

РЕПУБЛИКА БЪЛГАРИЯ

(19) BG

(11) 108549A

(51) A61K 31/00



ЗАЯВКА ЗА ПАТЕНТ

ЗА

ИЗОБРЕТЕНИЕ

ПАТЕНТНО ВЕДОМСТВО

<p>(21) Заявителски № 108549 (22) Заявено на 28.01.2004 (24) Начало на действие на патента от:</p> <p style="text-align: center;">Приоритетни данни</p> <p>(31) 301676 (32) 28.06.2001 (33) US</p> <p>(41) Публикувана заявка в бюлетин № 2 28.02.2005 (45) Отпечатано на (46) Публикувано в бюлетин № на (56) Информационни източници:</p> <p>(62) Разделена заявка от рег. №</p>	<p>(71) Заявител(и): PLIVA D.D.,, HR-10000 ZAGREB, ULICA GRADA VUKOVARA 49 (HR); (72) Изобретател(и): NAVIA, Manuel A., 02421 Lexington MASSACHUSETTS (US); ALA, Paul J., 02108 Boston MASSACHUSETTS (US); GRIFFITH, James P., 02493 Weston MASSACHUSETTS (US); ALI, Janid A., 02452 Waltham MASSACHUSETTS (US); FAERMAN, Carlos H., 01720 Acton MASSACHUSETTS (US); MOE, Scott T., 01752 Marlborough MASSACHUSETTS (US); MAGEE, Andrew S., 01754 Maynard MASSACHUSETTS (US); CONNELLY, Patrick R., 01451 Harvard MASSACHUSETTS (US); PEROLA, Emanuele., 02141 Cambridge MASSACHUSETTS (US); (74) Представител по индустриална собственост: Фани Владимирова Божинова, 1000 София, п.к.728</p> <p>(86) № на PCT заявка: PCT/US2002/020465, 28.06.2002 (87) № и дата на PCT публикация: WO2003/002063, 09.01.2003</p>
--	--

(54) МЕТОДИ, ОПРЕДЕЛЯЩИ ЛЕКАРСТВА НА БАЗА СТРУКТУРА, ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА D-ALA-D-ALA ЛИГАЗНИ ИНХИБИТОРИ КАТО АНТИБАКТЕРИАЛНИ ЛЕКАРСТВА

(57) Съгласно изобретението някои малки молекули могат да свързват към АТФ място на свързване на D-Ala-D-Ala лигаза, дори в отсъствието на ензимен субстрат, и могат да предизвикат структурни промени на ензимната структура, подобни на тези, които се получават при свързване на АТФ и субстрата към ензима. Такава структурна промяна се изисква за активиране или инхибиране на ензима. Предимство на изобретението е възможността за идентифициране на ключови взаимодействия в активните места на ензима и за проектиране и оптимизиране на инхибитори.

16 претенции, 10

BG 108549A

МЕТОДИ, ОПРЕДЕЛЯЩИ ЛЕКАРСТВА НА БАЗА СТРУКТУРА,
ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА D-ALA-D-ALA ЛИГАЗНИ
ИНХИБИТОРИ КАТО АНТИБАКТЕРИАЛНИ ЛЕКАРСТВА

Преглед на сродна патентна заявка

Настоящата заявка претендира за ползата от U.S. временна заявка No 60/301 676, регистрирана на 28 юни 2001 г., която е включена тук в своята цялост.

Област на техниката

Изобретението се отнася до нови методи за получаване на лекарства, по-специално за откриване на нови лекарства, които инхибират D-Ala-D-Ala лигаза, съществен ензим при образуването на бактериални клетъчни стени.

Предшестващо състояние на техниката

Съединения, които инхибират биосинтезата на бактериалната клетъчна стена са най-общо доказани, че са ефективни антибиотични средства. Например, рацемазният инхибитор флуоро-D-аланин, който предпазва от образуване на D-аланин, и β -лактамни антибиотици, които инхибират транспептидизацията, инхибират синтезата на клетъчната стена и бактериалния растеж (Parsons et al., J. Med. Chem., 31: 1772 – 1778, 1988). Поради появяването напоследък на резистентни по отношение на лекарствата бактериални щамове обаче, съществува непрекъсната нужда от нови широкоспектърни антибиотици.

Между ензимите, отговорни за биосинтезата на клетъчната стена, е важна D-аланил-D-аланин лигазата ("D-Ala-D-Ala ligase"; L.C. 6.3.2.4), тъй като тя синтезира единствения по рода си дипептид D-аланил-D-аланин ("D-Ala-D-Ala"). Дипептидът е решително инкорпориран в отделните пептидогликанови вериги, в които той осигурява местото за трансацилиране при пептидогликановото напречно свързване, крайният етап на ситеза на клетъчната стена. (Ellsworth et al., Chemistry & Biology, 3:37 – 44, 1996).

Инхибитори, които инхибират съединяването и включването на D-Ala-D-Ala в клетъчната стена се смята, че са ефективни антибиотици, тъй като те могат да причинят бактериален лизис. D-Ala-D-Ala лигазни инхибитори могат да бъдат високо селективни широкоспектърни антибиотици с относително малко неблагоприятни странични ефекти, тъй като D-Ala-D-Ala лигазата е силно консервирана между прокариоти и не присъства в хората.

D-Ala-D-Ala лигазата е мултидоменен протеин, който съдържа два свързващи джоба (rockets), един за АТФ и друг за D-Ala-D-Ala. До сега, не са идентифицирани използваеми инхибитори, които свързват към мястото на АТФ свързването на D-Ala-D-Ala лигазата.

Техническа същност на изобретението

Изобретението се базира отчасти на откритието, че някои малки молекули могат да свържат към мястото на АТФ свързването на D-Ala-D-Ala лигазата, дори в отсъствие на ензимен субстрат и могат да причинят структурни промени в ензимната структура подобна на тази, която се появява при свързване на АТФ и субстрата към ензима. Без да искаме да се обвързваме с каквато и да е теория, смята се, че такава структурна промяна се изисква било за активирането или за инхибирането на ензима. Получената от това откритие информация дава възможност за идентифициране на

ключови взаимодействия в активното място на ензима, както и на структурата и оптимизирането на инхибиторите.

Съгласно едно изпълнение, изобретението се отнася до метод за оценяване потенциала на химическа единица да се асоциира с молекула или молекулен комплекс включващ свързващ джоб (pocket), дефиниран от структурни координати на D-Ala-D-Ala лигаза E. Coli аминокиселини Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270, съгласно фигура 8; или от хомолог на тази молекула или молекулен комплекс, при което този хомолог включва свързващ джоб, който има корен от средно квадратно отклонение от атомите на основната верига на тези аминокиселини не повече от 10 Å. Методът включва един или повече, и за предпочитане всички етапи на (1) използване на предвиждащ метод (например компютърна програма или други средства) за да се проведе наместваща операция между химическата единица и свързващия джоб, определен чрез структурни координати на D-Ala-D-Ala лигаза E. Coli аминокиселини Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270 +/- корен от средно квадратно отклонение от атомите на основната верига на тези аминокиселини от не повече от 10 Å; и (2) анализиране на резултатите от тази наместваща операция за да се количествено определи асоциирането между химическата единица и свързващия джоб.

Съгласно друго изпълнение, изобретението дава метод за идентифициране на потенциален инхибитор на D-Ala-D-Ala лигаза. Методът включва етапите на (1) използване на позицията или структурата на Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270 на E. Coli D-Ala-D-Ala лигаза, съгласно фигура 8 (например при използване на атомните координати на тези аминокиселини) +/- средно от корен квадратно отклонение от атомите на основните вериги на тези аминокиселини не повече от 10Å, за да се създаде трипространствена структура на D-Ala-D-Ala лигазния свързващ джоб; (2) използване на тази трипространствена

структура за проектирането или подбирането на този потенциален инхибитор (например да се проектира или подбере един инхибитор, който задоволява изискванията, поставени от характеристиката на физическите взаимодействия, дефинирани от горните аминокиселини и или други аминокиселини в ензимното съсубстратно място на свързване, които взаимодействия могат да бъдат подобни на предварително подбрани или съответни характеристики на взаимодействия както взаимодействията които се появяват при свързването към D-аланин или друг субстрат или съсубстрат към ензима). Съгласно предпочитано изпълнение, методът включва още едно или две от: (3) синтезиране или получаване на този инхибитор и (4) контактуване на този инхибитор с D-Ala-D-Ala лигазата за да се определи способността на този потенциален инхибитор да инхибира D-Ala-D-Ala. Използваният етап може евентуално да включи проектирането на молекула, която, ако се вмъкне (docked) в тази трипросторствена структура, би имала водороден свързващ донор между 2.4 и 3.5 Å от един или два карбоксилатни кислородни атоми на Glu180 страничната верига, водороден свързващ донор между 2.4 и 3.5 Å от амиден кислород на основната верига на Lys181, водороден свързващ акцептор между 2.4 и 3.5 Å от основната верига амиден азот на Leu183, водороден свързващ донор между 2.74 и 3.5 Å от основната верига амиден кислород на Leu183 и водороден свързващ акцептор между 2.4 и 3.5 Å от азота на страничната верига на Lys144. Освен това молекулата може да включва хидрофобни взаимодействия 3.5 – 4.5 Å от CD1 въглерода и SD серни атоми от страничната верига на Leu 269 и съответно Met154. Потенциалният инхибитор може също да бъде бисубстратен аналог (например, аналог, който може да свързва както АТФ-свързващото място, така и D-Ala-свързващото място на ензима).

Съгласно още едно изпълнение, изобретението очертава метод за идентифициране на потенциален инхибитор на D-Ala-D-Ala лигаза или

хомолог на D-Ala-D-Ala лигаза. Методът включва етапите на (1) проектиране или подборане на молекула, която води до Ile142 на D-Ala-D-Ala лигаза или е противочаст в хомолог в 12 Å от Met259 на D-Ala-D-Ala лигаза или нейната противочаст в хомолог, доведен в 12 Å от Leu269; (2) синтезиране или получаване на този инхибитор и (3) противодействие на този инхибитор с D-Ala-D-Ala лигаза за определяне способността на този потенциален инхибитора да инхибира D-Ala-D-Ala.

Освен ако е казано друго, всички технически и научни термини използвани тук, имат същото значение както обикновено се използват от специалист от областта, към която принадлежи настоящето изобретение. Въпреки че могат да се използват методи и материали подобни или равностойни на описаните при прилагането или изпитването на настоящето изобретение, подходящи методи и материали са описани по-долу. Всички публикации, патентни описания, патенти и други съобщения споменати тук са включени чрез реферат или в тяхната цялост. В случай на разногласие, настоящето описание, включително дефинициите, ще бъдат проверени. В допълнение, материалите, методите и примерите имат само илюстративна цел без да са ограничаващи.

Други характеристики и предимства на изобретението ще станат видни от следващото подробно описание и от претенциите.

Кратко описание на чертежите

Фигура 1 е хипотетичен структурен чертеж на D-Ala-D-Ala лигазен ензим в отсъствие на субстрати и/или кофактори, базирани на кристалографни данни и показваща относителните позиции на ATP- и D-Ala-D-Ala места на свързване и четирите домена на протеина.

Фигура 2 е суперпозиция на кристалните структури на D-Ala-D-Ala лигаза, комплексирана или само с ATP или с ADP, фосфат и D-Ala-D-Ala, както е показано в червено и съответно в жълто. Стрелката показва посоката

на ротация на твърдото тяло на домен В при предвижване от предишната структура към последната.

Фигура 3 са серии от схеми на структурната промяна, която е хипотезирана да се случва в хода на реакцията на ензима при свързването на АТР или на инхибитор към мястото на АТР на D-Ala-D-Ala лигазата. Схемите отговарят на несвързания ензим (E), модел на началния инхибиторен комплекс (EI) и кристалната структура на ензима след индуцираната от инхибитора структурна промяна (EI*).

Фигура 4 е чертеж, който илюстрира поне някои от ключовите електростатични (а) и хидрофобни (b) взаимодействия между остатъци на активни места на ензима и инхибитора, който индуцира структурната промяна в лигазата. Прекъснатите линии отговарят на водородните връзки, образувани между консервираните протеинови остатъци и инхибитора. Показаните в (b) остатъци участват в Van der Waals-овите взаимодействия с инхибитора.

Фигура 5 е графика на скоростта на спиране на поточно лигазно свързване по отношение на АТР концентрацията.

Фигура 6 е графика на флуоресцентно потискане на D-Ala-D-Ala лигазата по отношение на АТР концентрацията.

Фигура 7 е схема на взаимодействията получена от кристална структура на ново инхибиторно свързване към D-Ala-D-Ala лигазата.

Фигура 8 е списък на атомните структурни координати за E. coli D-Ala-D-Ala лигаза в комплекс с ADP, фосфатен йон и D-Ala-D-Ala както са получени при рентгенова дифракция на кристал от този комплекс.

Фигура 9 е списък на атомните структурни координати за E. coli D-Ala-D-Ala лигаза в комплекс с AMPNP както се получава при рентгенова дифракция на кристал от този комплекс.

Фигура 10 е таблица от данни на подреждането на петдесет и една D-Ala-D-Ala лигазни секвенции от различни щамове на бактерии.

Охарактеризиране на структурната промяна

D-Ala-D-Ala лигазата е мулти-доменен протеин, състоящ се от четири домена, чийто допирни точки създават D-Ala-D-Ala и АТР свързващите джобове (фигура 1). Структурната промяна се наблюдава чрез определяне на кристалната структура на ензима в комплекс с лиганди, които са конкурентни инхибитори на АТР; биохимически изпитания потвърждават съществуването на структурна промяна при използването на две кинетични изпитания.

