60	MOL3	O
ATOM	11641	N	GLY	H	174	-4.853	-44.674	11.303	1.00 98.71	MOL3	N
ATOM	11642	CA	GLY	H	174	-5.500	-45.602	12.214	1.00 97.65	MOL3	C
ATOM	11643	C	GLY	H	174	-6.699	-46.262	11.569	1.00 94.80	MOL3	C
ATOM	11644	O	GLY	H	174	-7.621	-46.721	12.247	1.00 95.87	MOL3	O
ATOM	11645	N	VAL	H	175	-6.674	-46.311	10.243	1.00 90.26	MOL3	N
ATOM	11646	CA	VAL	H	175	-7.754	-46.900	9.461	1.00 85.11	MOL3	C
ATOM	11647	CB	VAL	H	175	-8.243	-45.928	8.358	1.00 82.39	MOL3	C
ATOM	11648	CG1	VAL	H	175	-9.044	-46.689	7.310	1.00 76.61	MOL3	C
ATOM	11649	CG2	VAL	H	175	-9.077	-44.813	8.971	1.00 80.37	MOL3	C
ATOM	11650	C	VAL	H	175	-7.284	-48.159	8.762	1.00 81.26	MOL3	C
ATOM	11651	O	VAL	H	175	-6.206	-48.173	8.173	1.00 83.63	MOL3	O
ATOM	11652	N	HIS	H	176	-8.094	-49.210	8.821	1.00 76.09	MOL3	N
ATOM	11653	CA	HIS	H	176	-7.762	-50.467	8.158	1.00 68.75	MOL3	C
ATOM	11654	CB	HIS	H	176	-7.401	-51.553	9.173	1.00 71.27	MOL3	C
ATOM	11655	CG	HIS	H	176	-5.962	-51.564	9.588	1.00 71.42	MOL3	C
ATOM	11656	CD2	HIS	H	176	-5.390	-51.538	10.816	1.00 67.95	MOL3	C
ATOM	11657	ND1	HIS	H	176	-4.927	-51.688	8.685	1.00 74.70	MOL3	N
ATOM	11658	CE1	HIS	H	176	-3.780	-51.743	9.341	1.00 77.04	MOL3	C
ATOM	11659	NE2	HIS	H	176	-4.034	-51.656	10.635	1.00 69.41	MOL3	N
ATOM	11660	C	HIS	H	176	-8.952	-50.951	7.351	1.00 64.01	MOL3	C
ATOM	11661	O	HIS	H	176	-9.948	-51.410	7.910	1.00 65.62	MOL3	O
ATOM	11662	N	THR	H	177	-8.872	-50.825	6.038	1.00 56.48	MOL3	N
ATOM	11663	CA	THR	H	177	-9.958	-51.311	5.211	1.00 52.80	MOL3	C
ATOM	11664	CB	THR	H	177	-10.441	-50.265	4.177	1.00 52.89	MOL3	C
ATOM	11665	OG1	THR	H	177	-10.646	-50.920	2.923	1.00 55.66	MOL3	O
ATOM	11666	CG2	THR	H	177	-9.444	-49.110	4.027	1.00 56.20	MOL3	C
ATOM	11667	C	THR	H	177	-9.420	-52.564	4.539	1.00 47.84	MOL3	C
ATOM	11668	O	THR	H	177	-8.528	-52.516	3.704	1.00 44.37	MOL3	O
ATOM	11669	N	PHE	H	178	-9.966	-53.700	4.942	1.00 49.87	MOL3	N
ATOM	11670	CA	PHE	H	178	-9.516	-54.994	4.453	1.00 50.15	MOL3	C
ATOM	11671	CB	PHE	H	178	-9.950	-56.083	5.425	1.00 51.36	MOL3	C
ATOM	11672	CG	PHE	H	178	-9.513	-55.833	6.833	1.00 50.93	MOL3	C
ATOM	11673	CD1	PHE	H	178	-8.462	-56.540	7.381	1.00 50.19	MOL3	C
ATOM	11674	CD2	PHE	H	178	-10.120	-54.849	7.591	1.00 49.49	MOL3	C
ATOM	11675	CE1	PHE	H	178	-8.022	-56.270	8.652	1.00 49.58	MOL3	C
ATOM	11676	CE2	PHE	H	178	-9.683	-54.574	8.861	1.00 51.26	MOL3	C
ATOM	11677	CZ	PHE	H	178	-8.631	-55.285	9.393	1.00 52.32	MOL3	C
ATOM	11678	C	PHE	H	178	-9.953	-55.375	3.061	1.00 54.56	MOL3	C
ATOM	11679	O	PHE	H	178	-10.897	-54.821	2.505	1.00 64.25	MOL3	O
ATOM	11680	N	PRO	H	179	-9.251	-56.342	2.472	1.00 55.68	MOL3	N
ATOM	11681	CD	PRO	H	179	-8.011	-56.902	3.031	1.00 57.16	MOL3	C
ATOM	11682	CA	PRO	H	179	-9.494	-56.872	1.132	1.00 58.45	MOL3	C
ATOM	11683	CB	PRO	H	179	-8.380	-57.903	0.959	1.00 53.58	MOL3	C
ATOM	11684	CG	PRO	H	179	-7.286	-57.362	1.781	1.00 55.46	MOL3	C
ATOM	11685	C	PRO	H	179	-10.851	-57.535	1.043	1.00 63.31	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11686	O	PRO	H	179	-11.238	-58.285	1.935	1.00	60.56	MOL3	O
ATOM	11687	N	ALA	H	180	-11.572	-57.269	-0.038	1.00	70.63	MOL3	N
ATOM	11688	CA	ALA	H	180	-12.874	-57.889	-0.222	1.00	71.32	MOL3	C
ATOM	11689	CB	ALA	H	180	-13.559	-57.322	-1.456	1.00	74.52	MOL3	C
ATOM	11690	C	ALA	H	180	-12.656	-59.387	-0.386	1.00	67.08	MOL3	C
ATOM	11691	O	ALA	H	180	-11.623	-59.827	-0.881	1.00	62.03	MOL3	O
ATOM	11692	N	VAL	H	181	-13.634	-60.166	0.039	1.00	67.73	MOL3	N
ATOM	11693	CA	VAL	H	181	-13.546	-61.607	-0.064	1.00	71.50	MOL3	C
ATOM	11694	CB	VAL	H	181	-13.481	-62.232	1.311	1.00	67.32	MOL3	C
ATOM	11695	CG1	VAL	H	181	-14.678	-61.799	2.120	1.00	70.09	MOL3	C
ATOM	11696	CG2	VAL	H	181	-13.442	-63.728	1.183	1.00	73.32	MOL3	C
ATOM	11697	C	VAL	H	181	-14.793	-62.109	-0.772	1.00	75.39	MOL3	C
ATOM	11698	O	VAL	H	181	-15.853	-61.510	-0.652	1.00	74.98	MOL3	O
ATOM	11699	N	LEU	H	182	-14.673	-63.210	-1.506	1.00	84.53	MOL3	N
ATOM	11700	CA	LEU	H	182	-15.817	-63.741	-2.239	1.00	93.08	MOL3	C
ATOM	11701	CB	LEU	H	182	-15.357	-64.531	-3.459	1.00	95.26	MOL3	C
ATOM	11702	CG	LEU	H	182	-16.452	-64.746	-4.503	1.00	94.65	MOL3	C
ATOM	11703	CD1	LEU	H	182	-16.926	-63.403	-5.030	1.00	87.89	MOL3	C
ATOM	11704	CD2	LEU	H	182	-15.907	-65.600	-5.638	1.00	99.72	MOL3	C
ATOM	11705	C	LEU	H	182	-16.718	-64.621	-1.394	1.00	98.95	MOL3	C
ATOM	11706	O	LEU	H	182	-16.340	-65.727	-1.011	1.00	100.71	MOL3	O
ATOM	11707	N	GLN	H	183	-17.919	-64.120	-1.119	1.00	104.61	MOL3	N
ATOM	11708	CA	GLN	H	183	-18.902	-64.845	-0.323	1.00	109.98	MOL3	C
ATOM	11709	CB	GLN	H	183	-19.488	-63.922	0.745	1.00	115.13	MOL3	C
ATOM	11710	CG	GLN	H	183	-20.405	-64.612	1.739	1.00	123.91	MOL3	C
ATOM	11711	CD	GLN	H	183	-20.898	-63.669	2.828	1.00	127.70	MOL3	C
ATOM	11712	OE1	GLN	H	183	-20.125	-63.205	3.670	1.00	127.00	MOL3	O
ATOM	11713	NE2	GLN	H	183	-22.193	-63.378	2.810	1.00	131.46	MOL3	N
ATOM	11714	C	GLN	H	183	-20.009	-65.357	-1.239	1.00	111.46	MOL3	C
ATOM	11715	O	GLN	H	183	-21.092	-64.765	-1.333	1.00	107.91	MOL3	O
ATOM	11716	N	SER	H	184	-19.718	-66.463	-1.916	1.00	113.64	MOL3	N
ATOM	11717	CA	SER	H	184	-20.659	-67.076	-2.843	1.00	112.70	MOL3	C
ATOM	11718	CB	SER	H	184	-21.845	-67.672	-2.082	1.00	119.48	MOL3	C
ATOM	11719	OG	SER	H	184	-21.434	-68.782	-1.297	1.00	125.71	MOL3	O
ATOM	11720	C	SER	H	184	-21.151	-66.077	-3.880	1.00	107.75	MOL3	C
ATOM	11721	O	SER	H	184	-22.170	-65.407	-3.694	1.00	99.42	MOL3	O
ATOM	11722	N	ASP	H	185	-20.393	-65.974	-4.964	1.00	106.74	MOL3	N
ATOM	11723	CA	ASP	H	185	-20.723	-65.089	-6.068	1.00	104.66	MOL3	C
ATOM	11724	CB	ASP	H	185	-21.941	-65.628	-6.812	1.00	113.67	MOL3	C
ATOM	11725	CG	ASP	H	185	-21.725	-67.025	-7.340	1.00	121.58	MOL3	C
ATOM	11726	OD1	ASP	H	185	-20.920	-67.186	-8.287	1.00	122.38	MOL3	O
ATOM	11727	OD2	ASP	H	185	-22.361	-67.958	-6.798	1.00	126.77	MOL3	O
ATOM	11728	C	ASP	H	185	-21.015	-63.662	-5.650	1.00	99.48	MOL3	C
ATOM	11729	O	ASP	H	185	-21.866	-63.016	-6.251	1.00	97.47	MOL3	O
ATOM	11730	N	LEU	H	186	-20.336	-63.175	-4.618	1.00	93.59	MOL3	N
ATOM	11731	CA	LEU	H	186	-20.533	-61.802	-4.168	1.00	84.79	MOL3	C
ATOM	11732	CB	LEU	H	186	-21.903	-61.626	-3.510	1.00	82.33	MOL3	C
ATOM	11733	CG	LEU	H	186	-22.955	-61.244	-4.557	1.00	77.08	MOL3	C
ATOM	11734	CD1	LEU	H	186	-24.166	-60.555	-3.938	1.00	73.45	MOL3	C
ATOM	11735	CD2	LEU	H	186	-22.288	-60.319	-5.540	1.00	73.17	MOL3	C
ATOM	11736	C	LEU	H	186	-19.431	-61.343	-3.234	1.00	81.42	MOL3	C
ATOM	11737	O	LEU	H	186	-18.911	-62.124	-2.435	1.00	78.72	MOL3	O
ATOM	11738	N	TYR	H	187	-19.073	-60.069	-3.347	1.00	76.82	MOL3	N
ATOM	11739	CA	TYR	H	187	-18.006	-59.521	-2.531	1.00	75.32	MOL3	C
ATOM	11740	CB	TYR	H	187	-17.208	-58.501	-3.338	1.00	74.97	MOL3	C
ATOM	11741	CG	TYR	H	187	-16.436	-59.113	-4.485	1.00	80.55	MOL3	C
ATOM	11742	CD1	TYR	H	187	-15.559	-60.170	-4.278	1.00	81.09	MOL3	C
ATOM	11743	CE1	TYR	H	187	-14.826	-60.716	-5.334	1.00	83.98	MOL3	C
ATOM	11744	CD2	TYR	H	187	-16.564	-58.617	-5.773	1.00	88.64	MOL3	C
ATOM	11745	CE2	TYR	H	187	-15.833	-59.154	-6.834	1.00	90.45	MOL3	C
ATOM	11746	CZ	TYR	H	187	-14.967	-60.199	-6.608	1.00	86.86	MOL3	C
ATOM	11747	OH	TYR	H	187	-14.239	-60.705	-7.663	1.00	83.28	MOL3	O
ATOM	11748	C	TYR	H	187	-18.456	-58.910	-1.213	1.00	72.95	MOL3	C
ATOM	11749	O	TYR	H	187	-19.469	-58.219	-1.139	1.00	73.00	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	11750	N	THR	H	188	-17.687	-59.190	-0.170	1.00	70.13	MOL3	N
ATOM	11751	CA	THR	H	188	-17.957	-58.678	1.159	1.00	69.86	MOL3	C
ATOM	11752	CB	THR	H	188	-18.489	-59.749	2.095	1.00	71.98	MOL3	C
ATOM	11753	OG1	THR	H	188	-19.758	-60.210	1.626	1.00	81.84	MOL3	O
ATOM	11754	CG2	THR	H	188	-18.627	-59.190	3.500	1.00	71.01	MOL3	C
ATOM	11755	C	THR	H	188	-16.653	-58.216	1.755	1.00	71.41	MOL3	C
ATOM	11756	O	THR	H	188	-15.665	-58.946	1.742	1.00	72.76	MOL3	O
ATOM	11757	N	LEU	H	189	-16.637	-56.999	2.274	1.00	72.91	MOL3	N
ATOM	11758	CA	LEU	H	189	-15.428	-56.497	2.901	1.00	69.76	MOL3	C
ATOM	11759	CB	LEU	H	189	-14.557	-55.728	1.897	1.00	71.14	MOL3	C
ATOM	11760	CG	LEU	H	189	-14.614	-54.206	1.799	1.00	70.24	MOL3	C
ATOM	11761	CD1	LEU	H	189	-13.453	-53.742	0.963	1.00	68.48	MOL3	C
ATOM	11762	CD2	LEU	H	189	-15.911	-53.755	1.185	1.00	73.49	MOL3	C
ATOM	11763	C	LEU	H	189	-15.781	-55.637	4.106	1.00	65.92	MOL3	C
ATOM	11764	O	LEU	H	189	-16.892	-55.114	4.230	1.00	62.95	MOL3	O
ATOM	11765	N	LEU	H	190	-14.825	-55.522	5.009	1.00	64.50	MOL3	N
ATOM	11766	CA	SER	H	190	-15.016	-54.763	6.223	1.00	65.87	MOL3	C
ATOM	11767	CB	SER	H	190	-14.978	-55.728	7.401	1.00	67.18	MOL3	C
ATOM	11768	OG	SER	H	190	-14.049	-56.766	7.139	1.00	69.18	MOL3	O
ATOM	11769	C	SER	H	190	-13.930	-53.706	6.364	1.00	63.60	MOL3	C
ATOM	11770	O	SER	H	190	-12.930	-53.740	5.658	1.00	59.51	MOL3	O
ATOM	11771	N	SER	H	191	-14.138	-52.746	7.255	1.00	62.63	MOL3	N
ATOM	11772	CA	SER	H	191	-13.134	-51.720	7.478	1.00	61.36	MOL3	C
ATOM	11773	CB	SER	H	191	-13.231	-50.600	6.447	1.00	60.89	MOL3	C
ATOM	11774	OG	SER	H	191	-12.151	-49.692	6.610	1.00	57.18	MOL3	O
ATOM	11775	C	SER	H	191	-13.259	-51.145	8.868	1.00	63.38	MOL3	C
ATOM	11776	O	SER	H	191	-14.319	-50.661	9.269	1.00	66.85	MOL3	O
ATOM	11777	N	SER	H	192	-12.157	-51.214	9.601	1.00	62.58	MOL3	N
ATOM	11778	CA	SER	H	192	-12.105	-50.725	10.966	1.00	65.54	MOL3	C
ATOM	11779	CB	SER	H	192	-11.263	-51.656	11.839	1.00	67.43	MOL3	C
ATOM	11780	OG	SER	H	192	-9.880	-51.322	11.768	1.00	65.40	MOL3	O
ATOM	11781	C	SER	H	192	-11.463	-49.358	11.011	1.00	66.13	MOL3	C
ATOM	11782	O	SER	H	192	-10.750	-48.959	10.093	1.00	61.68	MOL3	O
ATOM	11783	N	VAL	H	193	-11.711	-48.654	12.105	1.00	66.29	MOL3	N
ATOM	11784	CA	VAL	H	193	-11.132	-47.347	12.308	1.00	66.18	MOL3	C
ATOM	11785	CB	VAL	H	193	-11.976	-46.253	11.634	1.00	59.00	MOL3	C
ATOM	11786	CG1	VAL	H	193	-13.341	-46.189	12.248	1.00	58.84	MOL3	C
ATOM	11787	CG2	VAL	H	193	-11.275	-44.930	11.743	1.00	56.17	MOL3	C
ATOM	11788	C	VAL	H	193	-11.028	-47.118	13.807	1.00	71.49	MOL3	C
ATOM	11789	O	VAL	H	193	-12.014	-47.234	14.537	1.00	74.28	MOL3	O
ATOM	11790	N	THR	H	194	-9.815	-46.834	14.266	1.00	75.90	MOL3	N
ATOM	11791	CA	THR	H	194	-9.570	-46.597	15.676	1.00	81.76	MOL3	C
ATOM	11792	CB	THR	H	194	-8.189	-47.107	16.078	1.00	85.55	MOL3	C
ATOM	11793	OG1	THR	H	194	-7.636	-47.885	15.008	1.00	91.67	MOL3	O
ATOM	11794	CG2	THR	H	194	-8.297	-47.973	17.321	1.00	90.42	MOL3	C
ATOM	11795	C	THR	H	194	-9.648	-45.105	15.964	1.00	84.06	MOL3	C
ATOM	11796	O	THR	H	194	-9.429	-44.275	15.082	1.00	83.35	MOL3	O
ATOM	11797	N	VAL	H	195	-9.963	-44.761	17.203	1.00	85.63	MOL3	N
ATOM	11798	CA	VAL	H	195	-10.060	-43.365	17.554	1.00	85.95	MOL3	C
ATOM	11799	CB	VAL	H	195	-11.229	-42.722	16.805	1.00	85.68	MOL3	C
ATOM	11800	CG1	VAL	H	195	-12.201	-42.093	17.778	1.00	93.53	MOL3	C
ATOM	11801	CG2	VAL	H	195	-10.685	-41.702	15.817	1.00	84.12	MOL3	C
ATOM	11802	C	VAL	H	195	-10.181	-43.173	19.059	1.00	86.70	MOL3	C
ATOM	11803	O	VAL	H	195	-10.650	-44.052	19.778	1.00	89.05	MOL3	O
ATOM	11804	N	PRO	H	196	-9.711	-42.028	19.556	1.00	85.09	MOL3	N
ATOM	11805	CD	PRO	H	196	-8.914	-41.053	18.792	1.00	81.74	MOL3	C
ATOM	11806	CA	PRO	H	196	-9.741	-41.684	20.975	1.00	87.98	MOL3	C
ATOM	11807	CB	PRO	H	196	-9.153	-40.283	20.979	1.00	89.01	MOL3	C
ATOM	11808	CG	PRO	H	196	-8.128	-40.370	19.868	1.00	81.01	MOL3	C
ATOM	11809	C	PRO	H	196	-11.137	-41.754	21.589	1.00	91.71	MOL3	C
ATOM	11810	O	PRO	H	196	-12.067	-41.134	21.090	1.00	87.25	MOL3	O
ATOM	11811	N	SER	H	197	-11.272	-42.510	22.677	1.00	99.52	MOL3	N
ATOM	11812	CA	SER	H	197	-12.560	-42.673	23.347	1.00	105.85	MOL3	C
ATOM	11813	CB	SER	H	197	-12.399	-43.573	24.583	1.00	109.81	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11814	OG	SER	H	197	-11.381	-43.105	25.455	1.00115.70	MOL3	O
ATOM	11815	C	SER	H	197	-13.215	-41.343	23.727	1.00107.60	MOL3	C
ATOM	11816	O	SER	H	197	-14.435	-41.260	23.879	1.00106.99	MOL3	O
ATOM	11817	N	SER	H	198	-12.400	-40.303	23.866	1.00110.77	MOL3	N
ATOM	11818	CA	SER	H	198	-12.899	-38.978	24.212	1.00114.47	MOL3	C
ATOM	11819	CB	SER	H	198	-11.738	-38.098	24.702	1.00116.99	MOL3	C
ATOM	11820	OG	SER	H	198	-10.649	-38.104	23.787	1.00113.97	MOL3	O
ATOM	11821	C	SER	H	198	-13.602	-38.310	23.024	1.00115.10	MOL3	C
ATOM	11822	O	SER	H	198	-14.495	-37.478	23.210	1.00115.84	MOL3	O
ATOM	11823	N	THR	H	199	-13.202	-38.678	21.807	1.00114.41	MOL3	N
ATOM	11824	CA	THR	H	199	-13.794	-38.105	20.596	1.00111.03	MOL3	C
ATOM	11825	CB	THR	H	199	-12.701	-37.820	19.509	1.00111.21	MOL3	C
ATOM	11826	OG1	THR	H	199	-11.808	-38.936	19.401	1.00109.25	MOL3	O
ATOM	11827	CG2	THR	H	199	-11.899	-36.573	19.869	1.00108.67	MOL3	C
ATOM	11828	C	THR	H	199	-14.911	-38.974	20.001	1.00107.63	MOL3	C
ATOM	11829	O	THR	H	199	-15.168	-38.949	18.795	1.00103.69	MOL3	O
ATOM	11830	N	TRP	H	200	-15.588	-39.720	20.867	1.00105.36	MOL3	N
ATOM	11831	CA	TRP	H	200	-16.668	-40.593	20.442	1.00105.42	MOL3	C
ATOM	11832	CB	TRP	H	200	-16.075	-41.748	19.638	1.00 96.93	MOL3	C
ATOM	11833	CG	TRP	H	200	-17.042	-42.360	18.712	1.00 90.71	MOL3	C
ATOM	11834	CD2	TRP	H	200	-17.876	-43.490	18.973	1.00 85.74	MOL3	C
ATOM	11835	CE2	TRP	H	200	-18.730	-43.640	17.868	1.00 82.86	MOL3	C
ATOM	11836	CE3	TRP	H	200	-17.988	-44.386	20.038	1.00 83.28	MOL3	C
ATOM	11837	CD1	TRP	H	200	-17.402	-41.893	17.487	1.00 87.30	MOL3	C
ATOM	11838	NE1	TRP	H	200	-18.418	-42.653	16.971	1.00 81.12	MOL3	N
ATOM	11839	CZ2	TRP	H	200	-19.688	-44.647	17.798	1.00 81.11	MOL3	C
ATOM	11840	CZ3	TRP	H	200	-18.937	-45.383	19.966	1.00 80.41	MOL3	C
ATOM	11841	CH2	TRP	H	200	-19.776	-45.505	18.855	1.00 79.21	MOL3	C
ATOM	11842	C	TRP	H	200	-17.400	-41.125	21.679	1.00112.10	MOL3	C
ATOM	11843	O	TRP	H	200	-16.761	-41.549	22.647	1.00117.37	MOL3	O
ATOM	11844	N	PRO	H	201	-18.747	-41.110	21.669	1.00115.94	MOL3	N
ATOM	11845	CD	PRO	H	201	-19.546	-41.871	22.643	1.00119.58	MOL3	C
ATOM	11846	CA	PRO	H	201	-19.605	-40.629	20.580	1.00115.85	MOL3	C
ATOM	11847	CB	PRO	H	201	-20.974	-41.219	20.918	1.00116.63	MOL3	C
ATOM	11848	CG	PRO	H	201	-20.650	-42.406	21.773	1.00119.92	MOL3	C
ATOM	11849	C	PRO	H	201	-19.663	-39.110	20.489	1.00118.24	MOL3	C
ATOM	11850	O	PRO	H	201	-20.463	-38.567	19.728	1.00117.69	MOL3	O
ATOM	11851	N	SER	H	202	-18.823	-38.431	21.268	1.00122.15	MOL3	N
ATOM	11852	CA	SER	H	202	-18.779	-36.967	21.272	1.00123.53	MOL3	C
ATOM	11853	CB	SER	H	202	-17.489	-36.472	21.945	1.00127.01	MOL3	C
ATOM	11854	OG	SER	H	202	-16.332	-36.884	21.238	1.00131.60	MOL3	O
ATOM	11855	C	SER	H	202	-18.886	-36.409	19.852	1.00121.08	MOL3	C
ATOM	11856	O	SER	H	202	-19.941	-35.914	19.456	1.00117.79	MOL3	O
ATOM	11857	N	GLU	H	203	-17.796	-36.485	19.094	1.00121.18	MOL3	N
ATOM	11858	CA	GLU	H	203	-17.798	-36.009	17.718	1.00123.42	MOL3	C
ATOM	11859	CB	GLU	H	203	-16.361	-35.814	17.220	1.00122.49	MOL3	C
ATOM	11860	CG	GLU	H	203	-15.491	-34.967	18.151	1.00124.92	MOL3	C
ATOM	11861	CD	GLU	H	203	-14.166	-34.537	17.521	1.00127.78	MOL3	C
ATOM	11862	OE1	GLU	H	203	-13.260	-34.104	18.272	1.00127.29	MOL3	O
ATOM	11863	OE2	GLU	H	203	-14.032	-34.618	16.279	1.00125.44	MOL3	O
ATOM	11864	C	GLU	H	203	-18.517	-37.078	16.893	1.00124.67	MOL3	C
ATOM	11865	O	GLU	H	203	-19.105	-38.000	17.461	1.00126.60	MOL3	O
ATOM	11866	N	THR	H	204	-18.470	-36.970	15.567	1.00124.07	MOL3	N
ATOM	11867	CA	THR	H	204	-19.149	-37.940	14.706	1.00120.80	MOL3	C
ATOM	11868	CB	THR	H	204	-20.148	-37.250	13.752	1.00123.11	MOL3	C
ATOM	11869	OG1	THR	H	204	-19.461	-36.838	12.560	1.00121.90	MOL3	O
ATOM	11870	CG2	THR	H	204	-20.766	-36.019	14.418	1.00126.15	MOL3	C
ATOM	11871	C	THR	H	204	-18.199	-38.740	13.826	1.00115.81	MOL3	C
ATOM	11872	O	THR	H	204	-17.145	-38.251	13.422	1.00115.78	MOL3	O
ATOM	11873	N	VAL	H	205	-18.589	-39.974	13.528	1.00109.46	MOL3	N
ATOM	11874	CA	VAL	H	205	-17.804	-40.839	12.661	1.00102.80	MOL3	C
ATOM	11875	CB	VAL	H	205	-17.070	-41.924	13.433	1.00 98.37	MOL3	C
ATOM	11876	CG1	VAL	H	205	-16.167	-42.689	12.492	1.00 94.03	MOL3	C
ATOM	11877	CG2	VAL	H	205	-16.271	-41.310	14.548	1.00101.45	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	11878	C	VAL	H	205	-18.760	-41.507	11.691	1.00103.28	MOL3	C
ATOM	11879	O	VAL	H	205	-19.759	-42.109	12.102	1.00106.02	MOL3	O
ATOM	11880	N	THR	H	206	-18.461	-41.394	10.402	1.00101.05	MOL3	N
ATOM	11881	CA	THR	H	206	-19.324	-41.978	9.385	1.00 98.75	MOL3	C
ATOM	11882	CB	THR	H	206	-20.147	-40.896	8.651	1.00101.71	MOL3	C
ATOM	11883	OG1	THR	H	206	-20.732	-39.998	9.601	1.00104.93	MOL3	O
ATOM	11884	CG2	THR	H	206	-21.261	-41.546	7.846	1.00105.24	MOL3	C
ATOM	11885	C	THR	H	206	-18.558	-42.761	8.330	1.00 92.67	MOL3	C
ATOM	11886	O	THR	H	206	-17.455	-42.401	7.932	1.00 84.29	MOL3	O
ATOM	11887	N	CYS	H	207	-19.166	-43.843	7.876	1.00 90.17	MOL3	N
ATOM	11888	CA	CYS	H	207	-18.561	-44.670	6.863	1.00 85.84	MOL3	C
ATOM	11889	C	CYS	H	207	-18.945	-44.075	5.523	1.00 87.41	MOL3	C
ATOM	11890	O	CYS	H	207	-20.063	-43.574	5.358	1.00 93.47	MOL3	O
ATOM	11891	CB	CYS	H	207	-19.093	-46.079	6.974	1.00 84.82	MOL3	C
ATOM	11892	SG	CYS	H	207	-18.122	-47.253	6.011	1.00 91.88	MOL3	S
ATOM	11893	N	ASN	H	208	-18.022	-44.124	4.568	1.00 83.21	MOL3	N
ATOM	11894	CA	ASN	H	208	-18.252	-43.571	3.229	1.00 81.80	MOL3	C
ATOM	11895	CB	ASN	H	208	-17.236	-42.461	2.910	1.00 77.24	MOL3	C
ATOM	11896	CG	ASN	H	208	-17.573	-41.133	3.562	1.00 74.85	MOL3	C
ATOM	11897	OD1	ASN	H	208	-18.664	-40.600	3.388	1.00 76.94	MOL3	O
ATOM	11898	ND2	ASN	H	208	-16.625	-40.585	4.303	1.00 69.62	MOL3	N
ATOM	11899	C	ASN	H	208	-18.094	-44.635	2.156	1.00 81.06	MOL3	C
ATOM	11900	O	ASN	H	208	-17.074	-44.667	1.474	1.00 78.69	MOL3	O
ATOM	11901	N	VAL	H	209	-19.087	-45.496	1.981	1.00 83.28	MOL3	N
ATOM	11902	CA	VAL	H	209	-18.958	-46.533	0.966	1.00 80.87	MOL3	C
ATOM	11903	CB	VAL	H	209	-19.731	-47.810	1.351	1.00 85.63	MOL3	C
ATOM	11904	CG1	VAL	H	209	-19.229	-48.983	0.524	1.00 79.18	MOL3	C
ATOM	11905	CG2	VAL	H	209	-19.563	-48.093	2.842	1.00 82.07	MOL3	C
ATOM	11906	C	VAL	H	209	-19.414	-46.036	-0.395	1.00 78.89	MOL3	C
ATOM	11907	O	VAL	H	209	-20.415	-45.318	-0.518	1.00 81.76	MOL3	O
ATOM	11908	N	ALA	H	210	-18.665	-46.428	-1.417	1.00 75.82	MOL3	N
ATOM	11909	CA	ALA	H	210	-18.940	-46.001	-2.784	1.00 81.55	MOL3	C
ATOM	11910	CB	ALA	H	210	-17.986	-44.886	-3.147	1.00 78.92	MOL3	C
ATOM	11911	C	ALA	H	210	-18.810	-47.121	-3.815	1.00 83.84	MOL3	C
ATOM	11912	O	ALA	H	210	-17.757	-47.752	-3.906	1.00 80.91	MOL3	O
ATOM	11913	N	HIS	H	211	-19.862	-47.360	-4.601	1.00 86.08	MOL3	N
ATOM	11914	CA	HIS	H	211	-19.795	-48.397	-5.624	1.00 84.97	MOL3	C
ATOM	11915	CB	HIS	H	211	-20.796	-49.509	-5.405	1.00 80.26	MOL3	C
ATOM	11916	CG	HIS	H	211	-20.470	-50.742	-6.181	1.00 73.85	MOL3	C
ATOM	11917	CD2	HIS	H	211	-19.278	-51.271	-6.540	1.00 72.72	MOL3	C
ATOM	11918	ND1	HIS	H	211	-21.428	-51.632	-6.610	1.00 76.06	MOL3	N
ATOM	11919	CE1	HIS	H	211	-20.841	-52.662	-7.193	1.00 70.05	MOL3	C
ATOM	11920	NE2	HIS	H	211	-19.536	-52.468	-7.162	1.00 68.29	MOL3	N
ATOM	11921	C	HIS	H	211	-20.037	-47.842	-7.004	1.00 89.60	MOL3	C
ATOM	11922	O	HIS	H	211	-21.178	-47.650	-7.421	1.00 93.26	MOL3	O
ATOM	11923	N	PRO	H	212	-18.951	-47.601	-7.746	1.00 93.11	MOL3	N
ATOM	11924	CD	PRO	H	212	-17.573	-47.920	-7.339	1.00 92.68	MOL3	C
ATOM	11925	CA	PRO	H	212	-18.967	-47.062	-9.107	1.00 91.18	MOL3	C
ATOM	11926	CB	PRO	H	212	-17.500	-47.090	-9.509	1.00 87.71	MOL3	C
ATOM	11927	CG	PRO	H	212	-16.782	-46.993	-8.207	1.00 89.67	MOL3	C
ATOM	11928	C	PRO	H	212	-19.798	-47.904	-10.054	1.00 90.13	MOL3	C
ATOM	11929	O	PRO	H	212	-20.741	-47.424	-10.668	1.00 89.72	MOL3	O
ATOM	11930	N	ALA	H	213	-19.431	-49.169	-10.174	1.00 90.84	MOL3	N
ATOM	11931	CA	ALA	H	213	-20.136	-50.076	-11.062	1.00 92.12	MOL3	C
ATOM	11932	CB	ALA	H	213	-19.669	-51.499	-10.822	1.00 92.89	MOL3	C
ATOM	11933	C	ALA	H	213	-21.655	-49.994	-10.942	1.00 94.00	MOL3	C
ATOM	11934	O	ALA	H	213	-22.368	-50.327	-11.882	1.00 94.47	MOL3	O
ATOM	11935	N	SER	H	214	-22.145	-49.544	-9.791	1.00 95.58	MOL3	N
ATOM	11936	CA	SER	H	214	-23.580	-49.427	-9.553	1.00 93.94	MOL3	C
ATOM	11937	CB	SER	H	214	-23.965	-50.266	-8.343	1.00 93.75	MOL3	C
ATOM	11938	OG	SER	H	214	-23.219	-49.865	-7.205	1.00 89.83	MOL3	O
ATOM	11939	C	SER	H	214	-23.949	-47.980	-9.290	1.00 95.88	MOL3	C
ATOM	11940	O	SER	H	214	-25.095	-47.665	-8.984	1.00100.11	MOL3	O
ATOM	11941	N	SER	H	215	-22.960	-47.104	-9.403	1.00 97.87	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	11942	CA	SER	H	215	-23.143	-45.680	-9.167	1.00	99.24	MOL3	C
ATOM	11943	CB	SER	H	215	-23.980	-45.070	-10.284	1.00	98.78	MOL3	C
ATOM	11944	OG	SER	H	215	-23.278	-45.147	-11.514	1.00	102.48	MOL3	O
ATOM	11945	C	SER	H	215	-23.767	-45.381	-7.812	1.00	99.58	MOL3	C
ATOM	11946	O	SER	H	215	-24.384	-44.337	-7.628	1.00	102.78	MOL3	O
ATOM	11947	N	THR	H	216	-23.587	-46.300	-6.867	1.00	97.10	MOL3	N
ATOM	11948	CA	THR	H	216	-24.111	-46.145	-5.520	1.00	93.31	MOL3	C
ATOM	11949	CB	THR	H	216	-24.374	-47.504	-4.881	1.00	92.04	MOL3	C
ATOM	11950	OG1	THR	H	216	-24.966	-48.378	-5.846	1.00	88.94	MOL3	O
ATOM	11951	CG2	THR	H	216	-25.316	-47.360	-3.698	1.00	97.81	MOL3	C
ATOM	11952	C	THR	H	216	-23.050	-45.432	-4.690	1.00	93.44	MOL3	C
ATOM	11953	O	THR	H	216	-21.868	-45.500	-5.008	1.00	89.78	MOL3	O
ATOM	11954	N	LYS	H	217	-23.469	-44.742	-3.634	1.00	93.38	MOL3	N
ATOM	11955	CA	LYS	H	217	-22.530	-44.043	-2.768	1.00	88.95	MOL3	C
ATOM	11956	CB	LYS	H	217	-22.073	-42.741	-3.428	1.00	85.95	MOL3	C
ATOM	11957	CG	LYS	H	217	-20.668	-42.287	-3.026	1.00	90.47	MOL3	C
ATOM	11958	CD	LYS	H	217	-20.061	-41.264	-4.023	1.00	95.55	MOL3	C
ATOM	11959	CE	LYS	H	217	-20.843	-39.935	-4.065	1.00	98.10	MOL3	C
ATOM	11960	NZ	LYS	H	217	-20.382	-38.979	-5.126	1.00	90.44	MOL3	N
ATOM	11961	C	LYS	H	217	-23.224	-43.792	-1.437	1.00	89.96	MOL3	C
ATOM	11962	O	LYS	H	217	-23.720	-42.706	-1.156	1.00	93.10	MOL3	O
ATOM	11963	N	VAL	H	218	-23.231	-44.843	-0.629	1.00	88.84	MOL3	N
ATOM	11964	CA	VAL	H	218	-23.858	-44.902	0.688	1.00	87.90	MOL3	C
ATOM	11965	CB	VAL	H	218	-24.147	-46.359	1.010	1.00	88.66	MOL3	C
ATOM	11966	CG1	VAL	H	218	-25.423	-46.487	1.817	1.00	95.34	MOL3	C
ATOM	11967	CG2	VAL	H	218	-24.190	-47.156	-0.288	1.00	89.64	MOL3	C
ATOM	11968	C	VAL	H	218	-23.005	-44.391	1.837	1.00	84.78	MOL3	C
ATOM	11969	O	VAL	H	218	-21.827	-44.695	1.893	1.00	80.97	MOL3	O
ATOM	11970	N	ASP	H	219	-23.600	-43.640	2.759	1.00	86.47	MOL3	N
ATOM	11971	CA	ASP	H	219	-22.878	-43.158	3.935	1.00	90.23	MOL3	C
ATOM	11972	CB	ASP	H	219	-22.793	-41.633	3.970	1.00	95.17	MOL3	C
ATOM	11973	CG	ASP	H	219	-21.793	-41.082	2.968	1.00	102.60	MOL3	C
ATOM	11974	OD1	ASP	H	219	-20.742	-41.732	2.788	1.00	104.56	MOL3	O
ATOM	11975	OD2	ASP	H	219	-22.043	-40.004	2.373	1.00	102.34	MOL3	O
ATOM	11976	C	ASP	H	219	-23.655	-43.651	5.132	1.00	92.51	MOL3	C
ATOM	11977	O	ASP	H	219	-24.871	-43.495	5.180	1.00	99.15	MOL3	O
ATOM	11978	N	LYS	H	220	-22.962	-44.261	6.089	1.00	92.41	MOL3	N
ATOM	11979	CA	LYS	H	220	-23.622	-44.796	7.275	1.00	93.36	MOL3	C
ATOM	11980	CB	LYS	H	220	-23.543	-46.333	7.260	1.00	84.54	MOL3	C
ATOM	11981	CG	LYS	H	220	-24.734	-47.055	7.914	1.00	81.35	MOL3	C
ATOM	11982	CD	LYS	H	220	-25.977	-47.143	7.015	1.00	75.68	MOL3	C
ATOM	11983	CE	LYS	H	220	-25.735	-48.051	5.800	1.00	87.50	MOL3	C
ATOM	11984	NZ	LYS	H	220	-26.946	-48.477	4.992	1.00	88.31	MOL3	N
ATOM	11985	C	LYS	H	220	-22.944	-44.228	8.521	1.00	94.15	MOL3	C
ATOM	11986	O	LYS	H	220	-21.753	-44.423	8.725	1.00	91.61	MOL3	O
ATOM	11987	N	LYS	H	221	-23.693	-43.500	9.343	1.00	96.99	MOL3	N
ATOM	11988	CA	LYS	H	221	-23.106	-42.934	10.545	1.00	95.18	MOL3	C
ATOM	11989	CB	LYS	H	221	-23.928	-41.739	11.040	1.00	98.20	MOL3	C
ATOM	11990	CG	LYS	H	221	-23.304	-41.018	12.223	1.00	101.59	MOL3	C
ATOM	11991	CD	LYS	H	221	-24.228	-39.946	12.803	1.00	105.32	MOL3	C
ATOM	11992	CE	LYS	H	221	-24.359	-38.736	11.884	1.00	107.02	MOL3	C
ATOM	11993	NZ	LYS	H	221	-25.213	-37.656	12.475	1.00	101.78	MOL3	N
ATOM	11994	C	LYS	H	221	-23.036	-44.027	11.600	1.00	93.02	MOL3	C
ATOM	11995	O	LYS	H	221	-23.934	-44.873	11.704	1.00	91.92	MOL3	O
ATOM	11996	N	ILE	H	222	-21.955	-44.022	12.368	1.00	89.58	MOL3	N
ATOM	11997	CA	ILE	H	222	-21.774	-45.030	13.400	1.00	88.34	MOL3	C
ATOM	11998	CB	ILE	H	222	-20.288	-45.415	13.580	1.00	83.38	MOL3	C
ATOM	11999	CG2	ILE	H	222	-20.164	-46.498	14.621	1.00	84.72	MOL3	C
ATOM	12000	CG1	ILE	H	222	-19.715	-45.965	12.280	1.00	78.50	MOL3	C
ATOM	12001	CD1	ILE	H	222	-19.672	-44.965	11.171	1.00	84.43	MOL3	C
ATOM	12002	C	ILE	H	222	-22.311	-44.550	14.734	1.00	86.50	MOL3	C
ATOM	12003	O	ILE	H	222	-21.734	-43.681	15.365	1.00	82.24	MOL3	O
ATOM	12004	N	VAL	H	223	-23.432	-45.113	15.156	1.00	90.57	MOL3	N
ATOM	12005	CA	VAL	H	223	-24.008	-44.728	16.427	1.00	95.46	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12006	CB	VAL	H	223	-25.396	-44.102	16.256	1.00	91.96	MOL3	C
ATOM	12007	CG1	VAL	H	223	-25.266	-42.793	15.504	1.00	88.47	MOL3	C
ATOM	12008	CG2	VAL	H	223	-26.318	-45.063	15.529	1.00	92.22	MOL3	C
ATOM	12009	C	VAL	H	223	-24.086	-45.928	17.349	1.00	100.28	MOL3	C
ATOM	12010	O	VAL	H	223	-24.399	-47.046	16.928	1.00	105.28	MOL3	O
ATOM	12011	N	PRO	H	224	-23.784	-45.704	18.629	1.00	99.26	MOL3	N
ATOM	12012	CD	PRO	H	224	-23.449	-44.354	19.105	1.00	92.15	MOL3	C
ATOM	12013	CA	PRO	H	224	-23.766	-46.665	19.730	1.00	102.86	MOL3	C
ATOM	12014	CB	PRO	H	224	-23.245	-45.828	20.882	1.00	100.47	MOL3	C
ATOM	12015	CG	PRO	H	224	-23.768	-44.457	20.544	1.00	94.92	MOL3	C
ATOM	12016	C	PRO	H	224	-25.101	-47.313	20.057	1.00	109.86	MOL3	C