Структурни методи за идентифициране на структурна промяна

Структурната гъвкавост на ензима първо бе идентифицирана чрез сравняване на две кристални структури: тази на (1) ензимът в комплекс с АТР (E1*) и (2) ензимът в комплекс с ADP, фосфат и D-Ala-D-Ala (E2). Суперпозицията на двете структури открива леко ротиране на твърдото тяло на домена В в активно място, когато ензимът е комплексиран с ADP, фосфат и D-Ala-D-Ala (фигура 2). Този резултат подсказва, че подвижната точка свързваща домен В е сравнително гъвкава и че домен В е вероятно да подлежи на съществено движение на твърдото тяло когато лиганди свързват между допирните точки на домен В и С. Илюстрация на поредицата от случки, които протичат когато лигандите първо се свързват към ензима и потенциалната величина на индуцираната структурна промяна, е показана на фигура 3, където E1 е хипотетичния първоначален комплекс.

Спираци потока изследвания върху лигаза

Ние открихме съществено флуоресцентно потискане при свързването на АТР и ADP, което ние използвахме за изследване механичните характеристики на лигаза. Ние проведохме спираци потока изследвания за да видим свързването на АТР и ADP към лигаза. Тези изследвания са проведени при 4⁰ С. Ние наблюдавахме единично експоненциално флуоресцентно потискане, което завършва в < 20 ms. Наблюдаваните

скоростни константи, изразени като функция на нуклеотидната концентрация, дават хиперболична площ, показваща, че първоначалното свързване се следва от структурна промяна (фигура 5). Това потвърждава предишната наша хипотеза за лигаза, а именно, че ензимът претърпява структурни промени, които са важна и интегрална част от ензимния механизъм. Този ензим изглежда че попада в категорията на “индуцирано напасване”.

Както е показано на фигура 5, първоначалния колизионен комплекс е относително слаб за да образува EA комплекса (отворен комплекс). Ензимът претърпява структурна промяна за да образува частично затворения комплекс EA*. За ATP, тази структурна промяна увеличава афинитета 3.2 пъти до крайното $K_d = 157 \text{ мкМ}$ (общият афинитет е продукта от двете дисоциационни константи K_{d1} и K_{d2}), с нетна дисоциационна скоростна константа 126 s^{-1} . ADP проявява подобна хиперболична зависимост, отново показателна за индуциран напасващ механизъм (т.е. структурна промяна следваща свързването). За ADP структурната промяна увеличава афинитета на нуклеотида седемкратно за частично затворения комплекс, с оглед на първоначалния колизионен комплекс, водещо до една обща $K_d = 50 \text{ мкМ}$. Ние хипотезирахме, че правейки повече взаимодействия, ще се увеличи афинитета и от тук ще се стабилизира тази частична затворена форма. За да се дисоциира лиганда, ензимът трябва да се отпусне обратно до отворената форма. От тук, афинитетът на тези инхибитори вероятно корелира с едно намаляване в нетната дисоциационна скоростна константа (т.е. k_2). Например, ADP има три пъти по-висок афинитет отколкото има ATP за D-Ala-D-Ala лигазата и има по-бавна $k_2 = 72 \text{ s}^{-1}$. В някои случаи, може да е от предимство за инхибитора да препятства по-нататъшна структурна промяна, може би затварянето на омега бримката на домен D, водещо до напълно затворена форма на ензима.

Спиращи потока изследвания са допринесли да разбирането на механизма по който лигазата свързва лигандите и са потвърдили предишните подозрения за “индуцирано напасващ” механизъм. Определянето на афинитета на високо афинитетни инхибитори (нисък nM) би било трудно чрез равновесни свързващи методи или в устойчиво състояние ензимни кинетики. Спиращи потока изследвания могат да бъдат единствения начин по който може да бъде определен афинитета на високо афинитетни инхибитори с всякаква степен на достоверност. Изследванията могат да се проведат, например, като се използват методи описани от Eccleston, J. F. “Stopped-flow Spectrophotometric Techniques” in Spectrophotometry and Spectrofluorimetry a Practical Approach, Ed. D. A. Harris & C. I. Bashford, IRL Press, 1987, p. 137 – 164.

Флуоресцентни титруващи експерименти

В допълнение към спиращата потока работа, могат да се използват в устойчиво състояние флуоресцентни титруващи изследвания за да се определи афинитета на нови съединения към D-Ala-D-Ala лигаза. Тези експерименти използват също свойственото триптофаново потискане, което се появява при нуклеотидно свързване. Ние определихме афинитета на АТР за лигаза при 25⁰ С (фигура 6). Интересно е, че K_D на АТР свързването е по-слаба от K_m , неочаквано показващо, че ограничаващия скоростта етап при лигазния механизъм се появява след образуването на продуктите. Тази методология може да се използва за да се характеризират потенциалните инхибитори на лигаза. Титруващите експерименти могат да се проведат, например, като се използват методите описани от Lohman, T.M. & Mascoti, D. P. (1992), “Nonspecific Ligand-DNA Equilibrium. Binding Parameters Determined by Fluorescence Methods” in Methods in Enzymology, vol. 212, p. 425 – 458.

Протеолизни експерименти

Ние разработихме *in vitro* изпитание за наблюдаване затварянето на омега бримката (т.е. D домена). Затварянето на омега бримката се проучва чрез протолиза. В отсъствие на лиганди, трипсин разцепва ензима на два по-малки фрагменти. Присъствието на АТР и фосфинат води до защита на този ензим от протеолиза. Тази смес е известна че стабилизира затварянето на омега бримката, както се демонстрира чрез кристалографски изследвания. АТР или АТР свързващи молекулите могат самостоятелно да затворят омега бримката. В присъствието обаче на свързваща молекула за D-Ala-D-Ala мястото, като фосфинат, дипептидът D-Ala-D-Ala или циклосерин, заедно с АТР, ADP или АТРgS стабилизират затварянето на омега бримката. Изненадващо, не-хидролизуемия АТР аналог АМРРNP не подкрепя затварянето на омега бримката, възможно индициращ за подходящо взаимодействие във фосфатния свързващ регион с оглед на затварянето на омега бримката. Ние сме синтезирали аденозинов аналог в който фосфатната група е заменена с малка верига с аминогрупа в края. Тази молекула представлява интерес по две причини: тя подкрепя затварянето на омега бримката в присъствието на фосфинат или циклосерин, и тя помества във фосфатния свързващ регион група, която подобрява афинитета на молекулата. Тази молекула има двадесет пъти по-голям афинитет по отношение на АТР ($K_d = 300 \text{ мкМ}$).

Притежавайки молекула, която може да подпомогне затварянето на омега бримката, може да доведе до значително по-висок афинитетен инхибитор. Тези изследвания са също важни за определяне на условията на кристализация при рН 7. При рН 7 изглежда че само омега бримковата затворена форма кристализира.

Охарактеризиране на структурната промяна

Кристалните структури на ензима комплексиран с нашите инхибитори ясно разкриват добре-дефиниран свързващ джоб. Някои ключови взаимодействия между протеина и инхибитора, които индуцират

структурната промяна са показани на фигура 4. Показаните там остатъци са остатъци на ключови активни места, с които инхибитарите трябва да взаимодействат с оглед да задържат голямата ротация на твърдото тяло в домана В по отношение на активното място, както е показано на фигура 3. Тази промяна може също да се опише като движения на отделните остатъци, както са изброени на таблица 1.

Таблица 1

Промяна в междумолекулното разстояние при структурните промени:

Разстояние между остатъци ILE142 и Met259, и MET 154 и LEU269

в хипотетичен модел EI и кристалните структури EI* и EP (затворен):

	ILE142 към Met259	MET 154 и LEU269
EI	17.4	13.5
EI*	7.9	8.9
EP	7.0	8.5

Други остатъци в активното място, които ние целим в процеса на инхибиторното оптимизиране, са изброени по-долу. Тези остатъци потенциално могат да взаимодействат директно с инхибитори чрез van der Waals-ови взаимодействия и/или водородни връзки.

Потенциални хидрофобни взаимодействия със странични вериги на:

ILE142

TRP182

Leu183

MET259

MET154

Leu269

PHE209

Потенциални електростатични взаимодействия със следните странични вериги (или атоми от основната верига, където е показано):

GLU180

LYS181

LEU183 (CO от основната верига)

LEU183 (NH от основната верига)

GLU185 (NH от основната верига)

LYS144

GLU187

LYS215

TYR212

SER150

GLU270

ASP257

LYS97

GLU148

ARG255

ASN272

SER94

GLU68

Остатък партньори на взаимодействие от страничната верига

Asp hb донори

Glu hb донори

Arg hb акцептори, ароматни пръстени

Lys hb акцептори, ароматни пръстени

His hb донори, hb акцептори, ароматни пръстени,
положително натоварени групи

Pro хидрофобни групи (алифатни, ароматни)

Val хидрофобни групи (алифатни, ароматни)

Ala хидрофобни групи (алифатни, ароматни)

Leu хидрофобни групи (алифатни, ароматни)

Ile хидрофобни групи (алифатни, ароматни)

Trp	хидрофобни групи (алифатни, ароматни), положително натоварени групи
Gln	hb донори, hb акцептори,
Asn	hb донори, hb акцептори,
Ser	hb донори, hb акцептори,
Thr	hb донори, hb акцептори,
Tyr	hb донори, hb акцептори, хидрофобни групи (алифатни, ароматни), положително натоварени групи
Phe	хидрофобни групи (алифатни, ароматни), положително натоварени групи
Gly	(няма странична верига)
Cys	hb донори, hb акцептори,
Met	hb донори, хидрофобни групи (алифатни, ароматни).

Процеси за оптимизиране на инхибиторната активност

Ние разработихме интеративен процес за подобряване на силата на съединения, които индуцират описаната по-горе структурна промяна. Процесът използва последователно информация, получена от протеиновата кристалография, молекулното моделиране, химията и биохимията.

Протеинова кристалография

Първият етап в този процес е да изкристализира и да се определи структурата на протеина в комплекс с лиганд, който индуцира желаната структурна промяна. Свързващият джоб, в близост с инхибитора, се анализира и след това структурната информация може да се използва за проектиране на производните, предназначени за постигане на конкретни взаимодействия с целевите остатъци в каталитичния джоб. Това схващане е най-добре илюстрирано с помощта на 2D представянето на кристалната структурна ориентация на инхибитор, който бе открит, свързан на активното място на D-Ala-D-Ala лигаза, както е показано на фигура 7.

Тази структура идентифицира позицията 6 на пуриновия пръстен като най-доброто място за вмъкване за ефективно дериватизиране, докато позиции 2, 3 и 9 участват в критични взаимодействия с протеинови остатъци. Поради това, производно при позиция 6 може да взаимодейства с остатъци Glu 270 и 187, Asp 157, Lys 144 и 97 и други, както е описано в следващия раздел.

Молекулно моделиране

Структурната информация на свързващия джоб може също да се използва за проектиране на оптимизиран аналог чрез генериране и намаляване на виртуалните библиотеки от съединения, които съдържат желаната сърцевина. Например, на базата на кристалографската информация от фигура 1, се създават виртуални библиотеки от 6-заместени 2-аминопурины, комбинирайки пуриновата сърцевина с търговски достъпни изграждащи блокове. Получените в резултат структури след това се вкарват в активното място на D-Ala-D-Ala лигазата и се подбира комплект от обещаващи съединения на базата на оценката за вмъкване.

Както се споменава по-горе, кристалната структура също идентифицира серия от остатъци в свързващия джоб, които могат да бъдат потенциални цели на специфични взаимодействия: Glu 270 и 187, Asp 157, Lys 144 и 97 и други. Проектират се нови лиганди чрез получаване на производни на пурина, което води до фрагменти с подходящ размер и химическа характеристика за специфично взаимодействие с някои от тези остатъци. След това проекта се валидизира чрез вмъкване на получените производни в каталитичния джоб на DDL. Включените етапи при получаването и вкарването на виртуална библиотека на 6-заместени пурины е описано в пример 7. Тези моделиращи методи имат приоритет пред синтетичните усилия за подборане на най-обещаващите кандидати за синтез, което ускорява ефективността на водещия оптимизиращ процес.

Химия

Третият етап в този процес е синтезата на приоритетни съединения. Описаните по-горе аналози, които са били вмъкнати в активните места и са били приоритетни за синтезиране въз основа на показателите за вмъкване се получават след това като се използват или присъщи методи или известни химически реакции, описани в литературата. Виртуалната библиотека от съединения, описана в молекулната моделираща секция, може да се създаде като се използват търговски достъпни изходни материали или описани в литературата изходни вещества. В случай, че изходните материали са търговски достъпни, те се закупуват и след това се използват за синтезиране на предвидените съединенията, които чрез вмъкване се очакват да бъдат мощни ензимни инхибитори. В случай, при който изходните материали не са търговски достъпни, но са синтезирани съгласно описани в литературата методи, тези изходни материали първо се синтезират, използвайки литературни или аналогични методи, и след това на свой ред се използват за синтезиране на химически структури, които биха имали приоритет въз основа на виртуалното библиотечно вмъкване.

Биохимия

Крайният етап е да се определи дали новосинтезираните съединения инхибират ензима и след това да се определи дали те предизвикват желаната структурна промяна. Активни съединения могат да бъдат примерно конкурентно изпитвани за активност в *in vitro* изпитание и да се анализират чрез протеинова кристалография за да се започне следващия етап на оптимизиране.