ATOM	12017	O	PRO	H	224	-26.122	-46.990	19.459	1.00	111.11	MOL3	O
ATOM	12018	N	ARG	H	225	-25.080	-48.245	21.002	1.00	119.34	MOL3	N
ATOM	12019	CA	ARG	H	225	-26.306	-48.904	21.437	1.00	129.90	MOL3	C
ATOM	12020	CB	ARG	H	225	-26.143	-50.422	21.468	1.00	127.38	MOL3	C
ATOM	12021	CG	ARG	H	225	-26.052	-51.065	20.101	1.00	117.97	MOL3	C
ATOM	12022	CD	ARG	H	225	-24.671	-50.923	19.513	1.00	107.99	MOL3	C
ATOM	12023	NE	ARG	H	225	-24.461	-51.902	18.450	1.00	107.59	MOL3	N
ATOM	12024	CZ	ARG	H	225	-24.624	-53.215	18.595	1.00	103.80	MOL3	C
ATOM	12025	NH1	ARG	H	225	-24.405	-54.031	17.570	1.00	101.69	MOL3	N
ATOM	12026	NH2	ARG	H	225	-25.010	-53.715	19.763	1.00	101.56	MOL3	N
ATOM	12027	C	ARG	H	225	-26.687	-48.382	22.825	1.00	138.98	MOL3	C
ATOM	12028	O	ARG	H	225	-25.836	-47.869	23.562	1.00	138.90	MOL3	O
ATOM	12029	N	ASP	H	226	-27.964	-48.513	23.176	1.00	148.18	MOL3	N
ATOM	12030	CA	ASP	H	226	-28.457	-48.017	24.461	1.00	156.78	MOL3	C
ATOM	12031	CB	ASP	H	226	-29.974	-47.765	24.378	1.00	157.84	MOL3	C
ATOM	12032	CG	ASP	H	226	-30.340	-46.675	23.370	1.00	158.63	MOL3	C
ATOM	12033	OD1	ASP	H	226	-31.513	-46.239	23.362	1.00	157.41	MOL3	O
ATOM	12034	OD2	ASP	H	226	-29.461	-46.256	22.584	1.00	157.97	MOL3	O
ATOM	12035	C	ASP	H	226	-28.140	-48.882	25.691	1.00	160.96	MOL3	C
ATOM	12036	O	ASP	H	226	-27.022	-48.852	26.213	1.00	160.25	MOL3	O
ATOM	12037	N	CYS	H	227	-29.129	-49.638	26.158	1.00	167.01	MOL3	N
ATOM	12038	CA	CYS	H	227	-28.954	-50.485	27.333	1.00	172.77	MOL3	C
ATOM	12039	CB	CYS	H	227	-30.325	-50.765	27.988	1.00	176.72	MOL3	C
ATOM	12040	SG	CYS	H	227	-31.668	-51.545	27.008	1.00	183.08	MOL3	S
ATOM	12041	C	CYS	H	227	-28.199	-51.789	27.059	1.00	174.15	MOL3	C
ATOM	12042	O	CYS	H	227	-27.700	-51.958	25.921	1.00	174.94	MOL3	O
ATOM	12043	OXT	CYS	H	227	-28.104	-52.618	27.995	1.00	175.28	MOL3	O
ATOM	12044	CB	GLU	I	15	28.076	-18.463	-10.237	1.00	162.95	MOL3	C
ATOM	12045	CG	GLU	I	15	27.674	-18.794	-8.792	1.00	163.87	MOL3	C
ATOM	12046	CD	GLU	I	15	27.343	-17.564	-7.955	1.00	163.49	MOL3	C
ATOM	12047	OE1	GLU	I	15	28.222	-16.684	-7.824	1.00	162.41	MOL3	O
ATOM	12048	OE2	GLU	I	15	26.212	-17.481	-7.421	1.00	160.36	MOL3	O
ATOM	12049	C	GLU	I	15	26.323	-16.749	-10.849	1.00	163.75	MOL3	C
ATOM	12050	O	GLU	I	15	25.252	-16.652	-10.243	1.00	163.46	MOL3	O
ATOM	12051	N	GLU	I	15	27.404	-18.150	-12.598	1.00	161.12	MOL3	N
ATOM	12052	CA	GLU	I	15	26.915	-18.125	-11.188	1.00	163.21	MOL3	C
ATOM	12053	N	SER	I	16	27.020	-15.693	-11.262	1.00	163.58	MOL3	N
ATOM	12054	CA	SER	I	16	26.593	-14.319	-11.009	1.00	162.86	MOL3	C
ATOM	12055	CB	SER	I	16	27.451	-13.714	-9.892	1.00	160.63	MOL3	C
ATOM	12056	OG	SER	I	16	27.167	-12.339	-9.700	1.00	158.49	MOL3	O
ATOM	12057	C	SER	I	16	26.702	-13.445	-12.264	1.00	164.09	MOL3	C
ATOM	12058	O	SER	I	16	26.070	-12.390	-12.351	1.00	164.62	MOL3	O
ATOM	12059	N	CYS	I	17	27.503	-13.895	-13.229	1.00	165.88	MOL3	N
ATOM	12060	CA	CYS	I	17	27.723	-13.155	-14.476	1.00	168.09	MOL3	C
ATOM	12061	C	CYS	I	17	26.405	-12.749	-15.143	1.00	169.75	MOL3	C
ATOM	12062	O	CYS	I	17	25.363	-13.364	-14.911	1.00	168.23	MOL3	O
ATOM	12063	CB	CYS	I	17	28.543	-13.991	-15.488	1.00	168.90	MOL3	C
ATOM	12064	SG	CYS	I	17	29.769	-15.216	-14.875	1.00	172.29	MOL3	S
ATOM	12065	N	PRO	I	18	26.441	-11.695	-15.981	1.00	173.94	MOL3	N
ATOM	12066	CD	PRO	I	18	27.604	-10.809	-16.170	1.00	175.68	MOL3	C
ATOM	12067	CA	PRO	I	18	25.272	-11.177	-16.707	1.00	176.27	MOL3	C
ATOM	12068	CB	PRO	I	18	25.854	-10.018	-17.516	1.00	176.47	MOL3	C
ATOM	12069	CG	PRO	I	18	26.950	-9.517	-16.623	1.00	177.15	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12070	C	PRO	I	18	24.671	-12.262	-17.602	1.00177.65	MOL3	C
ATOM	12071	O	PRO	I	18	25.175	-12.531	-18.698	1.00177.40	MOL3	O
ATOM	12072	N	PRO	I	19	23.573	-12.885	-17.144	1.00178.76	MOL3	N
ATOM	12073	CD	PRO	I	19	22.801	-12.395	-15.989	1.00178.22	MOL3	C
ATOM	12074	CA	PRO	I	19	22.842	-13.957	-17.833	1.00179.21	MOL3	C
ATOM	12075	CB	PRO	I	19	21.534	-14.056	-17.037	1.00179.55	MOL3	C
ATOM	12076	CG	PRO	I	19	21.391	-12.689	-16.414	1.00179.46	MOL3	C
ATOM	12077	C	PRO	I	19	22.609	-13.803	-19.342	1.00179.60	MOL3	C
ATOM	12078	O	PRO	I	19	22.938	-12.779	-19.950	1.00179.12	MOL3	O
ATOM	12079	N	VAL	I	20	22.040	-14.854	-19.928	1.00179.64	MOL3	N
ATOM	12080	CA	VAL	I	20	21.747	-14.924	-21.356	1.00179.72	MOL3	C
ATOM	12081	CB	VAL	I	20	22.385	-16.214	-21.958	1.00179.88	MOL3	C
ATOM	12082	CG1	VAL	I	20	21.393	-17.369	-21.888	1.00178.65	MOL3	C
ATOM	12083	CG2	VAL	I	20	22.869	-15.969	-23.379	1.00179.43	MOL3	C
ATOM	12084	C	VAL	I	20	20.221	-14.982	-21.506	1.00179.53	MOL3	C
ATOM	12085	O	VAL	I	20	19.513	-15.232	-20.528	1.00179.05	MOL3	O
ATOM	12086	N	PRO	I	21	19.695	-14.742	-22.723	1.00179.95	MOL3	N
ATOM	12087	CD	PRO	I	21	20.392	-14.285	-23.942	1.00179.35	MOL3	C
ATOM	12088	CA	PRO	I	21	18.247	-14.781	-22.949	1.00180.09	MOL3	C
ATOM	12089	CB	PRO	I	21	18.151	-14.857	-24.465	1.00179.29	MOL3	C
ATOM	12090	CG	PRO	I	21	19.237	-13.907	-24.870	1.00180.07	MOL3	C
ATOM	12091	C	PRO	I	21	17.503	-15.917	-22.235	1.00180.81	MOL3	C
ATOM	12092	O	PRO	I	21	16.366	-15.731	-21.794	1.00179.87	MOL3	O
ATOM	12093	N	GLY	I	22	18.139	-17.083	-22.117	1.00181.44	MOL3	N
ATOM	12094	CA	GLY	I	22	17.503	-18.198	-21.432	1.00180.30	MOL3	C
ATOM	12095	C	GLY	I	22	17.641	-19.565	-22.081	1.00179.20	MOL3	C
ATOM	12096	O	GLY	I	22	17.286	-19.749	-23.250	1.00179.81	MOL3	O
ATOM	12097	N	GLY	I	23	18.151	-20.527	-21.314	1.00177.37	MOL3	N
ATOM	12098	CA	GLY	I	23	18.321	-21.882	-21.815	1.00174.20	MOL3	C
ATOM	12099	C	GLY	I	23	19.267	-22.011	-22.996	1.00171.91	MOL3	C
ATOM	12100	O	GLY	I	23	18.878	-22.495	-24.062	1.00173.02	MOL3	O
ATOM	12101	N	SER	I	24	20.512	-21.584	-22.807	1.00167.31	MOL3	N
ATOM	12102	CA	SER	I	24	21.517	-21.654	-23.861	1.00161.68	MOL3	C
ATOM	12103	CB	SER	I	24	21.215	-20.606	-24.941	1.00161.88	MOL3	C
ATOM	12104	OG	SER	I	24	21.059	-19.311	-24.383	1.00162.49	MOL3	O
ATOM	12105	C	SER	I	24	22.922	-21.442	-23.296	1.00157.77	MOL3	C
ATOM	12106	O	SER	I	24	23.103	-20.705	-22.326	1.00156.54	MOL3	O
ATOM	12107	N	MET	I	25	23.908	-22.101	-23.901	1.00153.19	MOL3	N
ATOM	12108	CA	MET	I	25	25.298	-21.980	-23.470	1.00147.19	MOL3	C
ATOM	12109	CB	MET	I	25	25.658	-23.140	-22.531	1.00148.21	MOL3	C
ATOM	12110	CG	MET	I	25	24.828	-23.180	-21.241	1.00149.84	MOL3	C
ATOM	12111	SD	MET	I	25	25.033	-24.682	-20.221	1.00155.01	MOL3	S
ATOM	12112	CE	MET	I	25	26.088	-24.076	-18.866	1.00151.08	MOL3	C
ATOM	12113	C	MET	I	25	26.236	-21.943	-24.686	1.00143.35	MOL3	C
ATOM	12114	O	MET	I	25	25.825	-22.221	-25.815	1.00142.51	MOL3	O
ATOM	12115	N	LYS	I	26	27.494	-21.585	-24.449	1.00139.00	MOL3	N
ATOM	12116	CA	LYS	I	26	28.491	-21.492	-25.514	1.00136.16	MOL3	C
ATOM	12117	CB	LYS	I	26	29.665	-20.617	-25.051	1.00138.48	MOL3	C
ATOM	12118	CG	LYS	I	26	29.436	-19.119	-25.209	1.00139.69	MOL3	C
ATOM	12119	CD	LYS	I	26	28.154	-18.661	-24.524	1.00141.68	MOL3	C
ATOM	12120	CE	LYS	I	26	27.854	-17.196	-24.830	1.00140.20	MOL3	C
ATOM	12121	NZ	LYS	I	26	26.570	-16.747	-24.225	1.00138.85	MOL3	N
ATOM	12122	C	LYS	I	26	29.028	-22.842	-25.991	1.00132.33	MOL3	C
ATOM	12123	O	LYS	I	26	29.700	-23.552	-25.245	1.00130.87	MOL3	O
ATOM	12124	N	LEU	I	27	28.739	-23.182	-27.243	1.00127.83	MOL3	N
ATOM	12125	CA	LEU	I	27	29.201	-24.437	-27.820	1.00126.14	MOL3	C
ATOM	12126	CB	LEU	I	27	28.002	-25.273	-28.267	1.00126.37	MOL3	C
ATOM	12127	CG	LEU	I	27	28.270	-26.698	-28.756	1.00125.28	MOL3	C
ATOM	12128	CD1	LEU	I	27	28.778	-27.539	-27.596	1.00123.34	MOL3	C
ATOM	12129	CD2	LEU	I	27	26.992	-27.300	-29.329	1.00122.30	MOL3	C
ATOM	12130	C	LEU	I	27	30.089	-24.138	-29.022	1.00126.93	MOL3	C
ATOM	12131	O	LEU	I	27	29.592	-23.915	-30.123	1.00125.48	MOL3	O
ATOM	12132	N	ASP	I	28	31.400	-24.133	-28.814	1.00130.16	MOL3	N
ATOM	12133	CA	ASP	I	28	32.329	-23.848	-29.899	1.00133.88	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12134	CB	ASP	I	28	33.775	-23.863	-29.384	1.00139.45	MOL3	C
ATOM	12135	CG	ASP	I	28	34.040	-22.776	-28.349	1.00142.85	MOL3	C
ATOM	12136	OD1	ASP	I	28	33.393	-22.808	-27.282	1.00140.81	MOL3	O
ATOM	12137	OD2	ASP	I	28	34.891	-21.890	-28.602	1.00145.07	MOL3	O
ATOM	12138	C	ASP	I	28	32.173	-24.842	-31.045	1.00133.64	MOL3	C
ATOM	12139	O	ASP	I	28	31.911	-26.026	-30.831	1.00131.79	MOL3	O
ATOM	12140	N	ILE	I	29	32.321	-24.344	-32.267	1.00135.74	MOL3	N
ATOM	12141	CA	ILE	I	29	32.214	-25.190	-33.447	1.00138.15	MOL3	C
ATOM	12142	CB	ILE	I	29	32.085	-24.365	-34.739	1.00142.38	MOL3	C
ATOM	12143	CG2	ILE	I	29	30.785	-23.569	-34.717	1.00144.15	MOL3	C
ATOM	12144	CG1	ILE	I	29	33.317	-23.463	-34.896	1.00144.80	MOL3	C
ATOM	12145	CD1	ILE	I	29	33.425	-22.759	-36.238	1.00144.70	MOL3	C
ATOM	12146	C	ILE	I	29	33.486	-26.012	-33.554	1.00136.65	MOL3	C
ATOM	12147	O	ILE	I	29	34.481	-25.727	-32.883	1.00136.50	MOL3	O
ATOM	12148	N	GLY	I	30	33.455	-27.027	-34.407	1.00133.72	MOL3	N
ATOM	12149	CA	GLY	I	30	34.625	-27.862	-34.571	1.00130.45	MOL3	C
ATOM	12150	C	GLY	I	30	34.696	-28.942	-33.514	1.00125.76	MOL3	C
ATOM	12151	O	GLY	I	30	34.797	-28.668	-32.318	1.00124.14	MOL3	O
ATOM	12152	N	ILE	I	31	34.649	-30.183	-33.973	1.00122.20	MOL3	N
ATOM	12153	CA	ILE	I	31	34.699	-31.334	-33.095	1.00117.41	MOL3	C
ATOM	12154	CB	ILE	I	31	33.791	-32.462	-33.634	1.00115.17	MOL3	C
ATOM	12155	CG2	ILE	I	31	33.610	-33.530	-32.575	1.00115.99	MOL3	C
ATOM	12156	CG1	ILE	I	31	32.428	-31.897	-34.053	1.00109.89	MOL3	C
ATOM	12157	CD1	ILE	I	31	32.432	-31.169	-35.386	1.00106.19	MOL3	C
ATOM	12158	C	ILE	I	31	36.134	-31.849	-33.004	1.00116.13	MOL3	C
ATOM	12159	O	ILE	I	31	36.793	-32.045	-34.022	1.00115.05	MOL3	O
ATOM	12160	N	ILE	I	32	36.611	-32.064	-31.785	1.00116.20	MOL3	N
ATOM	12161	CA	ILE	I	32	37.959	-32.563	-31.569	1.00119.99	MOL3	C
ATOM	12162	CB	ILE	I	32	38.343	-32.472	-30.084	1.00121.62	MOL3	C
ATOM	12163	CG2	ILE	I	32	39.748	-33.022	-29.879	1.00124.67	MOL3	C
ATOM	12164	CG1	ILE	I	32	38.249	-31.020	-29.607	1.00121.53	MOL3	C
ATOM	12165	CD1	ILE	I	32	38.719	-30.806	-28.169	1.00120.71	MOL3	C
ATOM	12166	C	ILE	I	32	38.087	-34.021	-32.013	1.00122.93	MOL3	C
ATOM	12167	O	ILE	I	32	37.331	-34.877	-31.564	1.00123.52	MOL3	O
ATOM	12168	N	ASN	I	33	39.046	-34.291	-32.896	1.00128.61	MOL3	N
ATOM	12169	CA	ASN	I	33	39.295	-35.640	-33.410	1.00134.25	MOL3	C
ATOM	12170	CB	ASN	I	33	39.338	-36.659	-32.266	1.00138.33	MOL3	C
ATOM	12171	CG	ASN	I	33	40.529	-36.467	-31.350	1.00143.66	MOL3	C
ATOM	12172	OD1	ASN	I	33	40.677	-37.177	-30.354	1.00147.45	MOL3	O
ATOM	12173	ND2	ASN	I	33	41.387	-35.508	-31.682	1.00147.64	MOL3	N
ATOM	12174	C	ASN	I	33	38.268	-36.109	-34.434	1.00136.93	MOL3	C
ATOM	12175	O	ASN	I	33	38.037	-37.307	-34.572	1.00137.56	MOL3	O
ATOM	12176	N	GLU	I	34	37.661	-35.171	-35.151	1.00141.98	MOL3	N
ATOM	12177	CA	GLU	I	34	36.659	-35.495	-36.162	1.00147.90	MOL3	C
ATOM	12178	CB	GLU	I	34	36.202	-34.206	-36.851	1.00149.63	MOL3	C
ATOM	12179	CG	GLU	I	34	35.181	-34.405	-37.957	1.00155.63	MOL3	C
ATOM	12180	CD	GLU	I	34	34.739	-33.094	-38.585	1.00157.32	MOL3	C
ATOM	12181	OE1	GLU	I	34	34.140	-32.265	-37.867	1.00159.91	MOL3	O
ATOM	12182	OE2	GLU	I	34	34.993	-32.894	-39.794	1.00156.42	MOL3	O
ATOM	12183	C	GLU	I	34	37.199	-36.483	-37.198	1.00152.50	MOL3	C
ATOM	12184	O	GLU	I	34	36.446	-37.034	-38.005	1.00150.94	MOL3	O
ATOM	12185	N	ASN	I	35	38.506	-36.718	-37.162	1.00160.08	MOL3	N
ATOM	12186	CA	ASN	I	35	39.136	-37.626	-38.113	1.00166.41	MOL3	C
ATOM	12187	CB	ASN	I	35	40.524	-37.093	-38.495	1.00169.05	MOL3	C
ATOM	12188	CG	ASN	I	35	40.452	-35.768	-39.252	1.00168.59	MOL3	C
ATOM	12189	OD1	ASN	I	35	39.841	-35.678	-40.319	1.00166.12	MOL3	O
ATOM	12190	ND2	ASN	I	35	41.076	-34.735	-38.696	1.00169.03	MOL3	N
ATOM	12191	C	ASN	I	35	39.210	-39.101	-37.680	1.00167.95	MOL3	C
ATOM	12192	O	ASN	I	35	39.466	-39.975	-38.511	1.00169.37	MOL3	O
ATOM	12193	N	GLN	I	36	38.982	-39.380	-36.397	1.00167.80	MOL3	N
ATOM	12194	CA	GLN	I	36	38.996	-40.760	-35.906	1.00169.12	MOL3	C
ATOM	12195	CB	GLN	I	36	38.535	-40.814	-34.444	1.00168.38	MOL3	C
ATOM	12196	CG	GLN	I	36	39.615	-40.555	-33.393	1.00167.52	MOL3	C
ATOM	12197	CD	GLN	I	36	40.523	-41.758	-33.160	1.00166.66	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12198	OE1	GLN	I	36	41.340	-41.765	-32.237	1.00163.74	MOL3	O
ATOM	12199	NE2	GLN	I	36	40.383	-42.779	-34.000	1.00167.07	MOL3	N
ATOM	12200	C	GLN	I	36	38.034	-41.584	-36.760	1.00171.58	MOL3	C
ATOM	12201	O	GLN	I	36	36.821	-41.354	-36.727	1.00169.42	MOL3	O
ATOM	12202	N	ARG	I	37	38.569	-42.544	-37.514	1.00175.43	MOL3	N
ATOM	12203	CA	ARG	I	37	37.741	-43.376	-38.385	1.00178.58	MOL3	C
ATOM	12204	CB	ARG	I	37	38.587	-44.001	-39.503	1.00180.60	MOL3	C
ATOM	12205	CG	ARG	I	37	37.771	-44.812	-40.517	1.00180.87	MOL3	C
ATOM	12206	CD	ARG	I	37	38.629	-45.374	-41.654	1.00180.99	MOL3	C
ATOM	12207	NE	ARG	I	37	38.691	-44.504	-42.830	1.00180.13	MOL3	N
ATOM	12208	CZ	ARG	I	37	39.248	-43.295	-42.859	1.00179.27	MOL3	C
ATOM	12209	NH1	ARG	I	37	39.806	-42.780	-41.772	1.00178.28	MOL3	N
ATOM	12210	NH2	ARG	I	37	39.253	-42.599	-43.989	1.00178.79	MOL3	N
ATOM	12211	C	ARG	I	37	36.966	-44.474	-37.661	1.00179.06	MOL3	C
ATOM	12212	O	ARG	I	37	37.439	-45.049	-36.676	1.00177.51	MOL3	O
ATOM	12213	N	VAL	I	38	35.767	-44.749	-38.174	1.00180.94	MOL3	N
ATOM	12214	CA	VAL	I	38	34.870	-45.763	-37.623	1.00181.97	MOL3	C
ATOM	12215	CB	VAL	I	38	33.609	-45.946	-38.515	1.00182.48	MOL3	C
ATOM	12216	CG1	VAL	I	38	32.638	-46.912	-37.851	1.00180.01	MOL3	C
ATOM	12217	CG2	VAL	I	38	32.940	-44.598	-38.770	1.00182.29	MOL3	C
ATOM	12218	C	VAL	I	38	35.578	-47.106	-37.513	1.00181.78	MOL3	C
ATOM	12219	O	VAL	I	38	35.495	-47.940	-38.416	1.00182.53	MOL3	O
ATOM	12220	N	SER	I	39	36.272	-47.314	-36.402	1.00180.64	MOL3	N
ATOM	12221	CA	SER	I	39	36.995	-48.557	-36.198	1.00180.27	MOL3	C
ATOM	12222	CB	SER	I	39	37.880	-48.450	-34.954	1.00182.42	MOL3	C
ATOM	12223	OG	SER	I	39	38.805	-49.523	-34.890	1.00184.31	MOL3	O
ATOM	12224	C	SER	I	39	36.027	-49.734	-36.065	1.00178.35	MOL3	C
ATOM	12225	O	SER	I	39	35.590	-50.080	-34.965	1.00177.64	MOL3	O
ATOM	12226	N	MET	I	40	35.687	-50.333	-37.203	1.00175.54	MOL3	N
ATOM	12227	CA	MET	I	40	34.791	-51.486	-37.245	1.00169.58	MOL3	C
ATOM	12228	CB	MET	I	40	33.400	-51.100	-37.771	1.00168.92	MOL3	C
ATOM	12229	CG	MET	I	40	32.565	-50.221	-36.855	1.00166.14	MOL3	C
ATOM	12230	SD	MET	I	40	30.812	-50.310	-37.299	1.00161.34	MOL3	S
ATOM	12231	CE	MET	I	40	30.822	-49.553	-38.922	1.00163.80	MOL3	C
ATOM	12232	C	MET	I	40	35.373	-52.562	-38.159	1.00164.34	MOL3	C
ATOM	12233	O	MET	I	40	34.960	-52.686	-39.316	1.00163.71	MOL3	O
ATOM	12234	N	SER	I	41	36.339	-53.323	-37.649	1.00156.31	MOL3	N
ATOM	12235	CA	SER	I	41	36.942	-54.392	-38.435	1.00148.84	MOL3	C
ATOM	12236	CB	SER	I	41	37.887	-55.236	-37.578	1.00147.06	MOL3	C
ATOM	12237	OG	SER	I	41	38.952	-54.454	-37.077	1.00143.09	MOL3	O
ATOM	12238	C	SER	I	41	35.789	-55.249	-38.925	1.00145.37	MOL3	C
ATOM	12239	O	SER	I	41	35.267	-56.089	-38.198	1.00146.63	MOL3	O
ATOM	12240	N	ARG	I	42	35.389	-55.020	-40.165	1.00140.97	MOL3	N
ATOM	12241	CA	ARG	I	42	34.274	-55.735	-40.760	1.00135.24	MOL3	C
ATOM	12242	CB	ARG	I	42	34.191	-55.397	-42.251	1.00138.21	MOL3	C
ATOM	12243	CG	ARG	I	42	32.791	-55.444	-42.836	1.00142.33	MOL3	C
ATOM	12244	CD	ARG	I	42	32.624	-54.362	-43.900	1.00147.22	MOL3	C
ATOM	12245	NE	ARG	I	42	32.913	-53.033	-43.356	1.00151.01	MOL3	N
ATOM	12246	CZ	ARG	I	42	32.777	-51.891	-44.027	1.00151.43	MOL3	C
ATOM	12247	NH1	ARG	I	42	32.350	-51.895	-45.284	1.00151.19	MOL3	N
ATOM	12248	NH2	ARG	I	42	33.074	-50.739	-43.440	1.00152.19	MOL3	N
ATOM	12249	C	ARG	I	42	34.294	-57.249	-40.567	1.00128.50	MOL3	C
ATOM	12250	O	ARG	I	42	35.346	-57.878	-40.420	1.00126.72	MOL3	O
ATOM	12251	N	ASN	I	43	33.090	-57.805	-40.553	1.00121.76	MOL3	N
ATOM	12252	CA	ASN	I	43	32.846	-59.229	-40.405	1.00114.72	MOL3	C
ATOM	12253	CB	ASN	I	43	33.385	-59.960	-41.628	1.00121.20	MOL3	C
ATOM	12254	CG	ASN	I	43	32.607	-59.614	-42.881	1.00126.99	MOL3	C
ATOM	12255	OD1	ASN	I	43	32.585	-58.458	-43.308	1.00131.03	MOL3	O
ATOM	12256	ND2	ASN	I	43	31.947	-60.608	-43.467	1.00128.09	MOL3	N
ATOM	12257	C	ASN	I	43	33.274	-59.943	-39.129	1.00106.15	MOL3	C
ATOM	12258	O	ASN	I	43	32.968	-61.125	-38.971	1.00109.43	MOL3	O
ATOM	12259	N	ILE	I	44	33.953	-59.262	-38.206	1.00 92.33	MOL3	N
ATOM	12260	CA	ILE	I	44	34.334	-59.945	-36.968	1.00 78.29	MOL3	C
ATOM	12261	CB	ILE	I	44	35.195	-59.098	-36.010	1.00 71.39	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12262	CG2	ILE	I	44	36.374	-58.488	-36.736	1.00	77.24	MOL3	C
ATOM	12263	CG1	ILE	I	44	34.335	-58.031	-35.359	1.00	62.95	MOL3	C
ATOM	12264	CD1	ILE	I	44	35.046	-57.323	-34.262	1.00	60.82	MOL3	C
ATOM	12265	C	ILE	I	44	33.052	-60.237	-36.227	1.00	72.52	MOL3	C
ATOM	12266	O	ILE	I	44	33.018	-61.063	-35.328	1.00	69.19	MOL3	O
ATOM	12267	N	GLU	I	45	31.995	-59.535	-36.607	1.00	71.23	MOL3	N
ATOM	12268	CA	GLU	I	45	30.699	-59.722	-35.985	1.00	72.96	MOL3	C
ATOM	12269	CB	GLU	I	45	29.681	-58.728	-36.539	1.00	75.42	MOL3	C
ATOM	12270	CG	GLU	I	45	30.258	-57.695	-37.494	1.00	92.67	MOL3	C
ATOM	12271	CD	GLU	I	45	29.653	-57.785	-38.895	1.00	103.60	MOL3	C
ATOM	12272	OE1	GLU	I	45	28.517	-58.303	-39.013	1.00	106.90	MOL3	O
ATOM	12273	OE2	GLU	I	45	30.302	-57.325	-39.871	1.00	104.63	MOL3	O
ATOM	12274	C	GLU	I	45	30.226	-61.127	-36.290	1.00	70.37	MOL3	C
ATOM	12275	O	GLU	I	45	29.288	-61.625	-35.674	1.00	75.71	MOL3	O
ATOM	12276	N	SER	I	46	30.871	-61.772	-37.250	1.00	66.05	MOL3	N
ATOM	12277	CA	SER	I	46	30.482	-63.127	-37.604	1.00	67.53	MOL3	C
ATOM	12278	CB	SER	I	46	30.000	-63.188	-39.055	1.00	66.91	MOL3	C
ATOM	12279	OG	SER	I	46	30.684	-62.251	-39.865	1.00	70.73	MOL3	O
ATOM	12280	C	SER	I	46	31.582	-64.150	-37.367	1.00	66.95	MOL3	C
ATOM	12281	O	SER	I	46	31.358	-65.353	-37.503	1.00	68.04	MOL3	O
ATOM	12282	N	ARG	I	47	32.765	-63.671	-36.999	1.00	64.16	MOL3	N
ATOM	12283	CA	ARG	I	47	33.884	-64.558	-36.724	1.00	62.29	MOL3	C
ATOM	12284	CB	ARG	I	47	35.204	-63.917	-37.163	1.00	59.57	MOL3	C
ATOM	12285	CG	ARG	I	47	35.200	-63.317	-38.550	1.00	56.22	MOL3	C
ATOM	12286	CD	ARG	I	47	36.607	-63.280	-39.127	1.00	60.55	MOL3	C
ATOM	12287	NE	ARG	I	47	37.637	-62.948	-38.140	1.00	64.99	MOL3	N
ATOM	12288	CZ	ARG	I	47	38.135	-61.730	-37.925	1.00	70.18	MOL3	C
ATOM	12289	NH1	ARG	I	47	37.702	-60.681	-38.629	1.00	68.79	MOL3	N
ATOM	12290	NH2	ARG	I	47	39.090	-61.566	-37.013	1.00	65.99	MOL3	N
ATOM	12291	C	ARG	I	47	33.948	-64.853	-35.224	1.00	63.25	MOL3	C
ATOM	12292	O	ARG	I	47	34.722	-65.697	-34.783	1.00	69.03	MOL3	O
ATOM	12293	N	SER	I	48	33.133	-64.154	-34.444	1.00	57.25	MOL3	N
ATOM	12294	CA	SER	I	48	33.121	-64.332	-33.002	1.00	55.05	MOL3	C
ATOM	12295	CB	SER	I	48	32.484	-63.107	-32.334	1.00	57.41	MOL3	C
ATOM	12296	OG	SER	I	48	32.431	-63.231	-30.919	1.00	60.35	MOL3	O
ATOM	12297	C	SER	I	48	32.368	-65.581	-32.586	1.00	56.43	MOL3	C
ATOM	12298	O	SER	I	48	31.442	-66.016	-33.265	1.00	53.09	MOL3	O
ATOM	12299	N	THR	I	49	32.783	-66.151	-31.460	1.00	57.82	MOL3	N
ATOM	12300	CA	THR	I	49	32.155	-67.338	-30.904	1.00	58.63	MOL3	C
ATOM	12301	CB	THR	I	49	32.918	-67.825	-29.677	1.00	61.95	MOL3	C
ATOM	12302	OG1	THR	I	49	32.690	-66.924	-28.585	1.00	63.24	MOL3	O
ATOM	12303	CG2	THR	I	49	34.398	-67.863	-29.971	1.00	69.51	MOL3	C
ATOM	12304	C	THR	I	49	30.768	-66.928	-30.443	1.00	58.47	MOL3	C
ATOM	12305	O	THR	I	49	29.925	-67.775	-30.149	1.00	65.64	MOL3	O
ATOM	12306	N	SER	I	50	30.557	-65.619	-30.352	1.00	51.66	MOL3	N
ATOM	12307	CA	SER	I	50	29.283	-65.054	-29.931	1.00	45.28	MOL3	C
ATOM	12308	CB	SER	I	50	29.392	-64.456	-28.519	1.00	47.18	MOL3	C
ATOM	12309	OG	SER	I	50	30.412	-63.477	-28.395	1.00	40.37	MOL3	O
ATOM	12310	C	SER	I	50	28.953	-63.980	-30.942	1.00	44.20	MOL3	C
ATOM	12311	O	SER	I	50	29.090	-62.797	-30.676	1.00	47.70	MOL3	O
ATOM	12312	N	PRO	I	51	28.509	-64.395	-32.127	1.00	45.21	MOL3	N
ATOM	12313	CD	PRO	I	51	28.056	-65.785	-32.242	1.00	46.36	MOL3	C
ATOM	12314	CA	PRO	I	51	28.115	-63.618	-33.314	1.00	43.94	MOL3	C
ATOM	12315	CB	PRO	I	51	27.623	-64.678	-34.291	1.00	46.00	MOL3	C
ATOM	12316	CG	PRO	I	51	28.124	-65.997	-33.710	1.00	53.03	MOL3	C
ATOM	12317	C	PRO	I	51	27.015	-62.633	-33.027	1.00	42.77	MOL3	C
ATOM	12318	O	PRO	I	51	26.266	-62.804	-32.079	1.00	50.02	MOL3	O
ATOM	12319	N	TRP	I	52	26.886	-61.625	-33.871	1.00	42.01	MOL3	N
ATOM	12320	CA	TRP	I	52	25.842	-60.631	-33.676	1.00	43.72	MOL3	C
ATOM	12321	CB	TRP	I	52	26.248	-59.690	-32.561	1.00	41.79	MOL3	C
ATOM	12322	CG	TRP	I	52	27.348	-58.743	-32.939	1.00	47.86	MOL3	C
ATOM	12323	CD2	TRP	I	52	28.725	-58.830	-32.554	1.00	45.17	MOL3	C
ATOM	12324	CE2	TRP	I	52	29.362	-57.675	-33.024	1.00	41.06	MOL3	C
ATOM	12325	CE3	TRP	I	52	29.475	-59.771	-31.848	1.00	52.60	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12326	CD1	TRP	I	52	27.219	-57.576	-33.629	1.00	45.22	MOL3	C
ATOM	12327	NE1	TRP	I	52	28.423	-56.926	-33.679	1.00	44.52	MOL3	N
ATOM	12328	CZ2	TRP	I	52	30.706	-57.431	-32.809	1.00	42.81	MOL3	C
ATOM	12329	CZ3	TRP	I	52	30.812	-59.525	-31.634	1.00	54.69	MOL3	C
ATOM	12330	CH2	TRP	I	52	31.413	-58.364	-32.112	1.00	50.64	MOL3	C
ATOM	12331	C	TRP	I	52	25.559	-59.825	-34.937	1.00	47.78	MOL3	C
ATOM	12332	O	TRP	I	52	26.452	-59.611	-35.751	1.00	57.91	MOL3	O
ATOM	12333	N	ASN	I	53	24.318	-59.379	-35.102	1.00	47.44	MOL3	N
ATOM	12334	CA	ASN	I	53	23.940	-58.581	-36.266	1.00	52.67	MOL3	C
ATOM	12335	CB	ASN	I	53	22.504	-58.853	-36.697	1.00	59.42	MOL3	C
ATOM	12336	CG	ASN	I	53	22.321	-60.215	-37.296	1.00	72.49	MOL3	C
ATOM	12337	OD1	ASN	I	53	21.503	-61.011	-36.818	1.00	80.15	MOL3	O
ATOM	12338	ND2	ASN	I	53	23.068	-60.500	-38.360	1.00	76.42	MOL3	N
ATOM	12339	C	ASN	I	53	24.022	-57.114	-35.917	1.00	55.36	MOL3	C
ATOM	12340	O	ASN	I	53	24.062	-56.747	-34.745	1.00	56.59	MOL3	O
ATOM	12341	N	TYR	I	54	24.036	-56.274	-36.945	1.00	59.30	MOL3	N
ATOM	12342	CA	TYR	I	54	24.083	-54.827	-36.763	1.00	60.15	MOL3	C
ATOM	12343	CB	TYR	I	54	25.236	-54.194	-37.549	1.00	67.64	MOL3	C
ATOM	12344	CG	TYR	I	54	26.588	-54.204	-36.862	1.00	73.74	MOL3	C
ATOM	12345	CD1	TYR	I	54	27.695	-54.760	-37.479	1.00	79.03	MOL3	C
ATOM	12346	CE1	TYR	I	54	28.954	-54.712	-36.888	1.00	85.47	MOL3	C
ATOM	12347	CD2	TYR	I	54	26.770	-53.603	-35.627	1.00	80.28	MOL3	C
ATOM	12348	CE2	TYR	I	54	28.027	-53.551	-35.026	1.00	85.95	MOL3	C
ATOM	12349	CZ	TYR	I	54	29.116	-54.106	-35.665	1.00	85.84	MOL3	C
ATOM	12350	OH	TYR	I	54	30.374	-54.042	-35.095	1.00	89.54	MOL3	O
ATOM	12351	C	TYR	I	54	22.781	-54.287	-37.299	1.00	58.45	MOL3	C
ATOM	12352	O	TYR	I	54	22.101	-54.940	-38.082	1.00	64.52	MOL3	O
ATOM	12353	N	THR	I	55	22.432	-53.089	-36.872	1.00	59.53	MOL3	N
ATOM	12354	CA	THR	I	55	21.201	-52.449	-37.312	1.00	64.27	MOL3	C
ATOM	12355	CB	THR	I	55	20.052	-52.673	-36.344	1.00	62.30	MOL3	C
ATOM	12356	OG1	THR	I	55	19.817	-54.074	-36.188	1.00	66.33	MOL3	O
ATOM	12357	OG2	THR	I	55	18.810	-52.003	-36.869	1.00	62.90	MOL3	C
ATOM	12358	C	THR	I	55	21.491	-50.975	-37.279	1.00	68.03	MOL3	C
ATOM	12359	O	THR	I	55	21.766	-50.431	-36.212	1.00	72.64	MOL3	O
ATOM	12360	N	VAL	I	56	21.423	-50.318	-38.428	1.00	68.68	MOL3	N
ATOM	12361	CA	VAL	I	56	21.721	-48.896	-38.473	1.00	66.68	MOL3	C
ATOM	12362	CB	VAL	I	56	22.607	-48.547	-39.683	1.00	65.22	MOL3	C
ATOM	12363	CG1	VAL	I	56	23.143	-47.126	-39.538	1.00	64.85	MOL3	C
ATOM	12364	CG2	VAL	I	56	23.734	-49.553	-39.818	1.00	70.15	MOL3	C
ATOM	12365	C	VAL	I	56	20.494	-48.006	-38.564	1.00	65.12	MOL3	C
ATOM	12366	O	VAL	I	56	19.517	-48.338	-39.224	1.00	68.43	MOL3	O
ATOM	12367	N	THR	I	57	20.540	-46.873	-37.882	1.00	63.18	MOL3	N
ATOM	12368	CA	THR	I	57	19.450	-45.922	-37.985	1.00	65.41	MOL3	C
ATOM	12369	CB	THR	I	57	18.649	-45.749	-36.682	1.00	64.42	MOL3	C
ATOM	12370	OG1	THR	I	57	19.343	-44.880	-35.778	1.00	62.37	MOL3	O
ATOM	12371	OG2	THR	I	57	18.436	-47.086	-36.043	1.00	67.87	MOL3	C
ATOM	12372	C	THR	I	57	20.100	-44.604	-38.370	1.00	69.15	MOL3	C
ATOM	12373	O	THR	I	57	21.212	-44.273	-37.913	1.00	68.91	MOL3	O
ATOM	12374	N	TRP	I	58	19.421	-43.867	-39.243	1.00	66.81	MOL3	N
ATOM	12375	CA	TRP	I	58	19.950	-42.598	-39.706	1.00	65.75	MOL3	C
ATOM	12376	CB	TRP	I	58	20.240	-42.632	-41.218	1.00	69.27	MOL3	C
ATOM	12377	CG	TRP	I	58	20.671	-41.296	-41.743	1.00	68.80	MOL3	C
ATOM	12378	CD2	TRP	I	58	19.861	-40.368	-42.469	1.00	72.41	MOL3	C
ATOM	12379	CE2	TRP	I	58	20.612	-39.180	-42.610	1.00	73.32	MOL3	C
ATOM	12380	CE3	TRP	I	58	18.570	-40.422	-43.007	1.00	73.79	MOL3	C
ATOM	12381	CD1	TRP	I	58	21.857	-40.659	-41.496	1.00	67.42	MOL3	C
ATOM	12382	NE1	TRP	I	58	21.826	-39.386	-42.008	1.00	72.38	MOL3	N
ATOM	12383	CZ2	TRP	I	58	20.112	-38.056	-43.266	1.00	72.82	MOL3	C
ATOM	12384	CZ3	TRP	I	58	18.076	-39.306	-43.657	1.00	76.30	MOL3	C
ATOM	12385	CH2	TRP	I	58	18.845	-38.139	-43.780	1.00	77.05	MOL3	C
ATOM	12386	C	TRP	I	58	18.999	-41.463	-39.429	1.00	61.07	MOL3	C
ATOM	12387	O	TRP	I	58	17.832	-41.524	-39.787	1.00	60.74	MOL3	O
ATOM	12388	N	ASP	I	59	19.500	-40.431	-38.770	1.00	60.51	MOL3	N
ATOM	12389	CA	ASP	I	59	18.696	-39.254	-38.500	1.00	62.88	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12390	CB	ASP	I	59	18.256	-39.172	-37.045	1.00	68.73	MOL3	C
ATOM	12391	CG	ASP	I	59	17.528	-37.871	-36.733	1.00	72.79	MOL3	C
ATOM	12392	OD1	ASP	I	59	16.982	-37.731	-35.617	1.00	72.88	MOL3	O
ATOM	12393	OD2	ASP	I	59	17.507	-36.979	-37.605	1.00	73.48	MOL3	O
ATOM	12394	C	ASP	I	59	19.530	-38.040	-38.834	1.00	69.37	MOL3	C
ATOM	12395	O	ASP	I	59	20.581	-37.792	-38.228	1.00	70.12	MOL3	O