Ензимологични изследвания се използват за определяне или идентифициране на важните съединения за АТР свързващото място. Ние открихме, че главната част от афинитета идва от адениновата част на АТР молекулата и че фосфатите са фактически вредни за афинитета, особено алфа фосфат. Анализ може например да се проведе като се използва АТР-азното изпитание на Duncan et al., (Biochemistry, 27: 3709 – 3714, 1988).

Изпитания за инхибиране на D-Ala-D-Ala лигаза

Инхибиране на D-Ala-D-Ala лигазата може да се проведе чрез използване на пируват киназа/лактатно дехидрогеназно (PK/LDH) изпитание, описано в пример 2. В синтезния процес на бактериалната клетъчна стена, лигазата катализира превръщането на ATP в ADP конкурентно с лигирането на двата D-аланинови остатъка. След това PH регенерира ATP от ADP, симултанно създаден с конверсията на фосфопирувата в пируват. LDH катализира редукцията на пирувата до лактат чрез превръщане NADH в NAD⁺. Чрез наблюдаване на скоростта на получаване на NAD⁺, може да се потвърди D-Ala-D-Ala лигазната активност.

Бисубстратни аналози

Обсъдени са също бисубстратни аналози, които не само свързват към ATP-мястото на свързване на D-Ala-D-Ala лигаза, но също така свързат към D-Ala свързващото място. Такива аналози биха включили ATP- и D-Ala-подобни групи, свързани чрез гъвкав или твърд тетер (например алкилова, алкенилова, алкинилова или полиароматна свързваща група или производно или хибрид на една или повече от тези групи). Бисубстратни аналози могат да проявяват повишена активност и/или специфичност за D-Ala-D-Ala лигазни ензими.

Изпитания за антибактериална активност

Съединенията могат да бъдат скринирани за антибактериална активност като се използват стандартни методи. При един пример, илюстриран в пример 5, се използват техники на микроразреждане на бульон за измерване на *in vitro* активността на съединенията срещу дадена бактериална култура и да се получат данни за минимална инхибираща концентрация (MIC).

При един характерен метод, съединенията могат да бъдат скринирани за антибактериална активност срещу множество различни бактериални щамове. Съединенията се изпитват за активност или ширина на спектъра на

активност с оглед да се идентифицират най-добрите. Съединенията могат да бъдат скринирани за бактериостатична активност (т.е. спиране растежа на бактериите) и/или бактериална активност (т.е. убиване на бактериите).

Водещите съединения могат след това да се оптимизират например чрез вариране на заместителите за да се получат производни съединения. Производните могат да се получат единично или могат да се получат като се използват паралелни или комбинирани синтетични методи. Във всеки от случаите, производните могат да се изпитат за да се получат данни за връзката между структура – активност (SAR), които след това да се използват за по-нататъшно оптимизиране на водещите съединения.

Методи за оптимизиране на ензимната инхибиторна активност

След идентифицирането на потенциален инхибитор (например чрез сравняване активността на съединение в ензимно изпитание с активността на стандарта като AMP-PNP), могат да се използват методи базирани на структурното проектиране за оптимизиране на инхибитора. При използването на лекарствено подобни молекули, предварително скринирани *in silico* с компютърни модели за активното място, може да се подобри бързината на проверката за водещи съединения. Например, инхибиторът на ензим може да изкристализира като комплекс и да се определи кристалната структура на комплекса. Получената от кристалната структура информация може да се използва за формулиране на фармакофорни хипотези. Например, ако кристалната структура показва, че има неизползвани водорна връзка акцептор (например, карбонилната група на глутаматен остатък) в активното място на ензима на определено разстояние (например Å) от донор на водородна връзка (например протонизирана аминогрупа) на инхибиторната молекула, може да се проектира нов потенциален инхибитор, при който донорната група на водородната връзка е на подходящо разстояние. Този процес може да се повтори за да се осигурят все по-мощни и специфични ензимни инхибитори.

Компютеризирано фармакофорно търсене може да се проведе като се използва рентгенова кристалографска структурна информация за да се създаде компютеризиран модел. Търговски достъпни съединения могат да се вмъкнат и подберат за скриниране като се използва оценката за вмъкване като един, но не обезателно единствен елемент за обсъждане.

Могат да се закупят или синтезират допълнителни аналози и след това да се скринират. Експерименти с тези аналози могат да се използват за потвърждаване на хипотезата от предишни изпитания или да се предложат нови хипотези, които по подобен начин могат да се изпитат чрез повтаряне на метода. В някои случаи могат да се идентифицират алтернативни шаблони и съединения на базата на тези шаблони могат да се закупят или синтезират за да се изпитат новите хипотези. Може да е желателно, да се идентифицират фармацевтично релеванти шаблони и/или шаблони които най-добре проверяват допълнителни свързващи хипотези. Във всеки случай, съединенията се скринират срещу ензимната цел и също така се проверяват за *in vitro* антибактериална активност.

Нещо повече, молекулни моделиращи техники са известни в областта, включително има компютърни програми, които са подходящи за създаване и използване на модели за рецепторни и ензимни структури.

Достъпни са многобройни компютърни програми и са подходящи за рационално проектиране на лекарства и за процесите на компютърно моделиране, моделно изграждане и компютърно идентифициране, за подбиране и оценяване на потенциалите на антимикробиални съединение в описаните тук методи. Такива са например GRID (достъпни от Oxford University, UK), MCSS (достъпни от Accelrys, Inc., San Diego, CA), AUTODOCK (достъпни от Oxford Molecular Group) FLEX X (достъпни от Tripos, St. Louis, MO), DOCK (достъпни от University of California, San Francisco), CARVET (достъпни от University of California, Berkeley), HOOK (достъпни от Accelrys, Inc., San Diego, CA) и 3D датабаза системи като

MACCS-3D (достъпни от MDL Information Systems, San Leandro, CA), UNITY (достъпни от Tripos, St. Louis, MO) и CATALYST (достъпни от Accelrys, Inc., San Diego, CA). Потенциални антимикробни съединения могат също да се проектират компютърно "de novo", използвайки такава софтуер програма като LUDI (достъпна от Biosym Technologies, San Diego, CA), LEGEND (достъпна от Accelrys, Inc., San Diego, CA) и LEAPFROG (достъпна от Tripos Associates, St. Louis, MO). Деформационната енергия на съединенията и електростатичното отблъскване могат да бъдат оценени като се използват програми като GAUSSIAN 92, AMBER, QUANTA/CHARMM, and INSIGHT II/DISCOVER. Тези техники на компютърно оценяване и моделиране могат да се проведат на всеки достъпен хардуер, включително например уъркстайшънс, достъпни от Silicon Graphics, Sun Microsystems и други. Тези техники, методи, хардуери и софтуер програми са само представителни и нямат за цел пълно изброяване. Други моделиращи техники, известни в областта, могат също да се използват във връзка с изобретението. Виж например, N. C. Cohen, *Molecular Modeling in Drug Design*, Academic Press (1996) (и справките посочени там) и софтуер идентифициран на различни интернет места.

Оптимизирането на D-Ala-D-Ala лигазната инхибиторна активност може да бъде независимо от оптимизирането на антибактериалната активност. Различните активности могат да се различат чрез доставяне на бактериален щам, инженерно обработен, да свръхекспресира D-Ala-D-Ala лигазна (т.е. да създава щам от бактерии, който е резистентен спрямо D-Ala-D-Ala лигазни инхибитори) и след това да покаже, че антибактериалната активност на конкретно водещо съединение не се повлиява от такова свръхекспресиране.

Изобретението се описва по-подробно със следващите примери, без те да ограничават обхвата на изобретението, включен в претенциите.

Примери за изпълнение на изобретението

Пример 1: Методи за кристализиране на протеина, събиране на данни и определяне на структурата

Структурна информация се получава или чрез съкристализиране на D-Ala-D-Ala лигаза в присъствието на лиганди или пропиване на лиганди в предварително оформени кристали на протеина. Съгласно първия начин, получени с дифракционно качество кристали (хексагонални пръчици; 0.1 мм x 0.1 мм x 0.2 мм) на лигаза комплексирани с инхибитори след пет дни при 18⁰ С, при парова дифузия в 4 мкл капки, съдържащи 5 мг/мл протеин, 35 mM ацетатен буфер (pH 4.5), 2.75 % (т/о) полиетиленгликол 6000, 4 % DMSO и 15-100 кратен моларен излишък на инхибитор по отношение на неговата K_i стойност. Съгласно втория начин, кристалите от лигаза в комплекс с АТР се инкубират в стабилизиращ разтвор, който съдържа 70 mM ацетатен буфер (pH 4.5), 5 % (т/о) полиетиленгликол 6000 и 15-100 кратен моларен излишък на инхибитор по отношение на неговата K_i стойност.

Дифракционните данни се събират при -180⁰ С върху RAXIS IV ++ изобразяваща плака, качена на Rigaku RuH3R ротиращ аноден генератор, снабден с меден анод, 0.5 мм катод и осмиеви огледала. Параметрите на единичната клетка се определят от единично 1⁰ осцилационно изображение, при използване на DENZO процесорен софтуер (Z. Otwinowski and W. Minor, "Processing of X-ray Diffraction Data Collected in Oscillation Mode", Methods in Enzymology, Vol. 276; Macromolecular Crystallography, part A, p. 307 – 326, 1997, C. W. Carter, Jr & R. M. Sweet, Eds., Academic Press). Пълен комплект от данни се получават от единичен кристал чрез събиране на 100 – 180 осцилационни изображения през 1⁰ интервали за 15 минути при детекторна дистанция 100 мм. Съкристалите и пропитите-кристали от лигазни инхибиторни комплекси и двата принадлежат на пространствената група P2₁2₁2₁ с две молекули в асиметрична единица и със следните

клетъчни измерения: $a = 69.6 \text{ \AA}$, $b = 82.6 \text{ \AA}$ и $c = 96.7 \text{ \AA}$. Комплектите характерните данни са 98 % пълни до 2.0 \AA с $R_{\text{sym}} 4 - 9 \%$.

Публикуваните атомни координати за лигазни комплекси с фосфинатни инхибиори (Fan et al., Science, 266(5184): 439 – 443, Oct. 21, 1994) се използват като модел за разрешаване на кристалната структура на лигаза: AMPNP чрез молекулно заместване при използване на XPLOR програма (Brunger et al., Science, 235: 458 – 460, 1987) и пречистената AMPNP структура след това се използва като изходен модел за пречистване на последващи комплекси. Структурата на лигаза, комплексирана с молекула, идентифицирана при използване на описаните тук методи, се пречиства чрез провеждането на няколко цикъла на симулирано каляване последвано от позиционни и ограничени B-факторни пречиствания при използване на XPLOR.

Пример 2 – Определяне на IC_{50} на D-Ala-D-Ala лигаза

Пуриновите производни на пример 1 се разтварят в диметилсулфоксид (DMSO) в концентрация 100 mM в деня на скринирането, ако е необходимо при използване на Вортекс смесител за улесняване на разтварянето. Разтворът се държи при стайна температура до завършване на скринирането.

В деня на скринирането се приготвя 10 mM NADH (Sigma) изходен разтвор чрез разтваряне на 32 мкмола NADH в 3.2 мл двойно дестилирана вода. NADH разтворът се държи върху лед. Приготвят се съдържащите 50 mM фосфоенолпируват (PEP; Sigma), 500 мкM HERMES, 30 mM аденозин трифосфат (ATP; Sigma), 200 mM D-аланин (Sigma) и 4 x същински буфер (т.е. 100 mM hepes, 40 mM магнезиев хлорид и 40 mM калиев хлорид) изходни разтвори и се съхраняват върху лед. Изходен разтвор от пируват киназа/лактат дехидрогеназа (PKLDH) също се получава от Sigma.

За всяко от седемте пуринови изпитвани съединения се използват две 96-кладенчеви плаки; една инхибиторна плака и една ензимна плака.

Изпитваните съединения отговарят на редове А – G на плаките. D-циклосерин (Sigma), използван като контрола, отговаря на реда H във всяка от плаките.

Ензимният разтвор се оставя да се темперира на 25⁰ С.

Приготвят се следните разреждания: 50 мкл диметилсулфоксид (DMSO) се прибавя във всяко кладенче на колонки 1 – 11, редове А – G на инхибиторната плака. 50 мкл 1 х същински буфер или DMSO (в зависимост от разтворителя, в който циклосериновата контрола е разтворена) се прибавя към всяко кладенче на колонки 1 – 11, ред H. 100 мкл от 100 mM пуринов разтвор се прибавя към колонка 12, редове А – G (т.е. първото съединение в ред А, второто съединение в ред В и т.н.). 100 мкл от 100 mM циклосеринов разтвор се прибавя към колонка 12, ред H.

50 мкл разтвор се пренася от колонка 12 във всяка редица до колонка 11 на същия ред, смесвайки разтвора с DMSO. 50 мкл от разтвора след това се пренася от колонка 11 на всеки ред до колонка 10 на същия ред, 50 мкл от колонка 10 се пренасят до колонка 9 и т.н. до колонка 2. Не се пренася разтвор в колонка 1. Отбелязват се времената на започване и на завършване.

120 мкл от ензимния разтвор се прибавя към всеко кладенче на ензимната плака.

Субстратните разтвори се темперират при 25⁰С.