ATOM	12396	N	PRO	I	60	19.053	-37.254	-39.803	1.00	72.10	MOL3	N
ATOM	12397	CD	PRO	I	60	17.643	-37.400	-40.203	1.00	68.92	MOL3	C
ATOM	12398	CA	PRO	I	60	19.614	-36.019	-40.363	1.00	73.74	MOL3	C
ATOM	12399	CB	PRO	I	60	18.524	-35.580	-41.318	1.00	75.30	MOL3	C
ATOM	12400	CG	PRO	I	60	17.280	-35.993	-40.566	1.00	67.02	MOL3	C
ATOM	12401	C	PRO	I	60	19.875	-34.937	-39.323	1.00	74.13	MOL3	C
ATOM	12402	O	PRO	I	60	20.772	-34.097	-39.487	1.00	74.87	MOL3	O
ATOM	12403	N	ASN	I	61	19.055	-34.951	-38.275	1.00	71.15	MOL3	N
ATOM	12404	CA	ASN	I	61	19.146	-33.980	-37.191	1.00	70.87	MOL3	C
ATOM	12405	CB	ASN	I	61	17.750	-33.541	-36.765	1.00	73.60	MOL3	C
ATOM	12406	CG	ASN	I	61	17.078	-32.679	-37.794	1.00	80.65	MOL3	C
ATOM	12407	OD1	ASN	I	61	17.360	-32.791	-38.986	1.00	81.99	MOL3	O
ATOM	12408	ND2	ASN	I	61	16.170	-31.815	-37.346	1.00	85.54	MOL3	N
ATOM	12409	C	ASN	I	61	19.850	-34.551	-35.981	1.00	69.03	MOL3	C
ATOM	12410	O	ASN	I	61	19.536	-34.189	-34.853	1.00	67.81	MOL3	O
ATOM	12411	N	ARG	I	62	20.787	-35.458	-36.206	1.00	69.56	MOL3	N
ATOM	12412	CA	ARG	I	62	21.519	-36.048	-35.102	1.00	69.21	MOL3	C
ATOM	12413	CB	ARG	I	62	20.895	-37.376	-34.682	1.00	74.15	MOL3	C
ATOM	12414	CG	ARG	I	62	21.690	-38.108	-33.600	1.00	76.69	MOL3	C
ATOM	12415	CD	ARG	I	62	21.008	-39.410	-33.214	1.00	75.30	MOL3	C
ATOM	12416	NE	ARG	I	62	20.958	-40.346	-34.329	1.00	71.91	MOL3	N
ATOM	12417	CZ	ARG	I	62	20.201	-41.436	-34.355	1.00	76.00	MOL3	C
ATOM	12418	NH1	ARG	I	62	19.418	-41.727	-33.320	1.00	82.17	MOL3	N
ATOM	12419	NH2	ARG	I	62	20.236	-42.243	-35.410	1.00	76.17	MOL3	N
ATOM	12420	C	ARG	I	62	22.967	-36.269	-35.466	1.00	66.94	MOL3	C
ATOM	12421	O	ARG	I	62	23.287	-36.763	-36.555	1.00	70.53	MOL3	O
ATOM	12422	N	TYR	I	63	23.847	-35.897	-34.552	1.00	59.41	MOL3	N
ATOM	12423	CA	TYR	I	63	25.255	-36.077	-34.802	1.00	60.87	MOL3	C
ATOM	12424	CB	TYR	I	63	25.951	-34.718	-34.900	1.00	64.40	MOL3	C
ATOM	12425	CG	TYR	I	63	27.435	-34.834	-35.112	1.00	60.52	MOL3	C
ATOM	12426	CD1	TYR	I	63	28.307	-34.775	-34.041	1.00	60.25	MOL3	C
ATOM	12427	CE1	TYR	I	63	29.645	-34.968	-34.205	1.00	64.80	MOL3	C
ATOM	12428	CD2	TYR	I	63	27.953	-35.083	-36.368	1.00	61.44	MOL3	C
ATOM	12429	CE2	TYR	I	63	29.298	-35.280	-36.546	1.00	70.48	MOL3	C
ATOM	12430	CZ	TYR	I	63	30.142	-35.226	-35.455	1.00	70.11	MOL3	C
ATOM	12431	OH	TYR	I	63	31.491	-35.467	-35.605	1.00	81.28	MOL3	O
ATOM	12432	C	TYR	I	63	25.851	-36.918	-33.697	1.00	57.17	MOL3	C
ATOM	12433	O	TYR	I	63	25.805	-36.549	-32.529	1.00	59.51	MOL3	O
ATOM	12434	N	PRO	I	64	26.399	-38.081	-34.052	1.00	54.16	MOL3	N
ATOM	12435	CD	PRO	I	64	27.073	-39.001	-33.124	1.00	60.20	MOL3	C
ATOM	12436	CA	PRO	I	64	26.456	-38.585	-35.423	1.00	56.37	MOL3	C
ATOM	12437	CB	PRO	I	64	27.402	-39.777	-35.309	1.00	62.30	MOL3	C
ATOM	12438	CG	PRO	I	64	27.140	-40.277	-33.933	1.00	62.78	MOL3	C
ATOM	12439	C	PRO	I	64	25.081	-38.973	-35.959	1.00	56.35	MOL3	C
ATOM	12440	O	PRO	I	64	24.187	-39.324	-35.189	1.00	47.16	MOL3	O
ATOM	12441	N	SER	I	65	24.925	-38.902	-37.282	1.00	58.87	MOL3	N
ATOM	12442	CA	SER	I	65	23.662	-39.223	-37.935	1.00	58.52	MOL3	C
ATOM	12443	CB	SER	I	65	23.677	-38.729	-39.372	1.00	61.77	MOL3	C
ATOM	12444	OG	SER	I	65	24.803	-39.262	-40.056	1.00	78.46	MOL3	O
ATOM	12445	C	SER	I	65	23.354	-40.710	-37.908	1.00	60.17	MOL3	C
ATOM	12446	O	SER	I	65	22.210	-41.098	-37.696	1.00	61.52	MOL3	O
ATOM	12447	N	GLU	I	66	24.355	-41.552	-38.135	1.00	62.60	MOL3	N
ATOM	12448	CA	GLU	I	66	24.111	-42.987	-38.092	1.00	60.91	MOL3	C
ATOM	12449	CB	GLU	I	66	24.940	-43.722	-39.148	1.00	69.71	MOL3	C
ATOM	12450	CG	GLU	I	66	24.199	-43.996	-40.438	1.00	87.37	MOL3	C
ATOM	12451	CD	GLU	I	66	25.015	-44.826	-41.420	1.00	101.15	MOL3	C
ATOM	12452	OE1	GLU	I	66	24.461	-45.203	-42.482	1.00	106.35	MOL3	O
ATOM	12453	OE2	GLU	I	66	26.207	-45.099	-41.131	1.00	102.75	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	12454	C	GLU	I	66	24.449	-43.529	-36.715	1.00	57.38	MOL3	C
ATOM	12455	O	GLU	I	66	25.476	-43.172	-36.121	1.00	57.75	MOL3	O
ATOM	12456	N	VAL	I	67	23.562	-44.366	-36.192	1.00	50.57	MOL3	N
ATOM	12457	CA	VAL	I	67	23.791	-44.995	-34.896	1.00	52.97	MOL3	C
ATOM	12458	CB	VAL	I	67	22.824	-44.501	-33.808	1.00	49.35	MOL3	C
ATOM	12459	CG1	VAL	I	67	23.160	-45.182	-32.498	1.00	45.91	MOL3	C
ATOM	12460	CG2	VAL	I	67	22.947	-43.010	-33.634	1.00	51.36	MOL3	C
ATOM	12461	C	VAL	I	67	23.585	-46.489	-35.074	1.00	51.44	MOL3	C
ATOM	12462	O	VAL	I	67	22.486	-46.940	-35.371	1.00	41.82	MOL3	O
ATOM	12463	N	VAL	I	68	24.648	-47.251	-34.878	1.00	52.20	MOL3	N
ATOM	12464	CA	VAL	I	68	24.579	-48.676	-35.072	1.00	52.82	MOL3	C
ATOM	12465	CB	VAL	I	68	25.814	-49.132	-35.834	1.00	54.27	MOL3	C
ATOM	12466	CG1	VAL	I	68	25.583	-50.485	-36.462	1.00	57.06	MOL3	C
ATOM	12467	CG2	VAL	I	68	26.162	-48.097	-36.865	1.00	53.35	MOL3	C
ATOM	12468	C	VAL	I	68	24.478	-49.449	-33.768	1.00	55.29	MOL3	C
ATOM	12469	O	VAL	I	68	25.310	-49.277	-32.867	1.00	57.52	MOL3	O
ATOM	12470	N	GLN	I	69	23.456	-50.305	-33.696	1.00	51.88	MOL3	N
ATOM	12471	CA	GLN	I	69	23.185	-51.160	-32.541	1.00	46.59	MOL3	C
ATOM	12472	CB	GLN	I	69	21.748	-50.962	-32.073	1.00	37.10	MOL3	C
ATOM	12473	CG	GLN	I	69	21.416	-49.586	-31.518	1.00	40.21	MOL3	C
ATOM	12474	CD	GLN	I	69	21.661	-49.476	-30.031	1.00	45.80	MOL3	C
ATOM	12475	OE1	GLN	I	69	21.584	-50.467	-29.305	1.00	62.60	MOL3	O
ATOM	12476	NE2	GLN	I	69	21.930	-48.268	-29.561	1.00	41.98	MOL3	N
ATOM	12477	C	GLN	I	69	23.381	-52.628	-32.929	1.00	48.53	MOL3	C
ATOM	12478	O	GLN	I	69	22.961	-53.053	-34.001	1.00	51.42	MOL3	O
ATOM	12479	N	ALA	I	70	24.012	-53.398	-32.050	1.00	49.34	MOL3	N
ATOM	12480	CA	ALA	I	70	24.258	-54.813	-32.301	1.00	50.49	MOL3	C
ATOM	12481	CB	ALA	I	70	25.625	-55.183	-31.774	1.00	48.62	MOL3	C
ATOM	12482	C	ALA	I	70	23.193	-55.664	-31.614	1.00	53.01	MOL3	C
ATOM	12483	O	ALA	I	70	22.481	-55.171	-30.751	1.00	62.67	MOL3	O
ATOM	12484	N	GLN	I	71	23.088	-56.938	-31.986	1.00	49.41	MOL3	N
ATOM	12485	CA	GLN	I	71	22.113	-57.850	-31.383	1.00	40.42	MOL3	C
ATOM	12486	CB	GLN	I	71	20.849	-57.890	-32.222	1.00	39.93	MOL3	C
ATOM	12487	CG	GLN	I	71	20.362	-56.569	-32.754	1.00	58.72	MOL3	C
ATOM	12488	CD	GLN	I	71	19.086	-56.745	-33.573	1.00	78.54	MOL3	C
ATOM	12489	OE1	GLN	I	71	19.117	-57.265	-34.696	1.00	83.05	MOL3	O
ATOM	12490	NE2	GLN	I	71	17.950	-56.333	-33.002	1.00	85.90	MOL3	N
ATOM	12491	C	GLN	I	71	22.694	-59.258	-31.376	1.00	38.43	MOL3	C
ATOM	12492	O	GLN	I	71	22.920	-59.810	-32.438	1.00	42.21	MOL3	O
ATOM	12493	N	CYS	I	72	22.919	-59.860	-30.213	1.00	33.54	MOL3	N
ATOM	12494	CA	CYS	I	72	23.493	-61.200	-30.200	1.00	36.75	MOL3	C
ATOM	12495	C	CYS	I	72	22.672	-62.169	-31.069	1.00	43.44	MOL3	C
ATOM	12496	O	CYS	I	72	21.465	-62.270	-30.915	1.00	43.06	MOL3	O
ATOM	12497	CB	CYS	I	72	23.594	-61.693	-28.762	1.00	38.34	MOL3	C
ATOM	12498	SG	CYS	I	72	24.419	-60.497	-27.654	1.00	51.35	MOL3	S
ATOM	12499	N	ARG	I	73	23.328	-62.877	-31.988	1.00	51.34	MOL3	N
ATOM	12500	CA	ARG	I	73	22.626	-63.796	-32.875	1.00	52.99	MOL3	C
ATOM	12501	CB	ARG	I	73	23.491	-64.095	-34.099	1.00	53.47	MOL3	C
ATOM	12502	CG	ARG	I	73	23.371	-63.034	-35.193	1.00	60.70	MOL3	C
ATOM	12503	CD	ARG	I	73	24.257	-63.334	-36.405	1.00	74.71	MOL3	C
ATOM	12504	NE	ARG	I	73	23.847	-64.525	-37.149	1.00	86.48	MOL3	N
ATOM	12505	CZ	ARG	I	73	22.843	-64.563	-38.024	1.00	93.95	MOL3	C
ATOM	12506	NH1	ARG	I	73	22.134	-63.468	-38.273	1.00	93.66	MOL3	N
ATOM	12507	NH2	ARG	I	73	22.548	-65.698	-38.654	1.00	97.47	MOL3	N
ATOM	12508	C	ARG	I	73	22.102	-65.096	-32.251	1.00	57.97	MOL3	C
ATOM	12509	O	ARG	I	73	21.099	-65.649	-32.725	1.00	58.89	MOL3	O
ATOM	12510	N	ASN	I	74	22.752	-65.582	-31.195	1.00	59.16	MOL3	N
ATOM	12511	CA	ASN	I	74	22.302	-66.808	-30.534	1.00	61.20	MOL3	C
ATOM	12512	CB	ASN	I	74	23.227	-67.983	-30.874	1.00	63.33	MOL3	C
ATOM	12513	CG	ASN	I	74	23.230	-68.319	-32.355	1.00	71.09	MOL3	C
ATOM	12514	OD1	ASN	I	74	24.001	-67.757	-33.132	1.00	76.52	MOL3	O
ATOM	12515	ND2	ASN	I	74	22.353	-69.233	-32.756	1.00	79.30	MOL3	N
ATOM	12516	C	ASN	I	74	22.258	-66.640	-29.023	1.00	61.32	MOL3	C
ATOM	12517	O	ASN	I	74	22.634	-65.597	-28.500	1.00	63.19	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	12518	N	LEU	I	75	21.794	-67.660	-28.314	1.00	59.20	MOL3	N
ATOM	12519	CA	LEU	I	75	21.755	-67.563	-26.870	1.00	58.57	MOL3	C
ATOM	12520	CB	LEU	I	75	20.537	-68.281	-26.320	1.00	61.07	MOL3	C
ATOM	12521	CG	LEU	I	75	19.208	-67.574	-26.554	1.00	62.75	MOL3	C
ATOM	12522	CD1	LEU	I	75	18.094	-68.272	-25.784	1.00	63.42	MOL3	C
ATOM	12523	CD2	LEU	I	75	19.336	-66.145	-26.088	1.00	69.62	MOL3	C
ATOM	12524	C	LEU	I	75	23.028	-68.151	-26.284	1.00	65.13	MOL3	C
ATOM	12525	O	LEU	I	75	23.575	-67.620	-25.324	1.00	64.76	MOL3	O
ATOM	12526	N	GLY	I	76	23.502	-69.251	-26.863	1.00	69.53	MOL3	N
ATOM	12527	CA	GLY	I	76	24.730	-69.860	-26.377	1.00	75.95	MOL3	C
ATOM	12528	C	GLY	I	76	25.887	-69.348	-27.218	1.00	78.77	MOL3	C
ATOM	12529	O	GLY	I	76	25.741	-68.340	-27.899	1.00	80.97	MOL3	O
ATOM	12530	N	CYS	I	77	27.037	-70.017	-27.170	1.00	80.93	MOL3	N
ATOM	12531	CA	CYS	I	77	28.182	-69.603	-27.977	1.00	80.29	MOL3	C
ATOM	12532	C	CYS	I	77	28.372	-70.666	-29.036	1.00	82.30	MOL3	C
ATOM	12533	O	CYS	I	77	27.714	-71.702	-29.005	1.00	85.65	MOL3	O
ATOM	12534	CB	CYS	I	77	29.436	-69.457	-27.114	1.00	76.04	MOL3	C
ATOM	12535	SG	CYS	I	77	29.104	-68.363	-25.697	1.00	92.75	MOL3	S
ATOM	12536	N	ILE	I	78	29.269	-70.413	-29.975	1.00	86.64	MOL3	N
ATOM	12537	CA	ILE	I	78	29.518	-71.349	-31.060	1.00	91.28	MOL3	C
ATOM	12538	CB	ILE	I	78	29.297	-70.624	-32.385	1.00	83.06	MOL3	C
ATOM	12539	CG2	ILE	I	78	29.815	-71.450	-33.536	1.00	81.37	MOL3	C
ATOM	12540	CG1	ILE	I	78	27.815	-70.282	-32.515	1.00	75.71	MOL3	C
ATOM	12541	CD1	ILE	I	78	27.472	-69.576	-33.795	1.00	79.68	MOL3	C
ATOM	12542	C	ILE	I	78	30.921	-71.973	-31.023	1.00	100.86	MOL3	C
ATOM	12543	C	ILE	I	78	31.894	-71.298	-30.694	1.00	102.48	MOL3	O
ATOM	12544	N	ASN	I	79	31.018	-73.262	-31.351	1.00	111.20	MOL3	N
ATOM	12545	CA	ASN	I	79	32.303	-73.962	-31.356	1.00	121.64	MOL3	C
ATOM	12546	CB	ASN	I	79	32.139	-75.397	-30.839	1.00	129.98	MOL3	C
ATOM	12547	CG	ASN	I	79	32.170	-75.485	-29.314	1.00	139.44	MOL3	C
ATOM	12548	OD1	ASN	I	79	33.107	-75.005	-28.667	1.00	142.26	MOL3	O
ATOM	12549	ND2	ASN	I	79	31.148	-76.111	-28.737	1.00	142.57	MOL3	N
ATOM	12550	C	ASN	I	79	32.934	-74.003	-32.746	1.00	123.95	MOL3	C
ATOM	12551	O	ASN	I	79	32.720	-73.106	-33.562	1.00	123.14	MOL3	O
ATOM	12552	N	ALA	I	80	33.724	-75.044	-32.997	1.00	127.12	MOL3	N
ATOM	12553	CA	ALA	I	80	34.384	-75.220	-34.285	1.00	131.19	MOL3	C
ATOM	12554	CB	ALA	I	80	35.306	-76.430	-34.238	1.00	130.77	MOL3	C
ATOM	12555	C	ALA	I	80	33.308	-75.412	-35.348	1.00	133.79	MOL3	C
ATOM	12556	O	ALA	I	80	33.173	-76.490	-35.933	1.00	130.81	MOL3	O
ATOM	12557	N	GLN	I	81	32.546	-74.347	-35.582	1.00	137.91	MOL3	N
ATOM	12558	CA	GLN	I	81	31.453	-74.349	-36.545	1.00	141.10	MOL3	C
ATOM	12559	CB	GLN	I	81	31.984	-74.637	-37.957	1.00	144.01	MOL3	C
ATOM	12560	CG	GLN	I	81	32.170	-73.385	-38.827	1.00	146.30	MOL3	C
ATOM	12561	CD	GLN	I	81	33.159	-72.368	-38.252	1.00	148.19	MOL3	C
ATOM	12562	OE1	GLN	I	81	33.254	-71.239	-38.741	1.00	147.01	MOL3	O
ATOM	12563	NE2	GLN	I	81	33.900	-72.767	-37.221	1.00	146.34	MOL3	N
ATOM	12564	C	GLN	I	81	30.416	-75.388	-36.130	1.00	139.64	MOL3	C
ATOM	12565	O	GLN	I	81	29.576	-75.802	-36.927	1.00	140.30	MOL3	O
ATOM	12566	N	GLY	I	82	30.473	-75.783	-34.861	1.00	137.81	MOL3	N
ATOM	12567	CA	GLY	I	82	29.551	-76.784	-34.354	1.00	135.11	MOL3	C
ATOM	12568	C	GLY	I	82	28.377	-76.274	-33.539	1.00	129.16	MOL3	C
ATOM	12569	O	GLY	I	82	28.085	-76.804	-32.471	1.00	130.23	MOL3	O
ATOM	12570	N	LYS	I	83	27.694	-75.258	-34.050	1.00	122.11	MOL3	N
ATOM	12571	CA	LYS	I	83	26.539	-74.677	-33.375	1.00	117.25	MOL3	C
ATOM	12572	CB	LYS	I	83	25.254	-75.436	-33.743	1.00	121.48	MOL3	C
ATOM	12573	CG	LYS	I	83	24.451	-74.758	-34.864	1.00	128.67	MOL3	C
ATOM	12574	CD	LYS	I	83	23.099	-75.426	-35.132	1.00	129.79	MOL3	C
ATOM	12575	CE	LYS	I	83	22.257	-74.616	-36.129	1.00	128.95	MOL3	C
ATOM	12576	NZ	LYS	I	83	21.875	-73.259	-35.619	1.00	124.03	MOL3	N
ATOM	12577	C	LYS	I	83	26.619	-74.518	-31.856	1.00	112.18	MOL3	C
ATOM	12578	O	LYS	I	83	27.612	-74.877	-31.215	1.00	106.52	MOL3	O
ATOM	12579	N	GLU	I	84	25.539	-73.963	-31.308	1.00	108.47	MOL3	N
ATOM	12580	CA	GLU	I	84	25.384	-73.651	-29.889	1.00	102.61	MOL3	C
ATOM	12581	CB	GLU	I	84	23.899	-73.403	-29.565	1.00	104.06	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12582	CG	GLU	I	84	23.277	-72.227	-30.315	1.00110.83	MOL3	C
ATOM	12583	CD	GLU	I	84	21.986	-71.716	-29.684	1.00115.94	MOL3	C
ATOM	12584	OE1	GLU	I	84	22.013	-71.322	-28.499	1.00114.28	MOL3	O