След това пурините и ензимите се инкубират. Тъй като реакциите са инициирани в колонки, пурините също се прибавят колонка по колонка за да се сведе до минимум вариациите във времената на реагиране между кладенчетата. При $t = 0$ минути, 5 мкл пурин се пренася от всеко кладенче от колонки 1 – 4 на инхибиторната плака до съответното кладенче на ензимната плака. При $t = 4$ минути, 5 мкл пурин се пренася от всеко кладенче от колонки 5 – 8 на инхибиторната плака до съответното кладенче на ензимната плака. При $t = 8$ минути, 5 мкл пурин се пренася от всеко кладенче от

колонки 9 – 12 на инхибиторната плака до съответното кладенче на ензимната плака. След това инхибиторната плака се замразява.

При $t = 18 - 19$ минути, субстратният разтвор се взема от 25°C и се поставя в Spectromax (R) UV-vis спектрофотометър. При $t = 20$ минути, в границите на 30 секунди, 125 мкл от субстратния разтвор се прибавя към всеко кладенче от колонки 1 – 4 и се отчита абсорбцията при 340 нм. При $t = 24$ минути и съответно $t = 28$ минути процесът се повтаря за колонки 5 – 8 и 9 – 12.

Така, концентрацията на съединенията от колонки 1 – 12 във всеки ред са 0, 1.9 мкМ, 3,9 мкМ, 7.8 мкМ, 15.6 мкМ, 31.2 мкМ, 62.5 мкМ, 125 мкМ, 125 мкМ, 250 мкМ, 500 мкМ, 1 мМ и съответно 2 мМ.

Редукционните стойности се умножават с -4.06 за да се превърнат mOD/мин единици в нМ/сек ($\text{OD} = \lambda \text{LM}$; $\lambda = 6220 \text{ 1/Мем}$; $L = 0.66 \text{ см}$; $\text{mOD/сек} = 6220 \times 0.66 \times (\text{mM/сек}) \times 60$; $(\text{mOD/сек}) \times 4.06 = \text{nM/сек}$); умножено по -1 , тъй като NADH абсорбцията намалява колкото повече се получава от продукта).

Площи на скорости на реакцията по отношение концентрацията на инхибитора се получават като се използва Kaleidograph® и IC_{50} или K_i стойностите се определят след като данните се нагласяват към уравненията. За % инхибиране, се използва ензимната активност в присъствието на DMSO като 100% активност.

Циклосерин в 1 х същински буфер има стойност от около 150 мкМ.

Този метод на изпитание зависи от допускането, че пуриновите съединения не са конкурентни инхибитори.

Пример 3 – Определяне % на инхибиране на D-Ala-D-Ala лигаза

Повтаря се начина на изпитание от пример 2, с изключение на това, че инхибиторните плаки се приготвят с 5 мМ разтвори на инхибиторите в плаките (вместо чрез серийно разреждане), за да се получи крайна концентрация от 100 мкМ инхибитор.

Пример 4 – Определяне на K_i и начина на инхибиране

Методиката на изпитание от пример 2 се повтаря като се използват три различни субстратни разтвори, всеки в отделна ензимна плака. Крайните концентрации в реакционните смеси са: (А) 2 mM АТР и 1 mM D-аланин; (В) 2 mM АТР и 32 mM D-аланин; (С) 50 mM АТР и 32 mM D-аланин. Една и съща инхибиторна плака се използва с всичките три ензимни плаки. Като контроли се използват аденозин (Sigma) и циклосерин (Sigma).

Пример 5 – Изпитание чрез микроразреждане за антимикробна чувствителност

Изходни разтвори от изпитваните съединения се получават в диметилформаид в концентрация 5 мг/мл. След това от изходните разтвори се приготвят работни разтвори от изпитваните съединения в Mueller – Hinton бульон (МНВ) с начална концентрация 64 мкг/мл (т.е. 25.6 мкл от изходния разтвор в 974.4 мкл МНВ = 128 мкг/мл, който се разрежда с равен обем от бактериалния инокулум по описания по-долу начин.).

Бактериален инокулум се получава от култура от една нощ (т.е. пресна колония от агарова паничка в 5 мл МНВ; *H. Influenzae* се отглежда в МНВ с прибавяне на дрожден екстракт, хематин и NAD), центрофугира се 2 x 5 мин /3000 об/мин (за *S. pneumoniae* и *H. Influenzae*, 2 x 10 мин /3000 об/мин) и се диспергира в 5 мл пресен МНВ всеки път, така че бактериалната суспензия се разрежда за да се получат 100 колонии, образуващи единици (cfu) в микроплачно кладенче (100 мкл общ обем).

Кладенчетата в микроплаката след това се запълват с двукратни разреждания на изпитваното съединение (50 мкл), като се започне с 64 мкг/мл. Колонките 2 – 12 се пълнят с 50 мкл бактериален инокулум (краен обем: 100 мкл/кладенче). Плочките се инкубират при 37° С 18 – 24 часа (*S. pneumoniae* расте в обогатена с CO₂ атмосфера).

Оптичната плътност на всяко кладенче се измерва след това при 590 нм (OD₅₉₀) с TECAN SpectroFluor Plus (R), и се определя минималната

инхибиторска концентрация (MIC) като концентрация, която показва 90 % инхибиране на растежа.

Пример 6 – MIC определяне при използване на свръхекспресиращи *E. coli*

Повтаря се начина на работа от пример 5 със следните модификации:

Използваната за растежа на бактериите среда е луриа бульон (LB) с прибавен антибиотик (20 мг/л хлорамфеникол за pBAD вектори, 100 мг/л ампицилин за pTAC векторите за плазмидно селектиране) или M9 минимална среда с D-манитол като източник на въглерод.

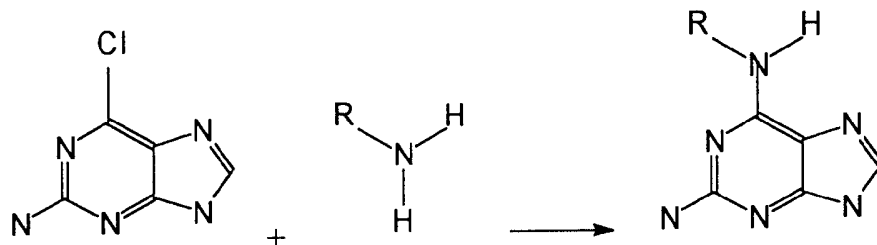
Използваните за инокулум бактерии в LB се приготвят както следва: Еднонощна култура се разрежда 1 : 50 в пресна LB среда и се инкубира при 37⁰ C на шейкер при 250 об/мин. След mid-log етап се постига OD₆₀₀ = 0.5 – 1.0, около 3 часа), прибавя се регулатор на реакцията (глюкоза, арабиноза или IPTG) и бактериите се инокулират допълнително 3 часа. След 3 часа се измерва отново OD₆₀₀ за да се определи броя на бактериите и културата се разрежда в LB среда (антибиотици – хлорамфеникол или ампицилин и регулатори се прибавят в двойна концентрация). Крайният бактериален инокулум е около 10 000 cfu/кладенче.

Използваните за инокулума бактерии в M9 минимална среда се получават както следва: еднонощна култура в LB се центрофугира 2 x 5 мин/3000 об/мин, промива се с M9 среда, разрежда се 1:50 в M9 минимална среда, оставя се при 37⁰ C 14 часа (OD₆₀₀ ~ 0.5), прибавя се регулатор на реакцията и бактериите се инкубират допълнително 3 часа.

След 3 часа се измерва отново OD₆₀₀ за да се определи броя на бактериите и културата се разрежда в M9 минимална среда (антибиотици – хлорамфеникол или ампицилин и регулатори се прибавят в двойна концентрация). Крайният бактериален инокулум е около 10 000 cfu/кладенче.

Оптическа плътност се отчита след 24 и 48 часа поради по-бавния растеж в минимална среда.

Пример 7- вмъкване на виртуална библиотека от 700 пуринови производни



Комплект от 700 първични алифатни амини с $MT < 300$, без реактивоспособни или токсични функционални групи и достъпни от Aldrich, се подбират от Available Chemicals Directory (ACD, MDL Information Systems, San Leandro, CA).

Библиотека от 700 пурины, заместени в 6-та позиция с подобраните амини, се получават като се използва Analog Builder module от Cerius2 програма (MSI, Accelrys, Inc., San Diego, CA).

Провежда се структурно търсене върху 700 -те аналози като се използва Catalyst програма (Accelrys, Inc., San Diego, CA). Така се получава представителна група от структури за всяко съединение. След това се провеждат клъстерни анализи за да се отхвърлят дубликатите. Две структури на една и съща молекула се смятат за дубликати ако средното квадратно отклонение между съответните координати след налагане на твърдото тяло е по-малко от 1.0 Å. В тези случаи са запазва само една от двете структури. Подбраните структури се вмъкват в активното място на D-Ala-D-Ala лигаза с EUDOC програма (осигурена от Dr. Yuan-Ping Pang, Mayo Clinic). Следващата таблица е представителна за вложените файлове при изчисляване на съвместимостта при вмъкване:

Таблица на представително изчисление при вмъкване на вложени файлове:

Търсещ модул (1=лигадно предсказване, 2= виртуално скриниране):2

Брой на различни лиганди: 14258

Бокс произлизаща от x-остта: -44.5

Бокс произлизаща от Y-остта: -11.5

Бокс произлизаща от z-остта: 9

Бокс размер по x-остта: 9.0

Бокс размер по у остта: 3.5

Бокс размер по z-остта: 5.5

Ротационен инкремент (10, 20 или 30 градуса арка): 30

Транслационен инкремент (0 до 6.0 Å): 0.5

Отрязък от енергиите от интермолекулно взаимодействия (0 до -60 ккал/мол): 1000.0

Платформа (1 = MPP; 2= хомоклъстер 3 = хетероклъстер): 1

Брой на достъпни процесори: 10

Ориентирането на всяко съединение с най-малка изчислена енергия на свързване се проверява с комплект от 5 допълнителни оценяващи функции, включени в програмата CSCORE (Tripos, Inc., St. Louis, MO) и с функцията SCORE (Beijing University). Съединенията са подредени на база на консенсусно оценяване и са подбрани съответно група от 100 кандидата за синтезиране.

Пример 8 – Сравняване на D-Ala-D-Ala лигазна секвентност

За следващите 51 бактериални D-Ala-D-Ala лигазни ензими, ние създадохме таблица за подреждане на протеиновите секвенции. Резултатите от подреждането са показани на фигура 10. Значителни структурни елементи са показани на фигура 10 (виж контактни кодове).

Seq 0001 : >00_ECOLI_DDLB P07862	<i>Escherichia coli</i> (305 res).
Seq 0002 : >01A_CHLPN_DDL Q92701	<i>Chlamydomonas reinhardtii</i> (340 res).
Seq 0003 : >01B_CHLTR_DDL O84767	<i>Chlamydia trachomatis</i> (337 res).
Seq 0004 : >02_YERPES_DDL Sanger_632	<i>Yersinia pestis</i> strain CO-92 chrom 4 (304 res).
Seq 0005 : >03_HAELN_DDL P44405	<i>Haemophilus influenzae</i> (306 res).
Seq 0006 : >04_HAEDUC_DDL HTSC_730	<i>Haemophilus ducreyi</i> strain 35000HP (297 res).
Seq 0007 : >05_PSEUDA_DDL 11348402	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> strain PAO1 (319 res).
Seq 0008 : >06_PSEUPUT_DDL TIGR	<i>Pseudomonas putida</i> KT2440 (292 res).