ATOM	12585	OE2	GLU	I	84	20.945	-71.696	-30.376	1.00122.04	MOL3	O
ATOM	12586	C	GLU	I	84	25.945	-74.621	-28.867	1.00 97.07	MOL3	C
ATOM	12587	O	GLU	I	84	26.056	-75.816	-29.115	1.00101.79	MOL3	O
ATOM	12588	N	ASP	I	85	26.291	-74.075	-27.709	1.00 86.77	MOL3	N
ATOM	12589	CA	ASP	I	85	26.805	-74.843	-26.594	1.00 80.76	MOL3	C
ATOM	12590	CB	ASP	I	85	28.328	-74.821	-26.583	1.00 88.70	MOL3	C
ATOM	12591	CG	ASP	I	85	28.916	-75.526	-25.363	1.00100.36	MOL3	C
ATOM	12592	OD1	ASP	I	85	30.156	-75.709	-25.315	1.00105.99	MOL3	O
ATOM	12593	OD2	ASP	I	85	28.141	-75.894	-24.451	1.00101.76	MOL3	O
ATOM	12594	C	ASP	I	85	26.270	-74.110	-25.389	1.00 76.14	MOL3	C
ATOM	12595	O	ASP	I	85	27.017	-73.467	-24.671	1.00 76.99	MOL3	O
ATOM	12596	N	ILE	I	86	24.969	-74.212	-25.161	1.00 73.75	MOL3	N
ATOM	12597	CA	ILE	I	86	24.359	-73.487	-24.060	1.00 72.05	MOL3	C
ATOM	12598	CB	ILE	I	86	22.878	-73.808	-23.919	1.00 74.81	MOL3	C
ATOM	12599	CG2	ILE	I	86	22.090	-72.495	-24.005	1.00 65.53	MOL3	C
ATOM	12600	CG1	ILE	I	86	22.437	-74.793	-25.013	1.00 78.50	MOL3	C
ATOM	12601	CD1	ILE	I	86	21.899	-74.141	-26.301	1.00 81.27	MOL3	C
ATOM	12602	C	ILE	I	86	25.025	-73.598	-22.698	1.00 71.80	MOL3	C
ATOM	12603	O	ILE	I	86	24.589	-72.958	-21.741	1.00 67.43	MOL3	O
ATOM	12604	N	SER	I	87	26.083	-74.397	-22.610	1.00 73.02	MOL3	N
ATOM	12605	CA	SER	I	87	26.836	-74.532	-21.368	1.00 73.89	MOL3	C
ATOM	12606	CB	SER	I	87	28.135	-75.314	-21.632	1.00 74.46	MOL3	C
ATOM	12607	OG	SER	I	87	28.957	-75.400	-20.477	1.00 81.93	MOL3	O
ATOM	12608	C	SER	I	87	27.163	-73.103	-20.929	1.00 73.31	MOL3	C
ATOM	12609	O	SER	I	87	27.107	-72.767	-19.743	1.00 72.96	MOL3	O
ATOM	12610	N	MET	I	88	27.505	-72.276	-21.919	1.00 74.81	MOL3	N
ATOM	12611	CA	MET	I	88	27.844	-70.857	-21.741	1.00 70.38	MOL3	C
ATOM	12612	CB	MET	I	88	29.305	-70.574	-22.080	1.00 74.17	MOL3	C
ATOM	12613	CG	MET	I	88	30.330	-71.152	-21.147	1.00 81.15	MOL3	C
ATOM	12614	SD	MET	I	88	31.915	-71.043	-21.968	1.00 89.06	MOL3	S
ATOM	12615	CE	MET	I	88	31.469	-71.803	-23.597	1.00 70.24	MOL3	C
ATOM	12616	C	MET	I	88	27.018	-70.075	-22.740	1.00 64.86	MOL3	C
ATOM	12617	O	MET	I	88	26.720	-70.569	-23.825	1.00 63.49	MOL3	O
ATOM	12618	N	ASN	I	89	26.661	-68.848	-22.397	1.00 58.50	MOL3	N
ATOM	12619	CA	ASN	I	89	25.880	-68.057	-23.325	1.00 55.53	MOL3	C
ATOM	12620	CB	ASN	I	89	24.555	-67.628	-22.706	1.00 53.36	MOL3	C
ATOM	12621	CG	ASN	I	89	24.358	-68.176	-21.329	1.00 60.59	MOL3	C
ATOM	12622	OD1	ASN	I	89	24.825	-67.608	-20.328	1.00 66.90	MOL3	O
ATOM	12623	ND2	ASN	I	89	23.668	-69.301	-21.257	1.00 62.81	MOL3	N
ATOM	12624	C	ASN	I	89	26.624	-66.827	-23.783	1.00 53.09	MOL3	C
ATOM	12625	O	ASN	I	89	27.581	-66.389	-23.149	1.00 53.14	MOL3	O
ATOM	12626	N	SER	I	90	26.162	-66.284	-24.902	1.00 49.09	MOL3	N
ATOM	12627	CA	SER	I	90	26.725	-65.083	-25.485	1.00 45.65	MOL3	C
ATOM	12628	CB	SER	I	90	26.618	-65.145	-26.997	1.00 47.24	MOL3	C
ATOM	12629	OG	SER	I	90	25.265	-65.214	-27.378	1.00 52.52	MOL3	O
ATOM	12630	C	SER	I	90	25.903	-63.917	-24.986	1.00 42.91	MOL3	C
ATOM	12631	O	SER	I	90	24.685	-63.965	-25.010	1.00 42.52	MOL3	O
ATOM	12632	N	VAL	I	91	26.563	-62.861	-24.543	1.00 47.63	MOL3	N
ATOM	12633	CA	VAL	I	91	25.847	-61.697	-24.037	1.00 50.80	MOL3	C
ATOM	12634	CB	VAL	I	91	25.992	-61.626	-22.520	1.00 50.09	MOL3	C
ATOM	12635	CG1	VAL	I	91	25.693	-62.988	-21.937	1.00 52.59	MOL3	C
ATOM	12636	CG2	VAL	I	91	27.388	-61.185	-22.150	1.00 49.22	MOL3	C
ATOM	12637	C	VAL	I	91	26.295	-60.369	-24.668	1.00 48.91	MOL3	C
ATOM	12638	O	VAL	I	91	27.444	-60.208	-25.076	1.00 48.59	MOL3	O
ATOM	12639	N	PRO	I	92	25.382	-59.393	-24.738	1.00 47.27	MOL3	N
ATOM	12640	CD	PRO	I	92	24.039	-59.367	-24.130	1.00 50.11	MOL3	C
ATOM	12641	CA	PRO	I	92	25.686	-58.093	-25.320	1.00 47.17	MOL3	C
ATOM	12642	CB	PRO	I	92	24.312	-57.459	-25.445	1.00 43.77	MOL3	C
ATOM	12643	CG	PRO	I	92	23.671	-57.885	-24.194	1.00 41.60	MOL3	C
ATOM	12644	C	PRO	I	92	26.580	-57.252	-24.442	1.00 47.20	MOL3	C
ATOM	12645	O	PRO	I	92	26.537	-57.365	-23.220	1.00 36.30	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	12646	N	ILE	I	93	27.379	-56.407	-25.092	1.00	54.33	MOL3	N
ATOM	12647	CA	ILE	I	93	28.262	-55.461	-24.416	1.00	58.28	MOL3	C
ATOM	12648	CB	ILE	I	93	29.698	-55.563	-24.892	1.00	59.93	MOL3	C
ATOM	12649	CG2	ILE	I	93	30.502	-54.448	-24.287	1.00	60.89	MOL3	C
ATOM	12650	CG1	ILE	I	93	30.290	-56.893	-24.456	1.00	63.13	MOL3	C
ATOM	12651	CD1	ILE	I	93	31.745	-57.019	-24.789	1.00	73.89	MOL3	C
ATOM	12652	C	ILE	I	93	27.724	-54.087	-24.795	1.00	54.71	MOL3	C
ATOM	12653	O	ILE	I	93	27.652	-53.741	-25.975	1.00	48.66	MOL3	O
ATOM	12654	N	GLN	I	94	27.340	-53.308	-23.794	1.00	50.70	MOL3	N
ATOM	12655	CA	GLN	I	94	26.762	-52.009	-24.069	1.00	54.91	MOL3	C
ATOM	12656	CB	GLN	I	94	25.367	-51.937	-23.464	1.00	50.69	MOL3	C
ATOM	12657	CG	GLN	I	94	24.405	-52.955	-24.040	1.00	49.22	MOL3	C
ATOM	12658	CD	GLN	I	94	23.249	-53.248	-23.107	1.00	50.77	MOL3	C
ATOM	12659	OE1	GLN	I	94	22.247	-53.833	-23.508	1.00	57.54	MOL3	O
ATOM	12660	NE2	GLN	I	94	23.390	-52.854	-21.850	1.00	48.35	MOL3	N
ATOM	12661	C	GLN	I	94	27.598	-50.854	-23.566	1.00	60.57	MOL3	C
ATOM	12662	O	GLN	I	94	28.312	-50.972	-22.573	1.00	69.65	MOL3	O
ATOM	12663	N	GLN	I	95	27.503	-49.730	-24.264	1.00	60.06	MOL3	N
ATOM	12664	CA	GLN	I	95	28.251	-48.539	-23.905	1.00	60.79	MOL3	C
ATOM	12665	CB	GLN	I	95	29.437	-48.361	-24.856	1.00	66.04	MOL3	C
ATOM	12666	CG	GLN	I	95	30.196	-47.060	-24.673	1.00	83.53	MOL3	C
ATOM	12667	CD	GLN	I	95	30.731	-46.903	-23.258	1.00	95.07	MOL3	C
ATOM	12668	OE1	GLN	I	95	31.208	-45.828	-22.868	1.00	96.45	MOL3	O
ATOM	12669	NE2	GLN	I	95	30.658	-47.981	-22.480	1.00	98.63	MOL3	N
ATOM	12670	C	GLN	I	95	27.332	-47.339	-24.011	1.00	61.87	MOL3	C
ATOM	12671	O	GLN	I	95	26.599	-47.206	-24.995	1.00	57.72	MOL3	O
ATOM	12672	N	GLU	I	96	27.349	-46.478	-22.997	1.00	61.98	MOL3	N
ATOM	12673	CA	GLU	I	96	26.510	-45.292	-23.039	1.00	65.81	MOL3	C
ATOM	12674	CB	GLU	I	96	26.145	-44.818	-21.625	1.00	78.65	MOL3	C
ATOM	12675	CG	GLU	I	96	27.317	-44.392	-20.736	1.00	102.84	MOL3	C
ATOM	12676	CD	GLU	I	96	27.760	-42.943	-20.959	1.00	111.84	MOL3	C
ATOM	12677	OE1	GLU	I	96	28.603	-42.446	-20.171	1.00	115.81	MOL3	O
ATOM	12678	OE2	GLU	I	96	27.270	-42.303	-21.918	1.00	114.58	MOL3	O
ATOM	12679	C	GLU	I	96	27.291	-44.234	-23.797	1.00	59.47	MOL3	C
ATOM	12680	O	GLU	I	96	28.472	-44.014	-23.545	1.00	52.75	MOL3	O
ATOM	12681	N	THR	I	97	26.630	-43.600	-24.754	1.00	57.04	MOL3	N
ATOM	12682	CA	THR	I	97	27.271	-42.586	-25.563	1.00	59.66	MOL3	C
ATOM	12683	CB	THR	I	97	27.456	-43.061	-27.012	1.00	63.08	MOL3	C
ATOM	12684	OG1	THR	I	97	27.994	-41.991	-27.807	1.00	75.09	MOL3	O
ATOM	12685	CG2	THR	I	97	26.132	-43.476	-27.600	1.00	50.30	MOL3	C
ATOM	12686	C	THR	I	97	26.451	-41.318	-25.619	1.00	60.19	MOL3	C
ATOM	12687	O	THR	I	97	25.284	-41.305	-25.246	1.00	59.18	MOL3	O
ATOM	12688	N	LEU	I	98	27.074	-40.256	-26.114	1.00	58.80	MOL3	N
ATOM	12689	CA	LEU	I	98	26.417	-38.976	-26.254	1.00	52.73	MOL3	C
ATOM	12690	CB	LEU	I	98	27.294	-37.890	-25.671	1.00	54.84	MOL3	C
ATOM	12691	CG	LEU	I	98	26.509	-36.935	-24.800	1.00	56.72	MOL3	C
ATOM	12692	CD1	LEU	I	98	25.325	-37.702	-24.277	1.00	60.24	MOL3	C
ATOM	12693	CD2	LEU	I	98	27.382	-36.386	-23.660	1.00	47.65	MOL3	C
ATOM	12694	C	LEU	I	98	26.195	-38.698	-27.721	1.00	56.10	MOL3	C
ATOM	12695	O	LEU	I	98	26.981	-39.116	-28.576	1.00	61.32	MOL3	O
ATOM	12696	N	VAL	I	99	25.108	-38.008	-28.016	1.00	55.60	MOL3	N
ATOM	12697	CA	VAL	I	99	24.800	-37.643	-29.393	1.00	59.48	MOL3	C
ATOM	12698	CB	VAL	I	99	23.783	-38.589	-30.029	1.00	52.31	MOL3	C
ATOM	12699	CG1	VAL	I	99	24.341	-39.985	-30.065	1.00	46.88	MOL3	C
ATOM	12700	CG2	VAL	I	99	22.475	-38.512	-29.267	1.00	43.72	MOL3	C
ATOM	12701	C	VAL	I	99	24.180	-36.263	-29.306	1.00	63.19	MOL3	C
ATOM	12702	O	VAL	I	99	23.772	-35.841	-28.229	1.00	64.00	MOL3	O
ATOM	12703	N	VAL	I	100	24.113	-35.544	-30.417	1.00	64.84	MOL3	N
ATOM	12704	CA	VAL	I	100	23.516	-34.230	-30.349	1.00	64.62	MOL3	C
ATOM	12705	CB	VAL	I	100	24.520	-33.140	-30.701	1.00	66.60	MOL3	C
ATOM	12706	CG1	VAL	I	100	23.852	-31.780	-30.594	1.00	59.29	MOL3	C
ATOM	12707	CG2	VAL	I	100	25.724	-33.234	-29.767	1.00	65.89	MOL3	C
ATOM	12708	C	VAL	I	100	22.319	-34.126	-31.259	1.00	69.08	MOL3	C
ATOM	12709	O	VAL	I	100	22.312	-34.691	-32.364	1.00	68.87	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	12710	N	ARG	I	101	21.295	-33.429	-30.763	1.00	71.73	MOL3	N
ATOM	12711	CA	ARG	I	101	20.058	-33.213	-31.508	1.00	79.13	MOL3	C
ATOM	12712	CB	ARG	I	101	18.830	-33.495	-30.651	1.00	73.61	MOL3	C
ATOM	12713	CG	ARG	I	101	18.430	-34.937	-30.677	1.00	82.98	MOL3	C
ATOM	12714	CD	ARG	I	101	16.944	-35.123	-30.463	1.00	92.97	MOL3	C
ATOM	12715	NE	ARG	I	101	16.550	-36.484	-30.810	1.00	103.33	MOL3	N
ATOM	12716	CZ	ARG	I	101	16.804	-37.055	-31.986	1.00	108.63	MOL3	C
ATOM	12717	NH1	ARG	I	101	17.448	-36.379	-32.931	1.00	110.19	MOL3	N
ATOM	12718	NH2	ARG	I	101	16.426	-38.308	-32.219	1.00	113.00	MOL3	N
ATOM	12719	C	ARG	I	101	19.978	-31.789	-32.004	1.00	84.87	MOL3	C
ATOM	12720	O	ARG	I	101	20.271	-30.854	-31.267	1.00	84.77	MOL3	O
ATOM	12721	N	ARG	I	102	19.580	-31.638	-33.261	1.00	91.94	MOL3	N
ATOM	12722	CA	ARG	I	102	19.451	-30.335	-33.890	1.00	99.79	MOL3	C
ATOM	12723	CB	ARG	I	102	19.955	-30.409	-35.339	1.00	104.81	MOL3	C
ATOM	12724	CG	ARG	I	102	19.914	-29.096	-36.111	1.00	112.01	MOL3	C
ATOM	12725	CD	ARG	I	102	20.666	-29.184	-37.445	1.00	118.63	MOL3	C
ATOM	12726	NE	ARG	I	102	19.903	-29.846	-38.504	1.00	127.04	MOL3	N
ATOM	12727	CZ	ARG	I	102	20.370	-30.068	-39.732	1.00	131.04	MOL3	C
ATOM	12728	NH1	ARG	I	102	21.601	-29.683	-40.051	1.00	133.41	MOL3	N
ATOM	12729	NH2	ARG	I	102	19.609	-30.664	-40.646	1.00	128.01	MOL3	N
ATOM	12730	C	ARG	I	102	17.976	-29.971	-33.864	1.00	105.49	MOL3	C
ATOM	12731	O	ARG	I	102	17.241	-30.310	-34.788	1.00	109.22	MOL3	O
ATOM	12732	N	LYS	I	103	17.545	-29.291	-32.802	1.00	111.48	MOL3	N
ATOM	12733	CA	LYS	I	103	16.146	-28.885	-32.643	1.00	117.54	MOL3	C
ATOM	12734	CB	LYS	I	103	15.833	-28.638	-31.160	1.00	114.22	MOL3	C
ATOM	12735	CG	LYS	I	103	15.448	-29.891	-30.377	1.00	117.65	MOL3	C
ATOM	12736	CD	LYS	I	103	15.551	-29.689	-28.866	1.00	120.97	MOL3	C
ATOM	12737	CE	LYS	I	103	14.681	-28.538	-28.376	1.00	128.40	MOL3	C
ATOM	12738	NZ	LYS	I	103	14.856	-28.264	-26.912	1.00	132.06	MOL3	N
ATOM	12739	C	LYS	I	103	15.766	-27.644	-33.451	1.00	123.80	MOL3	C
ATOM	12740	O	LYS	I	103	16.535	-26.684	-33.532	1.00	123.83	MOL3	O
ATOM	12741	N	HIS	I	104	14.571	-27.673	-34.041	1.00	130.52	MOL3	N
ATOM	12742	CA	HIS	I	104	14.047	-26.564	-34.845	1.00	134.60	MOL3	C
ATOM	12743	CB	HIS	I	104	14.198	-25.242	-34.097	1.00	130.27	MOL3	C
ATOM	12744	CG	HIS	I	104	13.721	-25.292	-32.684	1.00	128.01	MOL3	C
ATOM	12745	CD2	HIS	I	104	12.613	-25.843	-32.136	1.00	128.00	MOL3	C
ATOM	12746	ND1	HIS	I	104	14.426	-24.728	-31.644	1.00	128.90	MOL3	N
ATOM	12747	CE1	HIS	I	104	13.774	-24.931	-30.513	1.00	129.69	MOL3	C
ATOM	12748	NE2	HIS	I	104	12.670	-25.605	-30.784	1.00	129.66	MOL3	N
ATOM	12749	C	HIS	I	104	14.737	-26.432	-36.199	1.00	139.28	MOL3	C
ATOM	12750	O	HIS	I	104	15.706	-27.138	-36.492	1.00	139.83	MOL3	O
ATOM	12751	N	GLN	I	105	14.238	-25.501	-37.011	1.00	142.80	MOL3	N
ATOM	12752	CA	GLN	I	105	14.777	-25.262	-38.347	1.00	145.64	MOL3	C
ATOM	12753	CB	GLN	I	105	13.723	-25.624	-39.406	1.00	147.69	MOL3	C
ATOM	12754	CG	GLN	I	105	13.031	-26.985	-39.232	1.00	151.62	MOL3	C
ATOM	12755	CD	GLN	I	105	11.997	-27.015	-38.106	1.00	152.19	MOL3	C
ATOM	12756	OE1	GLN	I	105	11.128	-26.144	-38.018	1.00	153.16	MOL3	O
ATOM	12757	NE2	GLN	I	105	12.078	-28.035	-37.251	1.00	150.44	MOL3	N
ATOM	12758	C	GLN	I	105	15.187	-23.799	-38.550	1.00	145.76	MOL3	C
ATOM	12759	O	GLN	I	105	14.914	-22.940	-37.708	1.00	145.60	MOL3	O
ATOM	12760	N	GLY	I	106	15.839	-23.529	-39.679	1.00	145.04	MOL3	N
ATOM	12761	CA	GLY	I	106	16.251	-22.174	-40.002	1.00	144.36	MOL3	C
ATOM	12762	C	GLY	I	106	17.161	-21.468	-39.013	1.00	143.06	MOL3	C
ATOM	12763	O	GLY	I	106	18.148	-22.034	-38.552	1.00	142.81	MOL3	O
ATOM	12764	N	CYS	I	107	16.815	-20.221	-38.699	1.00	142.79	MOL3	N
ATOM	12765	CA	CYS	I	107	17.573	-19.367	-37.780	1.00	143.20	MOL3	C
ATOM	12766	C	CYS	I	107	17.387	-19.764	-36.331	1.00	140.21	MOL3	C
ATOM	12767	O	CYS	I	107	18.243	-19.505	-35.482	1.00	138.31	MOL3	O
ATOM	12768	CB	CYS	I	107	17.098	-17.915	-37.891	1.00	148.55	MOL3	C
ATOM	12769	SG	CYS	I	107	17.213	-17.129	-39.526	1.00	155.31	MOL3	S
ATOM	12770	N	SER	I	108	16.234	-20.351	-36.050	1.00	138.28	MOL3	N
ATOM	12771	CA	SER	I	108	15.896	-20.757	-34.694	1.00	138.03	MOL3	C
ATOM	12772	CB	SER	I	108	14.376	-20.692	-34.511	1.00	138.19	MOL3	C
ATOM	12773	OG	SER	I	108	13.704	-21.114	-35.689	1.00	138.08	MOL3	O

ES 2 548 452 T3

ATOM	12774	C	SER	I	108	16.422	-22.147	-34.338	1.00136.26	MOL3	C
ATOM	12775	O	SER	I	108	15.731	-22.939	-33.695	1.00137.24	MOL3	O
ATOM	12776	N	VAL	I	109	17.661	-22.422	-34.734	1.00132.37	MOL3	N
ATOM	12777	CA	VAL	I	109	18.282	-23.717	-34.484	1.00126.45	MOL3	C
ATOM	12778	CB	VAL	I	109	19.198	-24.112	-35.670	1.00125.21	MOL3	C
ATOM	12779	CG1	VAL	I	109	20.443	-23.251	-35.675	1.00126.29	MOL3	C
ATOM	12780	CG2	VAL	I	109	19.562	-25.574	-35.588	1.00127.65	MOL3	C
ATOM	12781	C	VAL	I	109	19.085	-23.796	-33.179	1.00123.63	MOL3	C
ATOM	12782	O	VAL	I	109	19.935	-22.946	-32.890	1.00120.91	MOL3	O
ATOM	12783	N	SER	I	110	18.796	-24.832	-32.395	1.00119.29	MOL3	N
ATOM	12784	CA	SER	I	110	19.472	-25.071	-31.125	1.00112.29	MOL3	C
ATOM	12785	CB	SER	I	110	18.498	-24.893	-29.965	1.00112.58	MOL3	C
ATOM	12786	OG	SER	I	110	17.440	-25.831	-30.066	1.00113.59	MOL3	O
ATOM	12787	C	SER	I	110	19.986	-26.500	-31.121	1.00107.33	MOL3	C
ATOM	12788	O	SER	I	110	19.546	-27.326	-31.921	1.00108.34	MOL3	O
ATOM	12789	N	PHE	I	111	20.911	-26.793	-30.216	1.00 98.83	MOL3	N
ATOM	12790	CA	PHE	I	111	21.464	-28.130	-30.125	1.00 91.59	MOL3	C
ATOM	12791	CB	PHE	I	111	22.898	-28.120	-30.609	1.00 88.41	MOL3	C
ATOM	12792	CG	PHE	I	111	23.027	-27.698	-32.027	1.00 88.39	MOL3	C
ATOM	12793	CD1	PHE	I	111	22.015	-27.971	-32.925	1.00 87.43	MOL3	C
ATOM	12794	CD2	PHE	I	111	24.159	-27.059	-32.478	1.00 91.02	MOL3	C
ATOM	12795	CE1	PHE	I	111	22.124	-27.620	-34.242	1.00 87.09	MOL3	C
ATOM	12796	CE2	PHE	I	111	24.276	-26.703	-33.805	1.00 94.27	MOL3	C
ATOM	12797	CZ	PHE	I	111	23.255	-26.985	-34.688	1.00 92.34	MOL3	C
ATOM	12798	C	PHE	I	111	21.392	-28.668	-28.716	1.00 89.67	MOL3	C
ATOM	12799	O	PHE	I	111	21.721	-27.966	-27.768	1.00 89.13	MOL3	O
ATOM	12800	N	GLN	I	112	20.948	-29.913	-28.576	1.00 88.62	MOL3	N
ATOM	12801	CA	GLN	I	112	20.847	-30.521	-27.257	1.00 85.20	MOL3	C
ATOM	12802	CB	GLN	I	112	19.372	-30.648	-26.857	1.00 82.76	MOL3	C
ATOM	12803	CG	GLN	I	112	19.162	-30.717	-25.349	1.00 88.40	MOL3	C
ATOM	12804	CD	GLN	I	112	17.699	-30.676	-24.935	1.00 88.82	MOL3	C
ATOM	12805	OE1	GLN	I	112	17.387	-30.631	-23.742	1.00 88.63	MOL3	O
ATOM	12806	NE2	GLN	I	112	16.797	-30.693	-25.913	1.00 86.67	MOL3	N
ATOM	12807	C	GLN	I	112	21.569	-31.885	-27.191	1.00 84.79	MOL3	C
ATOM	12808	O	GLN	I	112	21.588	-32.649	-28.169	1.00 86.05	MOL3	O
ATOM	12809	N	LEU	I	113	22.176	-32.165	-26.038	1.00 77.59	MOL3	N
ATOM	12810	CA	LEU	I	113	22.919	-33.406	-25.806	1.00 74.68	MOL3	C
ATOM	12811	CB	LEU	I	113	23.962	-33.178	-24.715	1.00 72.42	MOL3	C
ATOM	12812	CG	LEU	I	113	25.416	-33.002	-25.129	1.00 71.48	MOL3	C
ATOM	12813	CD1	LEU	I	113	25.477	-32.150	-26.365	1.00 73.62	MOL3	C
ATOM	12814	CD2	LEU	I	113	26.203	-32.377	-23.994	1.00 66.43	MOL3	C
ATOM	12815	C	LEU	I	113	22.063	-34.597	-25.384	1.00 74.82	MOL3	C
ATOM	12816	O	LEU	I	113	21.606	-34.647	-24.251	1.00 75.69	MOL3	O
ATOM	12817	N	GLU	I	114	21.864	-35.564	-26.275	1.00 77.60	MOL3	N
ATOM	12818	CA	GLU	I	114	21.078	-36.751	-25.943	1.00 76.36	MOL3	C
ATOM	12819	CB	GLU	I	114	20.248	-37.208	-27.150	1.00 82.69	MOL3	C
ATOM	12820	CG	GLU	I	114	19.266	-38.351	-26.848	1.00 93.78	MOL3	C
ATOM	12821	CD	GLU	I	114	18.228	-38.572	-27.959	1.00 99.06	MOL3	C
ATOM	12822	OE1	GLU	I	114	18.585	-39.083	-29.045	1.00 98.43	MOL3	O
ATOM	12823	OE2	GLU	I	114	17.045	-38.224	-27.741	1.00103.13	MOL3	O
ATOM	12824	C	GLU	I	114	22.028	-37.864	-25.521	1.00 73.47	MOL3	C
ATOM	12825	O	GLU	I	114	23.185	-37.906	-25.961	1.00 73.93	MOL3	O
ATOM	12826	N	LYS	I	115	21.541	-38.761	-24.670	1.00 66.56	MOL3	N
ATOM	12827	CA	LYS	I	115	22.353	-39.878	-24.195	1.00 65.32	MOL3	C
ATOM	12828	CB	LYS	I	115	22.391	-39.872	-22.669	1.00 60.03	MOL3	C
ATOM	12829	CG	LYS	I	115	23.354	-40.869	-22.059	1.00 68.17	MOL3	C
ATOM	12830	CD	LYS	I	115	24.048	-40.283	-20.821	1.00 73.57	MOL3	C
ATOM	12831	CE	LYS	I	115	25.054	-41.260	-20.196	1.00 76.98	MOL3	C
ATOM	12832	NZ	LYS	I	115	25.885	-40.647	-19.107	1.00 76.99	MOL3	N
ATOM	12833	C	LYS	I	115	21.770	-41.194	-24.700	1.00 65.75	MOL3	C
ATOM	12834	O	LYS	I	115	20.613	-41.495	-24.433	1.00 73.64	MOL3	O
ATOM	12835	N	VAL	I	116	22.541	-41.976	-25.449	1.00 63.54	MOL3	N
ATOM	12836	CA	VAL	I	116	22.005	-43.244	-25.931	1.00 60.63	MOL3	C
ATOM	12837	CB	VAL	I	116	21.817	-43.260	-27.455	1.00 56.29	MOL3	C

ES 2 548 452 T3

ATOM	12838	CG1	VAL	I	116	20.851	-42.186	-27.852	1.00	58.71	MOL3	C
ATOM	12839	CG2	VAL	I	116	23.122	-43.055	-28.150	1.00	61.08	MOL3	C
ATOM	12840	C	VAL	I	116	22.843	-44.434	-25.521	1.00	61.46	MOL3	C
ATOM	12841	O	VAL	I	116	24.073	-44.355	-25.443	1.00	64.32	MOL3	O
ATOM	12842	N	LEU	I	117	22.160	-45.534	-25.230	1.00	59.90	MOL3	N
ATOM	12843	CA	LEU	I	117	22.843	-46.747	-24.827	1.00	59.20	MOL3	C
ATOM	12844	CB	LEU	I	117	22.076	-47.484	-23.743	1.00	59.79	MOL3	C
ATOM	12845	CG	LEU	I	117	23.098	-48.056	-22.763	1.00	64.44	MOL3	C
ATOM	12846	CD1	LEU	I	117	23.577	-46.912	-21.850	1.00	63.43	MOL3	C
ATOM	12847	CD2	LEU	I	117	22.502	-49.200	-21.964	1.00	60.66	MOL3	C
ATOM	12848	C	LEU	I	117	22.952	-47.630	-26.046	1.00	57.49	MOL3	C
ATOM	12849	O	LEU	I	117	21.944	-47.996	-26.653	1.00	55.99	MOL3	O
ATOM	12850	N	VAL	I	118	24.181	-47.982	-26.387	1.00	52.58	MOL3	N
ATOM	12851	CA	VAL	I	118	24.427	-48.784	-27.563	1.00	53.37	MOL3	C
ATOM	12852	CB	VAL	I	118	25.419	-48.063	-28.487	1.00	54.52	MOL3	C
ATOM	12853	CG1	VAL	I	118	25.492	-48.767	-29.825	1.00	60.80	MOL3	C
ATOM	12854	CG2	VAL	I	118	25.032	-46.622	-28.643	1.00	52.59	MOL3	C
ATOM	12855	C	VAL	I	118	25.001	-50.160	-27.289	1.00	53.89	MOL3	C
ATOM	12856	O	VAL	I	118	25.858	-50.346	-26.419	1.00	54.34	MOL3	O
ATOM	12857	N	THR	I	119	24.536	-51.120	-28.067	1.00	51.05	MOL3	N
ATOM	12858	CA	THR	I	119	25.013	-52.472	-27.956	1.00	54.15	MOL3	C
ATOM	12859	CB	THR	I	119	23.935	-53.438	-28.368	1.00	55.88	MOL3	C
ATOM	12860	CG1	THR	I	119	22.716	-53.099	-27.694	1.00	56.94	MOL3	O
ATOM	12861	CG2	THR	I	119	24.356	-54.845	-28.021	1.00	60.72	MOL3	C
ATOM	12862	C	THR	I	119	26.137	-52.552	-28.966	1.00	54.71	MOL3	C
ATOM	12863	O	THR	I	119	25.888	-52.667	-30.167	1.00	56.60	MOL3	O
ATOM	12864	N	VAL	I	120	27.373	-52.488	-28.492	1.00	52.53	MOL3	N
ATOM	12865	CA	VAL	I	120	28.488	-52.538	-29.408	1.00	48.66	MOL3	C
ATOM	12866	CB	VAL	I	120	29.710	-51.959	-28.760	1.00	44.49	MOL3	C
ATOM	12867	CG1	VAL	I	120	30.676	-51.549	-29.819	1.00	56.06	MOL3	C
ATOM	12868	CG2	VAL	I	120	29.325	-50.775	-27.933	1.00	34.75	MOL3	C
ATOM	12869	C	VAL	I	120	28.790	-53.929	-29.967	1.00	52.06	MOL3	C
ATOM	12870	O	VAL	I	120	29.355	-54.041	-31.055	1.00	53.88	MOL3	O
ATOM	12871	N	GLY	I	121	28.400	-54.979	-29.237	1.00	58.06	MOL3	N
ATOM	12872	CA	GLY	I	121	28.622	-56.350	-29.692	1.00	56.05	MOL3	C
ATOM	12873	C	GLY	I	121	28.391	-57.392	-28.610	1.00	53.74	MOL3	C
ATOM	12874	O	GLY	I	121	27.944	-57.068	-27.511	1.00	54.78	MOL3	O
ATOM	12875	N	CYS	I	122	28.702	-58.648	-28.901	1.00	48.59	MOL3	N
ATOM	12876	CA	CYS	I	122	28.511	-59.690	-27.909	1.00	48.40	MOL3	C
ATOM	12877	C	CYS	I	122	29.792	-60.428	-27.578	1.00	50.48	MOL3	C
ATOM	12878	O	CYS	I	122	30.716	-60.498	-28.380	1.00	56.16	MOL3	O
ATOM	12879	CB	CYS	I	122	27.431	-60.652	-28.381	1.00	49.75	MOL3	C
ATOM	12880	SG	CYS	I	122	25.924	-59.722	-28.788	1.00	53.34	MOL3	S
ATOM	12881	N	THR	I	123	29.847	-60.958	-26.369	1.00	50.67	MOL3	N
ATOM	12882	CA	THR	I	123	31.010	-61.679	-25.905	1.00	50.35	MOL3	C
ATOM	12883	CB	THR	I	123	31.755	-60.859	-24.858	1.00	48.34	MOL3	C
ATOM	12884	CG1	THR	I	123	32.900	-61.583	-24.393	1.00	58.31	MOL3	O
ATOM	12885	CG2	THR	I	123	30.845	-60.575	-23.699	1.00	43.06	MOL3	C
ATOM	12886	C	THR	I	123	30.494	-62.953	-25.272	1.00	52.98	MOL3	C
ATOM	12887	O	THR	I	123	29.433	-62.957	-24.659	1.00	49.33	MOL3	O
ATOM	12888	N	CYS	I	124	31.242	-64.038	-25.418	1.00	58.71	MOL3	N
ATOM	12889	CA	CYS	I	124	30.816	-65.302	-24.850	1.00	61.53	MOL3	C
ATOM	12890	C	CYS	I	124	31.202	-65.460	-23.391	1.00	59.84	MOL3	C
ATOM	12891	O	CYS	I	124	32.380	-65.512	-23.071	1.00	63.22	MOL3	O
ATOM	12892	CB	CYS	I	124	31.410	-66.450	-25.631	1.00	66.83	MOL3	C
ATOM	12893	SG	CYS	I	124	30.908	-67.986	-24.839	1.00	78.44	MOL3	S
ATOM	12894	N	VAL	I	125	30.216	-65.547	-22.507	1.00	61.41	MOL3	N
ATOM	12895	CA	VAL	I	125	30.498	-65.695	-21.084	1.00	61.67	MOL3	C
ATOM	12896	CB	VAL	I	125	29.886	-64.548	-20.263	1.00	58.41	MOL3	C
ATOM	12897	CG1	VAL	I	125	30.311	-64.662	-18.819	1.00	61.93	MOL3	C
ATOM	12898	CG2	VAL	I	125	30.320	-63.240	-20.812	1.00	58.88	MOL3	C
ATOM	12899	C	VAL	I	125	29.987	-67.007	-20.491	1.00	62.73	MOL3	C
ATOM	12900	O	VAL	I	125	29.107	-67.670	-21.046	1.00	62.50	MOL3	O
ATOM	12901	N	THR	I	126	30.566	-67.372	-19.356	1.00	61.71	MOL3	N