Seq 0009 : >07_XYLFAS_DDL 11272188	<i>Xylella fastidiosa</i> strain 9a5c (320 res).
Seq 0010 : >08_BORPER_DDL Sanger_520	<i>Bordetella pertussis</i> Contig845 (296 res).
Seq 0011 : >09_THIFER_DDL TIGR_6140	<i>Thiobacillus ferrooxidans</i> (296 res).
Seq 0012 : >10_NEISMNA_DDL 11272192	<i>Neisseria meningitidis</i> group A strain Z2491 (304 res).
Seq 0013 : >11_NEISMNB_DDL 11272194	<i>Neisseria meningitidis</i> group B strain MD58 (304 res).
Seq 0014 : >12_NEISGON_DDL OUACGT_485	<i>Neisseria gonorrhoeae</i> Ngon_Contigl (296 res).
Seq 0015 : >13_BUCAP_DDL 051927	<i>Buchnera aphidicola</i> (306 res).
Seq 0016 : >14_BACHAL_DDL 10174238	<i>Bacillus halodurans</i> (305 res).
Seq 0017 : >15_GEOSUL_DDL TIGR_35554	<i>Geobacter sulfurreducens</i> gsulf_5 (299 res).
Seq 0018 : >16_RICPR_DDL Q9ZDS6	<i>Rickettsia prowazekii</i> (321 res).
Seq 0019 : >17_ZYMOB_DDL 5834367	<i>Zymomonas mobilis</i> (321 res).
Seq 0020 : >18_AQUIAEO_DDL 066806	<i>Aquifex aeolicus thermophile</i> (291 res).
Seq 0021 : >19_THEMA_DDL P46805	<i>Thermotoga maritima</i> (303 res).
Seq 0022 : >20_CLOSDIF_DDL Sanger1496	<i>Clostridium difficile</i> Contig890 (294 res).
Seq 0023 : >21_ENTFCM_VANA P25051	<i>Enterococcus faecium</i> VanA (343 res).
Seq 0024 : >22_ENTFCM_VANB Q06893	<i>Enterococcus faecium</i> VanB (342 res).
Seq 0025 : >23_ENTFCM_VAND 5353567	<i>Enterococcus faecium</i> VanD (343 res).
Seq 0026 : >24_STRPTOY_DDL 2228595	<i>Streptomyces toyocaensis</i> (340 res).
Seq 0027 : >25_AMYCOR_DDL 4405962	<i>Amycolatopsis orientalis</i> (348 res).
Seq 0028 : >26_ENTGAL_VANC P29753	<i>Enterococcus gallinarum</i> (343 res).
Seq 0029 : >27_ENTHR_DDL Q47827	<i>Enterococcus hirae</i> (358 res).
Seq 0030 : >28_ENTFCM_DDL 12231521	<i>Enterococcus faecium</i> AAG49141.1 (358 res).
Seq 0031 : >29_ENTFCS_DDLF Q47758	<i>Enterococcus faecalis</i> DDL_f (348 res).
Seq 0032 : >30_STRPN_DDL 6634564	<i>Streptococcus pneumoniae</i> (347 res).
Seq 0033 : >31_STRPY_DDL OUACGT_1315	<i>Streptococcus pyogenes</i> Contig_1 (331 res).
Seq 0034 : >32_STAPHCOL_DDL TIGR_1280	<i>Staphylococcus aureus</i> COL Contig_8089 (338 res).
Seq 0035 : >33_STAPHMRSR_DDL Sanger	<i>Staphylococcus aureus</i> MRSA Contig_17 (338 res).
Seq 0036 : >34_BACSU_DDL P96612	<i>Bacillus subtilis</i> (354 res).
Seq 0037 : >35_BACSTER_DDL UOKR_1442	<i>Bacillus stearothermophilus</i> Contig_505 (345 res).
Seq 0038 : >36_DEIRAD_DDL 7471790	<i>Deinococcus radiodurans</i> strain R1 (339 res).
Seq 0039 : >37_SYNEC_DDL P73632	<i>Synechocystis</i> sp. strain PCC 6803 (354 res).
Seq 0040 : >38_ECOLI_DDLA P23844	<i>Escherichia coli</i> DDLA (364 res).
Seq 0041 : >39_SALTY_DDLA P15051	<i>Salmonella typhimurium</i> DDLA (363 res).
Seq 0042 : >40_MYCTUB_DDL P95114	<i>Mycobacterium tuberculosis</i> strain H37rv (373 res).
Seq 0043 : >41_MYCTUB_DDL CLIN TIGR	<i>Mycobacterium tuberculosis</i> CSU#93-clinical (373 res).
Seq 0044 : >42_MYCAV_DDL TIGR/NIADD	<i>Mycobacterium avium</i> strain 104 contig 5490 (364 res).
Seq 0045 : >43_MYCSMG_DDL Q9ZGNO	<i>Mycobacterium smegmatis</i> (373 res).
Seq 0046 : >44_LEGENU_DDL CUCGC_446	<i>Legionella pneumophila</i> (343 res).
Seq 0047 : >45_LEUCMES_DDL Q48745	<i>Leuconostoc mesenteroides</i> (377 res).
Seq 0048 : >46_BORBURG_DDL 051218	<i>Borrelia burgdorferi</i> strain B31 (356 res).
Seq 0049 : >47_TREPA_DDL 083676	<i>Treponema pallidum</i> (396 res).
Seq 0050 : >48_VIBCHO_DDL	<i>Vibrio cholerae</i> strain ASM893 (319 res).
Seq 0051 : >49_HELPYR_DDL P56191	<i>Helicobacter pylori</i> (347 res).

Други изпълнения

Трябва да се подразбира, че изобретението е описано подробно по-горе с цел илюстриране, а не да се ограничи обхвата му, който се дефинира от приложените претенции. Други аспекти, предимства и модификации са в обхвата на следващите претенции.

Патентни претенции

1. Метод за оценяване потенциала на химическа единица да се асоциира с молекула или молекулен комплекс включващ свързващ джоб дефиниран чрез структурни координати на D-Ala-D-Ala лигаза E. coli аминокиселини Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270, дъгласно фигура 8 или от хомолог на тази молекулаили молекулен комплекс, където този хомолог включва свързващ джоб, който има корен от средно квадратно отклонение от атоми на основната верига на тези аминокиселини не повече от 10\AA включващ етапите на:

използване на компютърни средства за провеждане на напасваща операция между химическата единица и свързващ джоб определен чрез структурни координати D-Ala-D-Ala лигаза E. coli аминокиселини Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270, +/- корен от средно квадратно отклонение от атоми на основната верига на тези аминокиселини не повече от 10\AA и

анализиране на резултатите от тази напасваща операция за количественото определяне на свързването между химическата единица и свързващия джоб.

2. Метод за идентифициране на потенциален инхибитор D-Ala-D-Ala лигаза, характеризиращ се с това, че включва

използване на атомни координати на Lys144, Glu180, Lys181, Leu183, Glu187, Asp257 и Glu270 на E. coli D-Ala-D-Ala лигаза съгласно фигура 8 +/- корен от средно квадратно отклонение от атоми на основната верига на тези аминокиселини не повече от 10\AA , за да се получи трипространствена структура на D-Ala-D-Ala лигазния свързващ джоб;

използване на тази трипространствена структура за проектиране или подбиране на потенциалния инхибитор;

синтезиране или получаване на инхибитора и
контактуване на инхибитора с D-Ala-D-Ala лигаза за определяне на
способността на този потенциален инхибитор да инхибира D-Ala-D-Ala.

3. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че
използвания етап включва проектиране на молекула, която, ако се вмъкне в
трипространствената структура, има водороден свързващ донор между 2.4 и
3.5 Å от единия или двата карбоксилни кислородни атоми на Glu180
страничната верига, водороден свързващ донор между 2.4 и 3.5 Å от
амидния кислород на основната верига на Lys181, водороден свързващ
донор между 2.4 и 3.5 Å от амиден азот на основната верига на Leu183 и
водороден свързващ акцептор между 2.4 и 3.5 Å от азотен атом на
страничната верига на Lys144.

4. Метод съгласно претенция 3, характеризиращ се с това, че
молекулата включва още хидрофобни взаимодействия 3.5 – 4.5 Å от CD1
въглеродния и SD серни атоми на страничната верига на Leu269 и съответно
на Met 154.

5. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че
потенциалния инхибитор е бисубстратен аналог.

6. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че включва
освен това определяне на K_i на потенциалния инхибитор за лигазата при
използване на ензимно изпитание.

7. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че включва
освен това проследяване на взаимодействията между потенциалния
инхибитор и лигазата при използване на спряни поточни изследвания.

8. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че включва освен това проследяване на взаимодействията между потенциалния инхибитор и лигазата чрез измерване на потискане на лигазната присъща триптофанова флуоресценция.

9. Метод съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че включва проследяване на взаимодействията между потенциалния инхибитор и лигазата чрез измерване предотвратяването на протеолиза на лигазата, това предотвратяване е корелирано със стабилизиране на лигазата от потенциалния инхибитор.

10. Методът съгласно претенция 2, характеризиращ се с това, че включва освен това определяне на ефекта на потенциалния инхибитор върху бактериалния растеж на див-тип по отношение на D-Ala-D-Ala лигаза-свърхекспресиращи щамове.

11. Метод за идентифициране на потенциален инхибитор на D-Ala-D-Ala лигаза или нейн хомолог, характеризиращ се с това че включва:

проектиране или подбиране на молекула, която води до Ile142 на D-Ala-D-Ala лигаза или нейна противочаст в хомолог, който се довежда до 12 Å на Met259 на D-Ala-D-Ala лигаза или нейна противочаст в хомолог, и Met154 на D-Ala-D-Ala лигаза или нейна противочаст в хомолог се довежда до 12 Å на Leu269;

синтезиране или получаване на този инхибитор и

контактуване на този инхибитор с D-Ala-D-Ala лигаза за да се определи способността на този потенциален инхибитор да инхибира D-Ala-D-Ala.

12. Метод съгласно претенция 11, характеризиращ се с това, че включва освен това определяне на K_i на потенциалния инхибитор за лигазата при използване на ензимно изпитание.

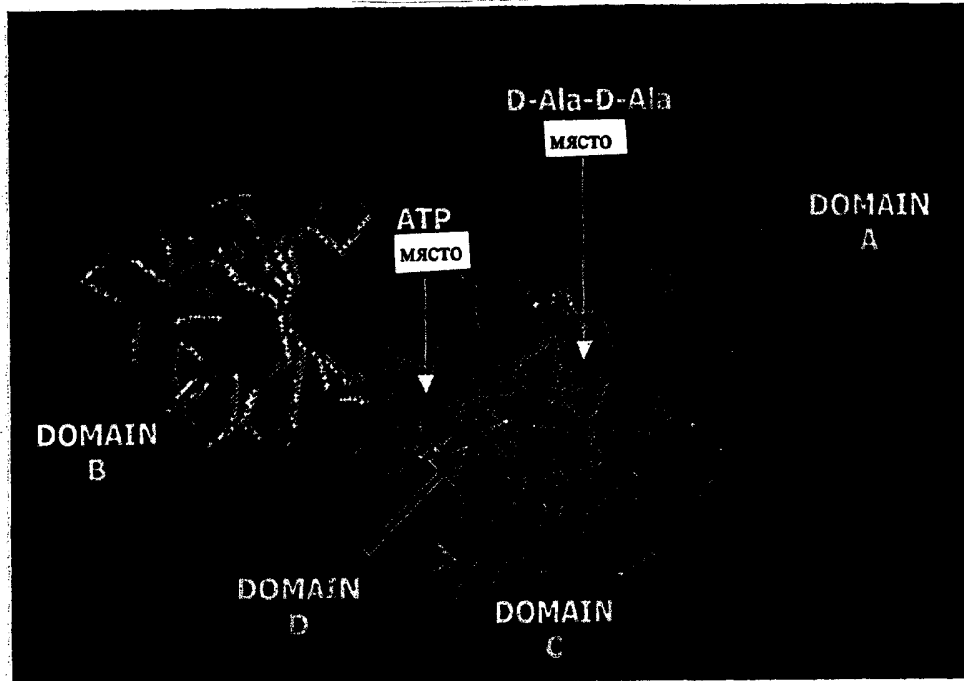
13. Метод съгласно претенция 11, характеризиращ се с това, че включва освен това проследяване на взаимодействията между потенциалния инхибитор и лигазата при използване на спряни поточни изследвания.

14. Метод съгласно претенция 11, характеризиращ се с това, че включва освен това проследяване на взаимодействията между потенциалния инхибитор и лигазата чрез измерване на потискането на лигазната присъща триптофанова флуоресценция.

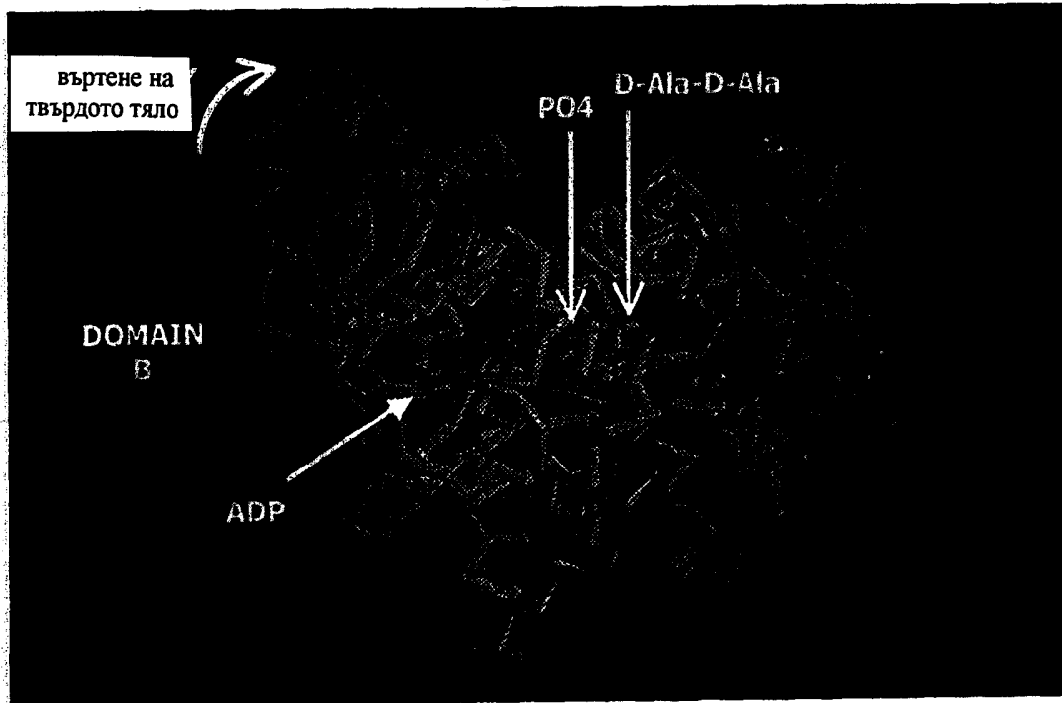
15. Методът съгласно претенция 11, характеризиращ се с това, че включва проследяване на взаимодействията между потенциалния инхибитор и лигазата чрез измерване предотвратяването на протеолиза на лигазата, това предотвратяване е корелирано със стабилизиране на лигазата от потенциалния инхибитор.

16. Методът съгласно претенция 11, характеризиращ се с това, че включва освен това определяне на ефекта на потенциалния инхибитор върху бактериалния растеж на див-тип по отношение на D-Ala-D-Ala лигаза-свъръхекспресиращи щамове.

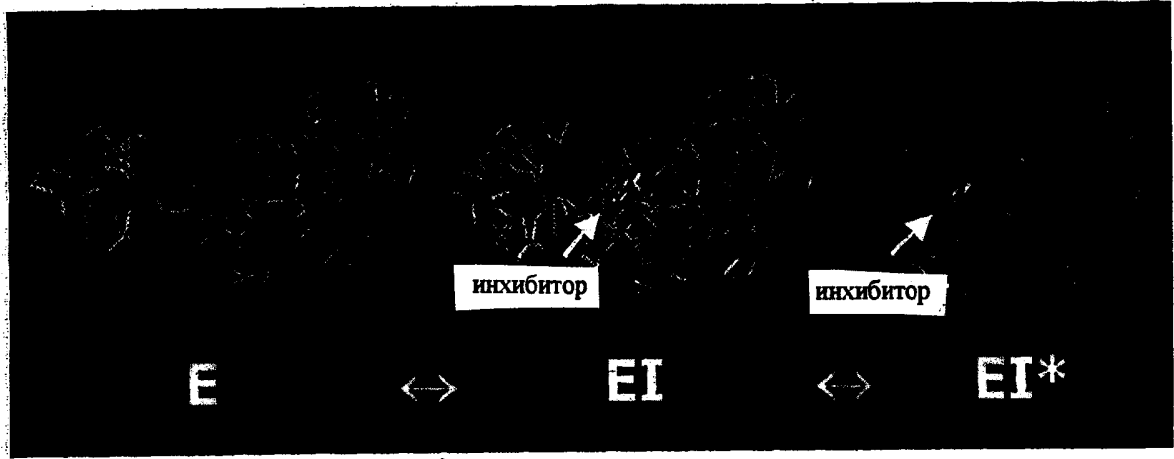
Фигура 1



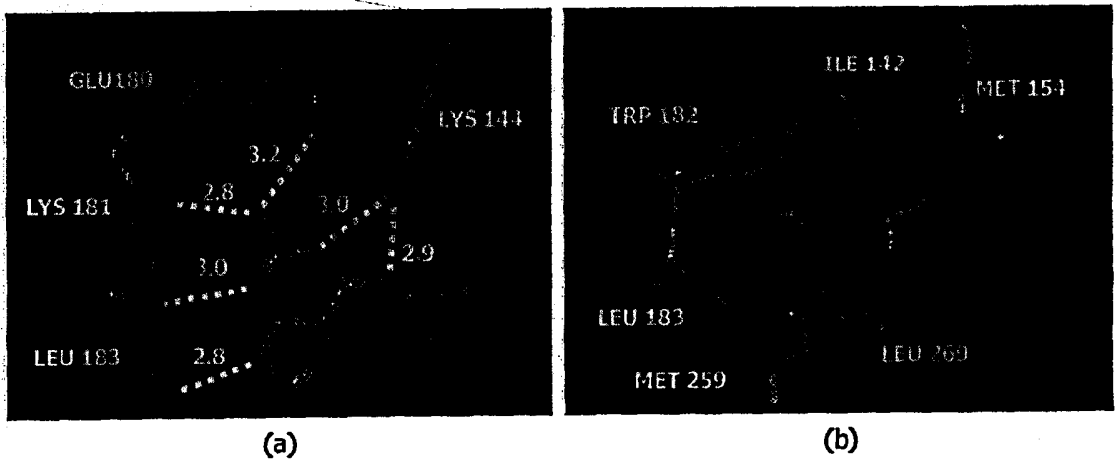
Фигура 2



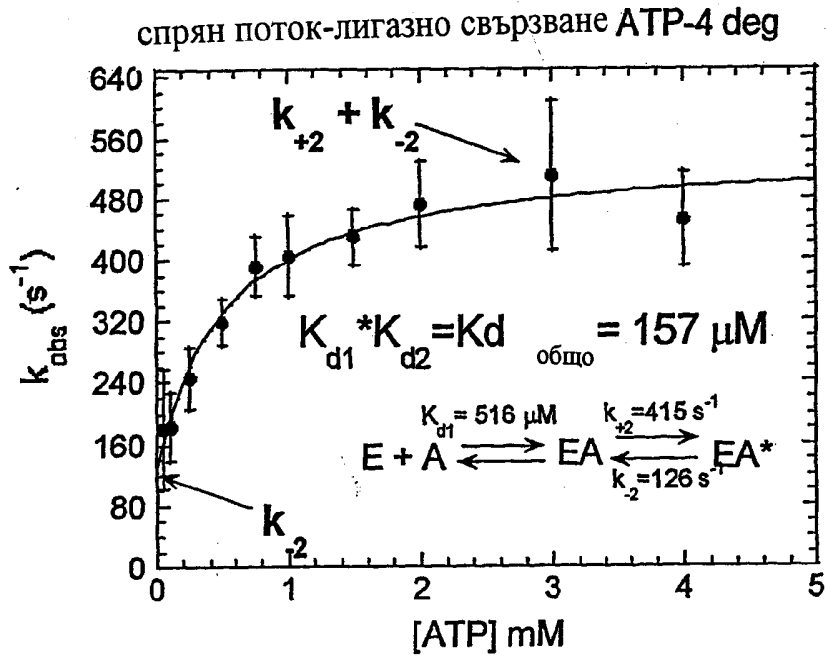
Фигура 3



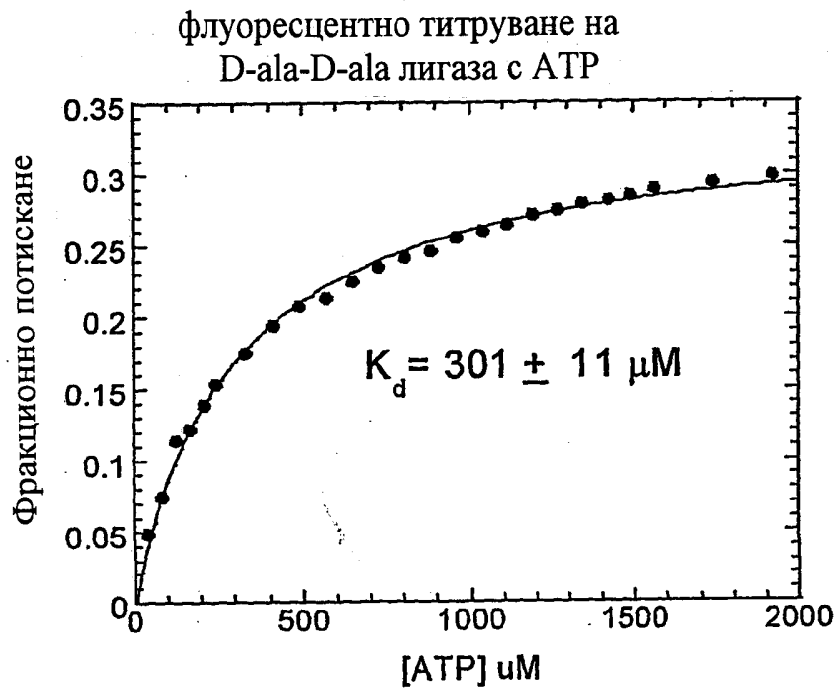
Фигура 4



Фигура 5



Фигура 6



Фигура 7

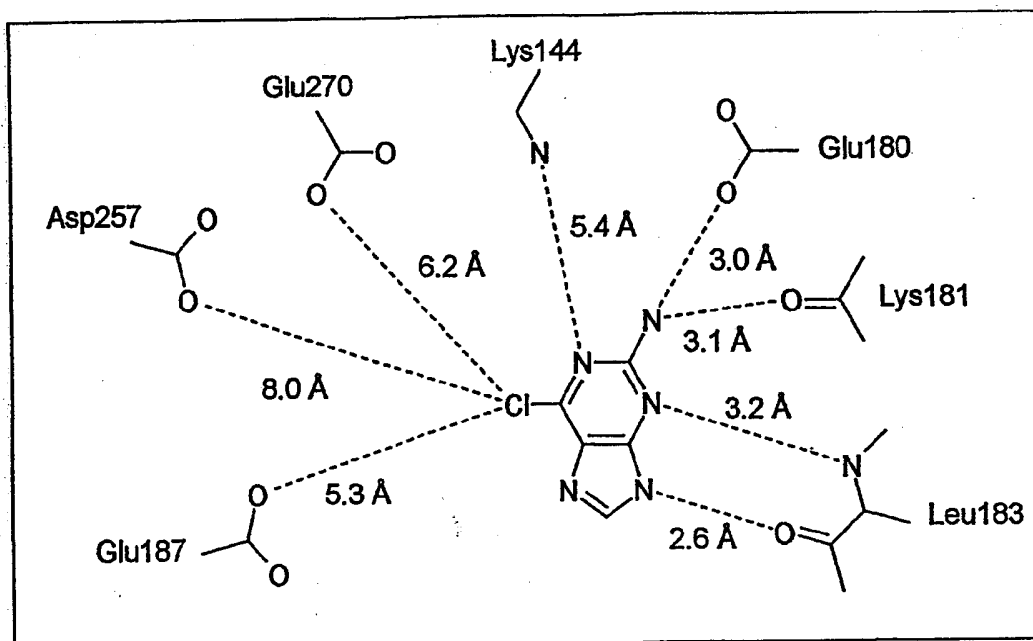


FIG. 8

REMARK	FILENAME	Ligase	complexed with ADP, inorganic phosphate, and D-Ala-D-Ala							
ATOM	1	N	MET	3	40.614	1.843	46.187	1.00	31.14	A
ATOM	2	CA	MET	3	39.530	2.279	45.303	1.00	30.31	A
ATOM	3	CB	MET	3	38.402	1.236	45.434	1.00	32.61	A
ATOM	4	CG	MET	3	37.231	1.360	44.443	1.00	36.22	A
ATOM	5	SD	MET	3	35.813	0.297	44.869	1.00	40.71	A
ATOM	6	CE	MET	3	34.748	0.742	43.482	1.00	40.12	A
ATOM	7	C	MET	3	39.030	3.655	45.727	1.00	27.83	A
ATOM	8	O	MET	3	37.905	3.782	46.154	1.00	27.65	A
ATOM	9	N	LYS	4	39.879	4.695	45.616	1.00	25.11	A
ATOM	10	CA	LYS	4	39.368	5.953	46.170	1.00	22.16	A
ATOM	11	CB	LYS	4	40.479	6.666	46.917	1.00	22.93	A
ATOM	12	CG	LYS	4	39.889	7.749	47.793	1.00	22.85	A
ATOM	13	CD	LYS	4	40.828	8.447	48.752	1.00	26.08	A
ATOM	14	CE	LYS	4	41.738	9.484	48.117	1.00	25.83	A
ATOM	15	NZ	LYS	4	42.194	10.361	49.215	1.00	27.77	A
ATOM	16	C	LYS	4	38.751	6.829	45.089	1.00	20.28	A
ATOM	17	O	LYS	4	39.380	7.119	44.082	1.00	18.39	A
ATOM	18	N	ILE	5	37.470	7.185	45.345	1.00	17.69	A
ATOM	19	CA	ILE	5	36.646	7.883	44.345	1.00	16.49	A
ATOM	20	CB	ILE	5	35.258	7.246	44.318	1.00	16.05	A
ATOM	21	CG2	ILE	5	34.230	7.963	43.397	1.00	16.67	A
ATOM	22	CG1	ILE	5	35.287	5.750	44.077	1.00	16.48	A
ATOM	23	CD1	ILE	5	36.144	5.237	42.900	1.00	17.07	A
ATOM	24	C	ILE	5	36.404	9.310	44.730	1.00	15.41	A
ATOM	25	O	ILE	5	36.021	9.608	45.847	1.00	16.47	A
ATOM	26	N	ALA	6	36.604	10.183	43.749	1.00	14.28	A
ATOM	27	CA	ALA	6	36.260	11.583	43.962	1.00	13.31	A
ATOM	28	CB	ALA	6	37.280	12.487	43.269	1.00	10.75	A
ATOM	29	C	ALA	6	34.891	11.805	43.350	1.00	13.36	A
ATOM	30	O	ALA	6	34.639	11.454	42.211	1.00	13.10	A
ATOM	31	N	VAL	7	33.985	12.372	44.185	1.00	11.47	A
ATOM	32	CA	VAL	7	32.706	12.875	43.680	1.00	11.88	A
ATOM	33	CB	VAL	7	31.544	12.553	44.715	1.00	10.72	A
ATOM	34	CG1	VAL	7	30.177	13.154	44.294	1.00	11.14	A
ATOM	35	CG2	VAL	7	31.528	11.052	44.859	1.00	10.42	A
ATOM	36	C	VAL	7	32.819	14.369	43.511	1.00	11.77	A
ATOM	37	O	VAL	7	32.892	15.190	44.416	1.00	11.03	A
ATOM	38	N	LEU	8	32.942	14.763	42.241	1.00	12.40	A
ATOM	39	CA	LEU	8	33.128	16.176	41.990	1.00	11.47	A
ATOM	40	CB	LEU	8	33.719	16.314	40.577	1.00	13.56	A
ATOM	41	CG	LEU	8	35.147	15.802	40.450	1.00	11.44	A
ATOM	42	CD1	LEU	8	35.648	16.176	39.035	1.00	13.68	A
ATOM	43	CD2	LEU	8	36.073	16.351	41.530	1.00	13.86	A
ATOM	44	C	LEU	8	31.782	16.875	41.968	1.00	12.25	A
ATOM	45	O	LEU	8	30.830	16.460	41.342	1.00	11.39	A
ATOM	46	N	LEU	9	31.741	17.920	42.760	1.00	12.03	A
ATOM	47	CA	LEU	9	30.440	18.559	43.015	1.00	12.51	A
ATOM	48	CB	LEU	9	29.644	17.968	44.191	1.00	13.69	A
ATOM	49	CG	LEU	9	30.203	17.702	45.604	1.00	16.20	A
ATOM	50	CD1	LEU	9	31.474	18.399	46.047	1.00	15.38	A
ATOM	51	CD2	LEU	9	29.085	17.653	46.680	1.00	15.57	A
ATOM	52	C	LEU	9	30.656	20.004	43.309	1.00	12.18	A
ATOM	53	O	LEU	9	31.723	20.438	43.677	1.00	13.52	A
ATOM	54	N	GLY	10	29.569	20.748	43.150	1.00	12.43	A
ATOM	55	CA	GLY	10	29.747	22.184	43.341	1.00	13.65	A
ATOM	56	C	GLY	10	30.186	22.926	42.091	1.00	13.32	A
ATOM	57	O	GLY	10	29.410	23.196	41.175	1.00	12.36	A
ATOM	58	N	GLY	11	31.471	23.255	42.082	1.00	14.38	A