ES 2 548 452 T3

ATOM	12902	CA	THR	I	126	30.190	-68.573	-18.649	1.00	65.19	MOL3	C
ATOM	12903	CB	THR	I	126	31.439	-69.374	-18.196	1.00	70.00	MOL3	C
ATOM	12904	OG1	THR	I	126	31.059	-70.336	-17.204	1.00	78.86	MOL3	O
ATOM	12905	CG2	THR	I	126	32.493	-68.448	-17.609	1.00	74.14	MOL3	C
ATOM	12906	C	THR	I	126	29.394	-68.127	-17.433	1.00	61.85	MOL3	C
ATOM	12907	O	THR	I	126	29.855	-67.309	-16.639	1.00	58.44	MOL3	O
ATOM	12908	N	PRO	I	127	28.169	-68.642	-17.288	1.00	61.14	MOL3	N
ATOM	12909	CD	PRO	I	127	27.499	-69.689	-18.074	1.00	58.06	MOL3	C
ATOM	12910	CA	PRO	I	127	27.360	-68.252	-16.139	1.00	61.92	MOL3	C
ATOM	12911	CB	PRO	I	127	26.121	-69.131	-16.279	1.00	61.05	MOL3	C
ATOM	12912	CG	PRO	I	127	26.625	-70.320	-17.045	1.00	59.93	MOL3	C
ATOM	12913	C	PRO	I	127	28.122	-68.496	-14.851	1.00	63.96	MOL3	C
ATOM	12914	O	PRO	I	127	29.046	-69.310	-14.813	1.00	63.82	MOL3	O
ATOM	12915	N	VAL	I	128	27.760	-67.765	-13.803	1.00	67.46	MOL3	N
ATOM	12916	CA	VAL	I	128	28.418	-67.942	-12.517	1.00	74.09	MOL3	C
ATOM	12917	CB	VAL	I	128	28.223	-66.690	-11.592	1.00	67.87	MOL3	C
ATOM	12918	CG1	VAL	I	128	26.783	-66.274	-11.554	1.00	69.54	MOL3	C
ATOM	12919	CG2	VAL	I	128	28.694	-66.985	-10.198	1.00	62.25	MOL3	C
ATOM	12920	C	VAL	I	128	27.841	-69.204	-11.880	1.00	84.32	MOL3	C
ATOM	12921	O	VAL	I	128	26.761	-69.187	-11.293	1.00	88.97	MOL3	O
ATOM	12922	N	ILE	I	129	28.555	-70.315	-12.030	1.00	94.72	MOL3	N
ATOM	12923	CA	ILE	I	129	28.099	-71.587	-11.479	1.00103.85	MOL3	C	
ATOM	12924	CB	ILE	I	129	28.755	-72.784	-12.216	1.00102.83	MOL3	C	
ATOM	12925	CG2	ILE	I	129	28.240	-74.096	-11.640	1.00102.03	MOL3	C	
ATOM	12926	CG1	ILE	I	129	28.453	-72.704	-13.721	1.00103.88	MOL3	C	
ATOM	12927	CD1	ILE	I	129	29.165	-73.757	-14.581	1.00	99.35	MOL3	C
ATOM	12928	C	ILE	I	129	28.439	-71.665	-9.995	1.00111.48	MOL3	C	
ATOM	12929	O	ILE	I	129	27.850	-72.457	-9.256	1.00113.95	MOL3	O	
ATOM	12930	N	HIS	I	130	29.373	-70.817	-9.566	1.00118.09	MOL3	N	
ATOM	12931	CA	HIS	I	130	29.833	-70.772	-8.179	1.00123.91	MOL3	C	
ATOM	12932	CB	HIS	I	130	30.581	-69.464	-7.923	1.00124.74	MOL3	C	
ATOM	12933	CG	HIS	I	130	31.614	-69.160	-8.961	1.00125.86	MOL3	C	
ATOM	12934	CD2	HIS	I	130	32.190	-67.994	-9.336	1.00126.62	MOL3	C	
ATOM	12935	ND1	HIS	I	130	32.167	-70.136	-9.763	1.00125.37	MOL3	N	
ATOM	12936	CE1	HIS	I	130	33.036	-69.583	-10.589	1.00127.54	MOL3	C	
ATOM	12937	NE2	HIS	I	130	33.069	-68.284	-10.351	1.00129.23	MOL3	N	
ATOM	12938	C	HIS	I	130	28.733	-70.954	-7.144	1.00127.61	MOL3	C	
ATOM	12939	O	HIS	I	130	28.085	-69.987	-6.725	1.00123.05	MOL3	O	
ATOM	12940	N	HIS	I	131	28.554	-72.215	-6.744	1.00134.09	MOL3	N	
ATOM	12941	CA	HIS	I	131	27.558	-72.646	-5.761	1.00139.89	MOL3	C	
ATOM	12942	CB	HIS	I	131	28.219	-72.781	-4.381	1.00142.14	MOL3	C	
ATOM	12943	CG	HIS	I	131	27.313	-73.340	-3.326	1.00146.96	MOL3	C	
ATOM	12944	CD2	HIS	I	131	27.059	-72.932	-2.060	1.00148.14	MOL3	C	
ATOM	12945	ND1	HIS	I	131	26.543	-74.466	-3.527	1.00148.76	MOL3	N	
ATOM	12946	CE1	HIS	I	131	25.854	-74.728	-2.430	1.00148.98	MOL3	C	
ATOM	12947	NE2	HIS	I	131	26.149	-73.812	-1.525	1.00149.64	MOL3	N	
ATOM	12948	C	HIS	I	131	26.328	-71.737	-5.674	1.00141.32	MOL3	C	
ATOM	12949	O	HIS	I	131	25.507	-71.683	-6.597	1.00141.72	MOL3	O	
ATOM	12950	N	VAL	I	132	26.201	-71.037	-4.552	1.00139.78	MOL3	N	
ATOM	12951	CA	VAL	I	132	25.090	-70.126	-4.335	1.00137.25	MOL3	C	
ATOM	12952	CB	VAL	I	132	24.201	-70.599	-3.158	1.00136.71	MOL3	C	
ATOM	12953	CG1	VAL	I	132	23.127	-69.569	-2.861	1.00136.10	MOL3	C	
ATOM	12954	CG2	VAL	I	132	23.550	-71.934	-3.507	1.00135.48	MOL3	C	
ATOM	12955	C	VAL	I	132	25.675	-68.750	-4.041	1.00136.90	MOL3	C	
ATOM	12956	O	VAL	I	132	25.031	-67.730	-4.281	1.00140.65	MOL3	O	
ATOM	12957	N	GLN	I	133	26.904	-68.727	-3.528	1.00134.50	MOL3	N	
ATOM	12958	CA	GLN	I	133	27.590	-67.470	-3.236	1.00131.12	MOL3	C	
ATOM	12959	CB	GLN	I	133	28.826	-67.713	-2.347	1.00127.09	MOL3	C	
ATOM	12960	CG	GLN	I	133	29.634	-68.970	-2.689	1.00122.98	MOL3	C	
ATOM	12961	CD	GLN	I	133	31.021	-68.986	-2.056	1.00118.67	MOL3	C	
ATOM	12962	OE1	GLN	I	133	31.950	-68.339	-2.548	1.00114.83	MOL3	O	
ATOM	12963	NE2	GLN	I	133	31.165	-69.724	-0.956	1.00114.69	MOL3	N	
ATOM	12964	C	GLN	I	133	28.006	-66.794	-4.551	1.00131.31	MOL3	C	
ATOM	12965	O	GLN	I	133	27.812	-65.561	-4.667	1.00130.65	MOL3	O	
ATOM	12966	OXT	GLN	I	133	28.520	-67.505	-5.451	1.00129.17	MOL3	O	

END

En un aspecto adicional, se proporciona una estructura cristalina que comprende un epítopo como el definido en la presente memoria.

- 5 También se proporciona un método para generar una representación tridimensional por ordenador que emplea el 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 ó 100% de las coordenadas de la Tabla 1.

También se proporciona un medio legible mecánicamente que tiene almacenado en su interior datos que comprenden el 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 ó 100% de las coordenadas enumeradas en la Tabla 1.

Por supuesto, debe destacarse que la presente invención ha sido descrita meramente a modo de ejemplo, en modo alguno pretende ser limitante, y que se pueden realizar modificaciones de detalles dentro del alcance de las reivindicaciones incluidas a continuación en la presente memoria. Las características preferidas de cada realización de la invención son para cada una de las otras realizaciones *mutatis mutandis*.

REIVINDICACIONES

- 5 **1.** Un anticuerpo neutralizante que se une a IL-17A humana y a IL-17F humana que se une a un epítipo de la IL-17A humana que comprende SER41, TYR44, ASN45, ARG46, TRP51, ASN52, HIS54, ARG72, HIS73, ASP84, HIS86, VAL128, HIS129 y VAL131 de la SEQ ID NO: 21, donde el anticuerpo no es un anticuerpo que comprende la secuencia dada en la SEQ ID NO: 1 para la CDR-H1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 2 para la CDR-H2, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 3 para la CDR-H3, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 4 para la CDR-L1, la secuencia dada en la SEQ ID NO: 5 para la CDR-L2 y la secuencia dada en la SEQ ID NO: 6 para la CDR-L3, donde las SEQ ID NOs se muestran en la Figura 1.
- 10 **2.** Un anticuerpo neutralizante según la reivindicación 1, que se une a un epítipo de IL-17F humana que comprende uno o más residuos seleccionados del grupo que consiste en SER39, MET40, SER41, ARG42, ARG47, ASN53, ARG73, ASN74, LEU75, LYS83, GLU84, ASP85, ILE86, SER87, MET88, ASN89, VAL91, PRO92, GLN94, THR126, PRO127 y VAL128 de la SEQ ID NO: 22.
- 3.** Un anticuerpo neutralizante según la reivindicación 1 ó la reivindicación 2, que se une a IL-17A humana, a IL-17F humana y al heterodímero IL-17A/F humano.
- 15 **4.** Un anticuerpo neutralizante según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, que tiene una afinidad de unión por IL-17A mejor que 500 pM.
- 5.** Un anticuerpo neutralizante según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, para uso en el tratamiento de una enfermedad inflamatoria, una enfermedad autoinmune o cáncer.
- 20 **6.** Un anticuerpo neutralizante para uso según la reivindicación 5, donde la enfermedad inflamatoria es artritis reumatoide.

Figura 1

(a) Región variable de cadena ligera del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 7)

AIQLTQSPSSLSASVGDRVTITCRADESVTTLMHWYQQKPGKAPKLLIYLVSNRESGVPSRF
SGSGSGTDFTLTISLQPEDFATYYCQQTWSDPWTFGQGTKVEIKR

(b) Región variable de cadena pesada del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 9)

EVQLVESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFTFSDYNMAWVRQAPGKGLEWVATITYEGRNTYYRD
SVKGRFTISRDNANKSLYLQMNSLRAEDTAVYYCASPPQYYEGSIYRLWFHAWGQGTLLTVS
S

(c)

CDRH1: GFTFSDYNMA (SEQ ID NO:1)
CDRH2: TITYEGRNTYYRDSVKG (SEQ ID NO:2)
CDRH3: PPQYYEGSIYRLWFAH (SEQ ID NO:3)
CDRL1: RADESVTTLMH (SEQ ID NO:4)
CDRL2: LVSNRES (SEQ ID NO:5)
CDRL3: QQTWSDPWT (SEQ ID NO:6)

(d) Cadena ligera del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 11)

AIQLTQSPSSLSASVGDRVTITCRADESVTTLMHWYQQKPGKAPKLLIYLVSNRESGVPSRF
SGSGSGTDFTLTISLQPEDFATYYCQQTWSDPWTFGQGTKVEIKRTVAAPSVFIFPPSDEQ
LKSGTASVVCCLNNFYPREAKVQWKVDNALQSGNSQESVTEQDSKDYSLSTLTLSKADY
EKHKVYACEVTHQGLSPVTKSFNRGEC

(e) Cadena pesada del anticuerpo CA028_496 (SEQ ID NO: 15)

EVQLVESGGGLVQPGGSLRLSCAASGFTFSDYNMAWVRQAPGKGLEWVATITYEGRNTYYRD
SVKGRFTISRDNANKSLYLQMNSLRAEDTAVYYCASPPQYYEGSIYRLWFHAWGQGTLLTVS
SASTKGPSVFPLAPCSRSTSESTAALGCLVKDYFPEPVTVSWNSGALTSGVHTFPAVLQSSG
LYSLSSVTVPSSSLGKTYTCNVDPKPSNTKVDKRVESKYGPPCPPCPAPEFLGGPSVFLF
PPKPKDTLMISRTPEVTCVVVDVSQEDPEVQFNWYVDGVEVHNAKTKPREEQFNSTYRVVSV
LTVLHQDWLNGKEYKCKVSNKGLPSSIEKTIKAKGQPREPQVYTLPPSQEEMTKNQVSLTC
LVKGFYPSDIAVEWESNGQPENNYKTTTPVLDSDGSFFLYSRLTVDKSRWQEGNVFSCSVMH
EALHNHYTQKSLSLGLGK

(f) ADN que codifica la cadena ligera del anticuerpo CA028_496 que incluye la secuencia señal (SEQ ID NO: 14)

atgtcagttcccacacaggtgctgggcctgcttctgttggtggtcaccgatgctaggtgtgc
catccagctgacccagagcccttctctctcagcgccagtgctcgagacagagtgactatta
cctgcagggctgacgaaagcgtgaccacattgatgcactggtaccaacagaagcctggcaaa
gccccaaagctcctgatctatctgtttccaatcgggagctctggagtcaccagcaggttcag
cggcagtggtgctggaactgactttaccctgacaatctcctcactccagcccgaagatttcg
ccacctactattgccagcagacttgagcgacccttgacatttgacaggggcacaaaagtg
gagatcaagcgtacggtagcggcccatctgtcttcatcttcccgccatctgatgagcagtt
gaaatctggaactgcctctgttggtgtgctgctgaataacttctatcccagagaggccaaag

Figura 1 (continuación)

tacagtggaaggtggataacgcctccaatcgggtaactcccaggagagtgtcacagagcag
gacagcaaggacagcacctacagcctcagcagcacctgacgctgagcaaagcagactacga

gaaacacaaagtctacgcctgcgaagtcacccatcagggcctgagctcgcccgtcacaaga
gcttcaacaggggagagtgttag

(g) ADN que codifica la cadena pesada del anticuerpo CA028_496 que incluye la secuencia señal (SEQ ID NO: 18)

atggaatgggtcctgggtcttctctgttttttcttttctgtcacaccgggggtgcacagcgaggt
tcagctcggtgaatccggaggcggactcgtgcagcctgggggctccttgccgctgagctgcg
ctgccagtgggttcaactttcagcgattacaatatggcctgggtgcgccaggcccccaggcaag
ggctctggagtgggtggccacaattacctatgagggcagaaacacttattaccgggattcagt
gaaagggcgattttaccatcagcaggggataatgcaaagaacagttctgtacctgcagatgaact
ctctgagagctgaggacaccgctgtctactattgtgcaagcccaccccagtaactatgagggc
tcaatctacagattgtggtttgccattggggccagggaacactgggtgaccgtctcgagcgc
ttctacaaagggcccatccgtcttccccctggcgccctgctccaggagcacctccgagagca
cagccgccttggtgctgctggtcaaggactacttccccgaaccggtgacgggtgtcgtggaac
tcaggcgccctgaccagcggcgtgcacaccttccccggtgtcctacagtcctcaggactcta
ctccctcagcagcgtggtgacgtgcccctccagcagcttgggcacgaagacctacacctgca
acgtagatcacaaagcccagcaacaccaaggtggacaagagagttggtgagaggccagcacag
ggagggaggggtgtctgctggaagccaggctcagccctcctgcctggacgcaccccggctgtg
cagccccagcccagggcagcaaggcatgccccatctgtctcctcaccggaggcctctgacc
accccaactcatgcccaggagaggggtcttctggatttttccaccaggctccgggagccaca
ggctggatgcccctaccccaggccctgcgcatacaggggcagggtgctgcgctcagacctgcc
aagagccatatccgggaggacctgcccctgacctaaagcccaccccaaaggccaaactctcc
actccctcagctcagacaccttctctcctcccagatctgagtaactcccaatcttctctctg
cagagtccaaatatggtcccccatgcccacatgcccaggtaagccaaccaggccctcgccc
tccagctcaaggcgggacaggtgccctagagtgcctgcacccagggacagggccccagccgg
gtgctgaogcatccacctccatctcttctcagcacctgagttcctgggggggacctcagtc
ttcctgttccccccaaaacccaaggacactctcatgatctcccggacccctgagggtcacgtg
cgtgggtgggtggacgtgagccaggaagaccccagggtccagttcaactggtaactggatggcg
tgaggtgcataatgccaagacaaagccgcgggaggagcagttcaacagcacgtaccgtgtg
gtcagcgtcctcaccgtcctgcaccaggactgggtgaacggcaaggagtacaagtgaaggt
ctccaacaaaggcctcccgtcctccatcgagaaaaccatctccaaagccaaaggtgggaccc
acgggggtgcgagggccacatggacagaggtcagctcgccccacccctctgcctgggagtgc
cgctgtgccaaacctctgtccctacagggcagccccgagagccacaggtgtacacctgcccc
catcccaggaggagatgaccaagaaccagggtcagcctgacctgcctgggtcaaaggcttctac
cccagcgacatcgccgtggagtgggagagcaatgggcagccggagaaactacaagaccac
gcctcccggtgctggactccgacgggtccttcttctctacagcaggctaaccgtggacaaga
gcaggtggcaggaggggaatgtcttctcatgctccgtgatgcatgaggctctgcacaaccac
tacacacagaagagcctctccctgtctctgggtaaa

Figura 1 (continuación)

(h) IL-17A humana (SEQ ID NO: 21)

GITIPRNPGCPNSEDKNFPRTVMVNLNIHNRNTNTNPKRSSDYYNRSTSPWNLHRNEDPERY
PSVIWEAKCRHLGCINADGNVDYHMNSVPIQQEILVLRREPPHCPNSFRLEKILVSVGCTCV
TPIVHHVA

(i) IL-17F humana (SEQ ID NO: 22)

RKIPKVGHTFFQKPESCPPVPGGSMKLDIGIINENQRVMSRNIESRSTSPWNYTVTWDPNR
YPSEVVQAQCRNLGCINAQGKEDISMNSVPIQQETLVVRRKHQGCSVSFQLEKVLVTVGCTC
VTPVIHHVQ

Figura 2a

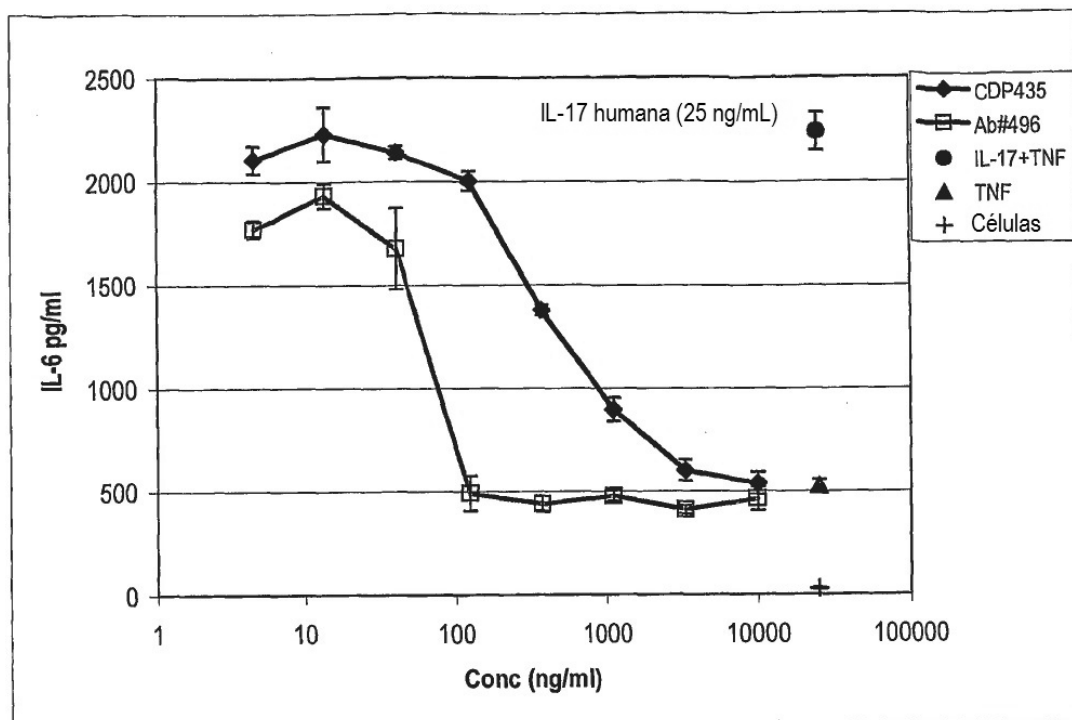


Figura 2b