ATOM	59	CA	GLY	11	31.944	24.005	40.898	1.00	16.88	A
ATOM	60	C	GLY	11	31.418	25.412	40.876	1.00	18.58	A
ATOM	61	O	GLY	11	31.001	25.986	41.890	1.00	19.19	A
ATOM	62	N	THR	12	31.454	25.992	39.660	1.00	19.97	A
ATOM	63	CA	THR	12	31.250	27.444	39.644	1.00	21.16	A
ATOM	64	CB	THR	12	32.566	28.135	39.288	1.00	22.23	A
ATOM	65	OG1	THR	12	33.025	27.615	38.043	1.00	24.49	A
ATOM	66	CG2	THR	12	33.633	27.977	40.361	1.00	22.29	A
ATOM	67	C	THR	12	30.187	27.970	38.703	1.00	21.94	A
ATOM	68	O	THR	12	30.052	29.167	38.483	1.00	24.09	A
ATOM	69	N	SER	13	29.453	27.064	38.111	1.00	21.16	A
ATOM	70	CA	SER	13	28.347	27.526	37.261	1.00	20.11	A
ATOM	71	CB	SER	13	28.008	26.382	36.317	1.00	21.53	A
ATOM	72	OG	SER	13	27.373	25.376	37.097	1.00	20.96	A
ATOM	73	C	SER	13	27.075	28.013	37.955	1.00	19.14	A
ATOM	74	O	SER	13	26.915	27.956	39.155	1.00	18.35	A
ATOM	75	N	ALA	14	26.115	28.419	37.107	1.00	18.27	A
ATOM	76	CA	ALA	14	24.770	28.758	37.549	1.00	17.14	A
ATOM	77	CB	ALA	14	23.979	29.333	36.353	1.00	17.20	A
ATOM	78	C	ALA	14	23.979	27.630	38.202	1.00	16.71	A
ATOM	79	O	ALA	14	22.935	27.837	38.790	1.00	16.75	A
ATOM	80	N	GLU	15	24.531	26.413	38.079	1.00	15.19	A
ATOM	81	CA	GLU	15	23.875	25.266	38.696	1.00	14.67	A
ATOM	82	CB	GLU	15	23.671	24.184	37.623	1.00	12.42	A
ATOM	83	CG	GLU	15	22.964	24.650	36.321	1.00	12.61	A
ATOM	84	CD	GLU	15	22.875	23.515	35.307	1.00	12.97	A
ATOM	85	OE1	GLU	15	21.920	22.726	35.350	1.00	10.47	A
ATOM	86	OE2	GLU	15	23.737	23.429	34.409	1.00	12.35	A
ATOM	87	C	GLU	15	24.637	24.707	39.876	1.00	14.00	A
ATOM	88	O	GLU	15	24.392	23.603	40.328	1.00	15.09	A
ATOM	89	N	ARG	16	25.554	25.564	40.391	1.00	13.38	A
ATOM	90	CA	ARG	16	26.313	25.129	41.557	1.00	12.44	A
ATOM	91	CB	ARG	16	27.192	26.279	42.082	1.00	14.01	A
ATOM	92	CG	ARG	16	27.842	25.927	43.426	1.00	12.18	A
ATOM	93	CD	ARG	16	28.683	27.113	43.902	1.00	13.55	A
ATOM	94	NE	ARG	16	29.173	26.886	45.272	1.00	13.80	A
ATOM	95	CZ	ARG	16	30.144	26.035	45.584	1.00	14.71	A
ATOM	96	NH1	ARG	16	30.824	25.361	44.656	1.00	14.15	A
ATOM	97	NH2	ARG	16	30.465	25.855	46.872	1.00	14.78	A
ATOM	98	C	ARG	16	25.449	24.634	42.690	1.00	11.88	A
ATOM	99	O	ARG	16	25.773	23.604	43.255	1.00	11.63	A
ATOM	100	N	GLU	17	24.399	25.417	43.020	1.00	13.17	A
ATOM	101	CA	GLU	17	23.642	24.957	44.217	1.00	14.89	A
ATOM	102	CB	GLU	17	22.659	26.055	44.654	1.00	17.44	A
ATOM	103	CG	GLU	17	21.826	25.637	45.901	1.00	24.63	A
ATOM	104	CD	GLU	17	22.618	25.314	47.173	1.00	27.52	A
ATOM	105	OE1	GLU	17	22.488	24.197	47.702	1.00	29.35	A
ATOM	106	OE2	GLU	17	23.328	26.191	47.673	1.00	30.71	A
ATOM	107	C	GLU	17	22.930	23.599	44.028	1.00	13.71	A
ATOM	108	O	GLU	17	22.810	22.755	44.917	1.00	13.98	A
ATOM	109	N	VAL	18	22.495	23.395	42.763	1.00	13.20	A
ATOM	110	CA	VAL	18	21.964	22.088	42.432	1.00	11.66	A
ATOM	111	CB	VAL	18	21.344	22.086	41.019	1.00	11.19	A
ATOM	112	CG1	VAL	18	20.683	20.757	40.672	1.00	10.47	A
ATOM	113	CG2	VAL	18	20.541	23.363	40.715	1.00	13.56	A
ATOM	114	C	VAL	18	22.985	20.979	42.563	1.00	10.75	A
ATOM	115	O	VAL	18	22.745	19.939	43.143	1.00	8.59	A
ATOM	116	N	SER	19	24.168	21.259	42.036	1.00	10.58	A
ATOM	117	CA	SER	19	25.275	20.320	42.013	1.00	10.79	A
ATOM	118	CB	SER	19	26.466	20.874	41.199	1.00	11.41	A
ATOM	119	OG	SER	19	27.554	19.935	41.340	1.00	10.67	A

ATOM	120	C	SER	19	25.744	19.966	43.388	1.00	11.20	A
ATOM	121	O	SER	19	26.038	18.819	43.668	1.00	12.04	A
ATOM	122	N	LEU	20	25.765	20.944	44.265	1.00	10.85	A
ATOM	123	CA	LEU	20	26.084	20.596	45.655	1.00	12.64	A
ATOM	124	CB	LEU	20	26.047	21.870	46.532	1.00	11.34	A
ATOM	125	CG	LEU	20	27.121	22.899	46.216	1.00	12.99	A
ATOM	126	CD1	LEU	20	26.876	24.206	46.991	1.00	15.05	A
ATOM	127	CD2	LEU	20	28.511	22.362	46.655	1.00	11.77	A
ATOM	128	C	LEU	20	25.098	19.580	46.259	1.00	12.53	A
ATOM	129	O	LEU	20	25.472	18.665	46.973	1.00	11.10	A
ATOM	130	N	ASN	21	23.804	19.835	45.989	1.00	12.86	A
ATOM	131	CA	ASN	21	22.836	18.802	46.382	1.00	13.80	A
ATOM	132	CB	ASN	21	21.401	19.389	46.269	1.00	15.57	A
ATOM	133	CG	ASN	21	20.993	20.094	47.561	1.00	17.41	A
ATOM	134	OD1	ASN	21	21.713	20.210	48.538	1.00	19.28	A
ATOM	135	ND2	ASN	21	19.758	20.571	47.512	1.00	19.73	A
ATOM	136	C	ASN	21	22.898	17.488	45.629	1.00	11.27	A
ATOM	137	O	ASN	21	22.747	16.420	46.204	1.00	12.23	A
ATOM	138	N	SER	22	23.211	17.547	44.336	1.00	12.02	A
ATOM	139	CA	SER	22	23.423	16.272	43.625	1.00	11.63	A
ATOM	140	CB	SER	22	23.697	16.524	42.130	1.00	11.03	A
ATOM	141	OG	SER	22	22.584	17.160	41.519	1.00	13.21	A
ATOM	142	C	SER	22	24.587	15.461	44.173	1.00	10.44	A
ATOM	143	O	SER	22	24.499	14.275	44.389	1.00	9.58	A
ATOM	144	N	GLY	23	25.644	16.165	44.420	1.00	10.43	A
ATOM	145	CA	GLY	23	26.890	15.532	44.901	1.00	12.61	A
ATOM	146	C	GLY	23	26.718	14.924	46.273	1.00	14.23	A
ATOM	147	O	GLY	23	27.168	13.851	46.609	1.00	13.89	A
ATOM	148	N	ALA	24	25.971	15.691	47.078	1.00	14.80	A
ATOM	149	CA	ALA	24	25.719	15.164	46.431	1.00	16.16	A
ATOM	150	CB	ALA	24	24.898	16.185	49.236	1.00	16.23	A
ATOM	151	C	ALA	24	24.962	13.879	48.375	1.00	14.75	A
ATOM	152	O	ALA	24	25.261	12.905	49.048	1.00	15.21	A
ATOM	153	N	ALA	25	23.933	13.888	47.542	1.00	14.18	A
ATOM	154	CA	ALA	25	23.212	12.649	47.368	1.00	14.47	A
ATOM	155	CB	ALA	25	21.891	12.919	46.615	1.00	13.85	A
ATOM	156	C	ALA	25	23.981	11.486	46.728	1.00	13.96	A
ATOM	157	O	ALA	25	23.893	10.372	47.211	1.00	14.09	A
ATOM	158	N	VAL	26	24.786	11.785	45.688	1.00	14.50	A
ATOM	159	CA	VAL	26	25.619	10.715	45.118	1.00	14.04	A
ATOM	160	CB	VAL	26	26.426	11.288	43.929	1.00	12.76	A
ATOM	161	CG1	VAL	26	27.360	10.250	43.343	1.00	11.66	A
ATOM	162	CG2	VAL	26	25.459	11.745	42.839	1.00	14.86	A
ATOM	163	C	VAL	26	26.569	10.152	46.173	1.00	14.61	A
ATOM	164	O	VAL	26	26.803	8.963	46.246	1.00	15.60	A
ATOM	165	N	LEU	27	27.108	11.059	47.007	1.00	16.23	A
ATOM	166	CA	LEU	27	28.152	10.618	47.946	1.00	16.65	A
ATOM	167	CB	LEU	27	28.658	11.815	48.709	1.00	19.46	A
ATOM	168	CG	LEU	27	29.851	12.382	48.008	1.00	20.70	A
ATOM	169	CD1	LEU	27	30.100	13.784	48.505	1.00	20.19	A
ATOM	170	CD2	LEU	27	31.067	11.461	48.321	1.00	21.75	A
ATOM	171	C	LEU	27	27.584	9.660	48.938	1.00	16.88	A
ATOM	172	O	LEU	27	28.091	8.580	49.166	1.00	15.53	A
ATOM	173	N	ALA	28	26.433	10.091	49.462	1.00	17.85	A
ATOM	174	CA	ALA	28	25.704	9.154	50.318	1.00	19.06	A
ATOM	175	CB	ALA	28	24.443	9.849	50.899	1.00	19.29	A
ATOM	176	C	ALA	28	25.424	7.816	49.681	1.00	18.74	A
ATOM	177	O	ALA	28	25.680	6.766	50.246	1.00	20.37	A
ATOM	178	N	GLY	29	24.983	7.857	48.422	1.00	17.66	A
ATOM	179	CA	GLY	29	24.637	6.635	47.714	1.00	17.77	A
ATOM	180	C	GLY	29	25.820	5.728	47.459	1.00	18.20	A

ATOM	181	O	GLY	29	25.779	4.523	47.627	1.00	19.53	A
ATOM	182	N	LEU	30	26.912	6.376	47.057	1.00	18.53	A
ATOM	183	CA	LEU	30	28.145	5.595	46.845	1.00	17.45	A
ATOM	184	CB	LEU	30	29.242	6.508	46.308	1.00	17.61	A
ATOM	185	CG	LEU	30	28.985	6.930	44.826	1.00	17.12	A
ATOM	186	CD1	LEU	30	30.107	7.822	44.380	1.00	16.74	A
ATOM	187	CD2	LEU	30	28.910	5.745	43.870	1.00	17.64	A
ATOM	188	C	LEU	30	28.641	4.964	48.140	1.00	17.34	A
ATOM	189	O	LEU	30	29.042	3.817	48.146	1.00	15.50	A
ATOM	190	N	ARG	31	28.590	5.759	49.206	1.00	17.50	A
ATOM	191	CA	ARG	31	29.135	5.273	50.479	1.00	19.60	A
ATOM	192	CB	ARG	31	29.207	6.385	51.485	1.00	19.74	A
ATOM	193	CG	ARG	31	30.204	7.463	51.142	1.00	19.78	A
ATOM	194	CD	ARG	31	30.408	8.406	52.310	1.00	22.08	A
ATOM	195	NE	ARG	31	31.298	9.478	51.897	1.00	23.07	A
ATOM	196	CZ	ARG	31	32.084	10.194	52.670	1.00	26.32	A
ATOM	197	NH1	ARG	31	32.385	9.820	53.920	1.00	28.40	A
ATOM	198	NH2	ARG	31	32.602	11.306	52.157	1.00	26.01	A
ATOM	199	C	ARG	31	28.300	4.179	51.070	1.00	21.00	A
ATOM	200	O	ARG	31	28.780	3.209	51.622	1.00	20.28	A
ATOM	201	N	GLU	32	26.976	4.333	50.844	1.00	22.57	A
ATOM	202	CA	GLU	32	26.057	3.308	51.297	1.00	24.52	A
ATOM	203	CB	GLU	32	24.641	3.895	51.221	1.00	26.01	A
ATOM	204	CG	GLU	32	23.515	3.096	51.888	1.00	30.47	A
ATOM	205	CD	GLU	32	22.255	3.967	51.970	1.00	31.99	A
ATOM	206	OE1	GLU	32	21.241	3.598	51.371	1.00	32.68	A
ATOM	207	OE2	GLU	32	22.288	5.021	52.631	1.00	34.14	A
ATOM	208	C	GLU	32	26.209	2.058	50.480	1.00	24.48	A
ATOM	209	O	GLU	32	25.932	0.947	50.905	1.00	24.39	A
ATOM	210	N	GLY	33	26.769	2.283	49.263	1.00	25.01	A
ATOM	211	CA	GLY	33	27.161	1.126	48.493	1.00	24.89	A
ATOM	212	C	GLY	33	28.600	0.681	48.705	1.00	25.05	A
ATOM	213	O	GLY	33	29.112	-0.068	47.904	1.00	25.73	A
ATOM	214	N	GLY	34	29.215	1.162	49.784	1.00	24.65	A
ATOM	215	CA	GLY	34	30.554	0.652	50.140	1.00	25.11	A
ATOM	216	C	GLY	34	31.696	1.134	49.259	1.00	24.82	A
ATOM	217	O	GLY	34	32.784	0.554	49.170	1.00	24.23	A
ATOM	218	N	ILE	35	31.377	2.242	48.593	1.00	23.14	A
ATOM	219	CA	ILE	35	32.392	2.860	47.755	1.00	21.75	A
ATOM	220	CB	ILE	35	31.702	3.528	46.551	1.00	22.55	A
ATOM	221	CG2	ILE	35	32.692	4.234	45.641	1.00	21.87	A
ATOM	222	CG1	ILE	35	30.798	2.592	45.745	1.00	22.22	A
ATOM	223	CD1	ILE	35	31.389	1.343	45.112	1.00	23.40	A
ATOM	224	C	ILE	35	33.139	3.866	48.595	1.00	21.65	A
ATOM	225	O	ILE	35	32.606	4.596	49.403	1.00	21.42	A
ATOM	226	N	ASP	36	34.448	3.882	48.398	1.00	21.16	A
ATOM	227	CA	ASP	36	35.254	4.790	49.214	1.00	20.27	A
ATOM	228	CB	ASP	36	36.672	4.187	49.175	1.00	24.84	A
ATOM	229	CG	ASP	36	37.217	4.218	50.553	1.00	28.60	A
ATOM	230	OD1	ASP	36	37.374	3.125	51.114	1.00	31.66	A
ATOM	231	OD2	ASP	36	37.457	5.318	51.061	1.00	29.52	A
ATOM	232	C	ASP	36	35.291	6.199	48.636	1.00	19.72	A
ATOM	233	O	ASP	36	36.232	6.604	47.970	1.00	18.27	A
ATOM	234	N	ALA	37	34.204	6.929	48.862	1.00	17.77	A
ATOM	235	CA	ALA	37	34.016	8.107	48.028	1.00	16.95	A
ATOM	236	CB	ALA	37	32.635	8.029	47.356	1.00	16.92	A
ATOM	237	C	ALA	37	34.169	9.341	48.862	1.00	17.36	A
ATOM	238	O	ALA	37	33.792	9.373	50.019	1.00	17.97	A
ATOM	239	N	TYR	38	34.722	10.363	48.252	1.00	16.60	A
ATOM	240	CA	TYR	38	34.908	11.680	48.889	1.00	17.08	A
ATOM	241	CB	TYR	38	36.392	11.952	49.245	1.00	17.27	A

10/90

ATOM	242	CG	TYR	38	36.844	10.870	50.204	1.00	18.54	A
ATOM	243	CD1	TYR	38	37.220	9.576	49.749	1.00	19.26	A
ATOM	244	CE1	TYR	38	37.549	8.582	50.700	1.00	20.39	A
ATOM	245	CD2	TYR	38	36.806	11.178	51.585	1.00	20.02	A
ATOM	246	CE2	TYR	38	37.153	10.190	52.522	1.00	21.24	A
ATOM	247	CZ	TYR	38	37.515	8.914	52.067	1.00	21.85	A
ATOM	248	OH	TYR	38	37.887	7.954	52.997	1.00	24.75	A
ATOM	249	C	TYR	38	34.505	12.836	47.994	1.00	17.10	A
ATOM	250	O	TYR	38	34.784	12.859	46.783	1.00	16.74	A
ATOM	251	N	PRO	39	33.901	13.855	48.607	1.00	16.36	A
ATOM	252	CD	PRO	39	33.510	14.024	50.018	1.00	17.87	A
ATOM	253	CA	PRO	39	33.613	15.050	47.802	1.00	16.54	A
ATOM	254	CB	PRO	39	32.696	15.898	48.693	1.00	17.60	A
ATOM	255	CG	PRO	39	33.112	15.486	50.125	1.00	16.98	A
ATOM	256	C	PRO	39	34.855	15.834	47.438	1.00	15.77	A
ATOM	257	O	PRO	39	35.805	15.954	48.201	1.00	16.80	A
ATOM	258	N	VAL	40	34.811	16.366	46.223	1.00	13.95	A
ATOM	259	CA	VAL	40	35.813	17.370	45.892	1.00	14.15	A
ATOM	260	CB	VAL	40	36.962	16.743	45.058	1.00	13.77	A
ATOM	261	CG1	VAL	40	37.919	17.822	44.590	1.00	15.60	A
ATOM	262	CG2	VAL	40	37.798	15.686	45.762	1.00	15.12	A
ATOM	263	C	VAL	40	35.097	18.414	45.090	1.00	13.65	A
ATOM	264	O	VAL	40	34.503	18.134	44.040	1.00	15.25	A
ATOM	265	N	ASP	41	35.168	19.627	45.629	1.00	12.76	A
ATOM	266	CA	ASP	41	34.563	20.682	44.862	1.00	13.24	A
ATOM	267	CB	ASP	41	33.822	21.528	45.910	1.00	16.20	A
ATOM	268	CG	ASP	41	33.078	22.746	45.402	1.00	16.99	A
ATOM	269	OD1	ASP	41	33.296	23.196	44.286	1.00	15.94	A
ATOM	270	OD2	ASP	41	32.236	23.254	46.147	1.00	18.10	A
ATOM	271	C	ASP	41	35.654	21.457	44.183	1.00	14.03	A
ATOM	272	O	ASP	41	36.442	22.053	44.887	1.00	13.69	A
ATOM	273	N	PRO	42	35.643	21.473	42.845	1.00	15.65	A
ATOM	274	CD	PRO	42	34.720	20.739	41.982	1.00	16.41	A
ATOM	275	CA	PRO	42	36.610	22.242	42.072	1.00	16.49	A
ATOM	276	CB	PRO	42	36.057	22.254	40.666	1.00	17.69	A
ATOM	277	CG	PRO	42	35.241	21.019	40.557	1.00	17.19	A
ATOM	278	C	PRO	42	36.742	23.668	42.407	1.00	17.47	A
ATOM	279	O	PRO	42	37.747	24.248	42.049	1.00	18.96	A
ATOM	280	N	LYS	43	35.701	24.237	43.053	1.00	17.23	A
ATOM	281	CA	LYS	43	35.782	25.646	43.429	1.00	18.11	A
ATOM	282	CB	LYS	43	34.407	26.157	43.892	1.00	18.09	A
ATOM	283	CG	LYS	43	34.356	27.677	43.968	1.00	17.67	A
ATOM	284	CD	LYS	43	32.965	28.093	44.389	1.00	19.99	A
ATOM	285	CE	LYS	43	32.891	29.601	44.558	1.00	20.80	A
ATOM	286	NZ	LYS	43	31.475	29.960	44.714	1.00	23.11	A
ATOM	287	C	LYS	43	36.720	25.881	44.583	1.00	19.41	A
ATOM	288	O	LYS	43	37.190	26.989	44.775	1.00	19.98	A
ATOM	289	N	GLU	44	36.958	24.796	45.305	1.00	19.70	A
ATOM	290	CA	GLU	44	37.661	24.787	46.594	1.00	22.29	A
ATOM	291	CB	GLU	44	36.767	23.983	47.570	1.00	23.54	A
ATOM	292	CG	GLU	44	37.154	23.932	49.055	1.00	27.65	A
ATOM	293	CD	GLU	44	36.717	22.605	49.673	1.00	29.00	A
ATOM	294	OE1	GLU	44	35.508	22.344	49.796	1.00	26.10	A
ATOM	295	OE2	GLU	44	37.623	21.835	50.013	1.00	29.50	A
ATOM	296	C	GLU	44	38.996	24.094	46.465	1.00	22.58	A
ATOM	297	O	GLU	44	39.974	24.411	47.126	1.00	22.59	A
ATOM	298	N	VAL	45	38.989	23.090	45.591	1.00	20.58	A
ATOM	299	CA	VAL	45	40.247	22.407	45.383	1.00	22.17	A
ATOM	300	CB	VAL	45	40.380	21.095	46.219	1.00	22.98	A
ATOM	301	CG1	VAL	45	39.478	21.022	47.492	1.00	21.23	A
ATOM	302	CG2	VAL	45	40.466	19.818	45.406	1.00	23.55	A

11/90

ATOM	303	C	VAL	45	40.601	22.282	43.917	1.00	21.02	A
ATOM	304	O	VAL	45	39.782	22.167	43.030	1.00	20.88	A
ATOM	305	N	ASP	46	41.905	22.343	43.690	1.00	21.81	A
ATOM	306	CA	ASP	46	42.414	22.214	42.347	1.00	22.71	A
ATOM	307	CB	ASP	46	43.813	22.745	42.581	1.00	24.09	A
ATOM	308	CG	ASP	46	44.703	22.642	41.395	1.00	26.50	A
ATOM	309	OD1	ASP	46	44.231	22.234	40.331	1.00	26.34	A
ATOM	310	OD2	ASP	46	45.879	22.991	41.563	1.00	27.23	A
ATOM	311	C	ASP	46	42.309	20.794	41.783	1.00	21.96	A
ATOM	312	O	ASP	46	43.014	19.889	42.192	1.00	21.78	A
ATOM	313	N	VAL	47	41.374	20.622	40.818	1.00	21.63	A
ATOM	314	CA	VAL	47	41.083	19.242	40.429	1.00	20.92	A
ATOM	315	CB	VAL	47	39.745	19.204	39.668	1.00	21.93	A
ATOM	316	CG1	VAL	47	39.780	19.880	38.302	1.00	22.17	A
ATOM	317	CG2	VAL	47	39.185	17.813	39.536	1.00	24.11	A
ATOM	318	C	VAL	47	42.184	18.593	39.587	1.00	21.08	A
ATOM	319	O	VAL	47	42.210	17.406	39.336	1.00	20.00	A
ATOM	320	N	THR	48	43.132	19.439	39.172	1.00	21.11	A
ATOM	321	CA	THR	48	44.343	18.944	38.520	1.00	20.91	A
ATOM	322	CB	THR	48	44.992	20.241	38.025	1.00	22.44	A
ATOM	323	OG1	THR	48	45.026	20.312	36.602	1.00	23.55	A
ATOM	324	CG2	THR	48	46.242	20.688	38.754	1.00	20.34	A
ATOM	325	C	THR	48	45.213	18.134	39.487	1.00	21.07	A
ATOM	326	O	THR	48	46.117	17.421	39.105	1.00	19.26	A
ATOM	327	N	GLN	49	44.868	18.271	40.783	1.00	21.15	A
ATOM	328	CA	GLN	49	45.549	17.466	41.785	1.00	21.95	A
ATOM	329	CB	GLN	49	45.768	18.305	43.044	1.00	23.69	A
ATOM	330	CG	GLN	49	46.588	19.576	42.847	1.00	26.85	A
ATOM	331	CD	GLN	49	47.873	19.244	42.126	1.00	27.52	A
ATOM	332	OE1	GLN	49	48.092	19.671	41.002	1.00	29.85	A
ATOM	333	NE2	GLN	49	48.709	18.463	42.785	1.00	29.73	A
ATOM	334	C	GLN	49	44.870	16.185	42.241	1.00	21.18	A
ATOM	335	O	GLN	49	45.204	15.668	43.289	1.00	20.76	A
ATOM	336	N	LEU	50	43.902	15.700	41.465	1.00	20.70	A
ATOM	337	CA	LEU	50	43.158	14.502	41.916	1.00	21.08	A
ATOM	338	CB	LEU	50	42.008	14.141	40.946	1.00	20.52	A
ATOM	339	CG	LEU	50	40.757	15.029	40.985	1.00	20.72	A
ATOM	340	CD1	LEU	50	39.715	14.412	40.069	1.00	20.50	A
ATOM	341	CD2	LEU	50	40.108	15.076	42.365	1.00	20.52	A
ATOM	342	C	LEU	50	43.995	13.263	42.079	1.00	22.68	A
ATOM	343	O	LEU	50	43.832	12.437	42.962	1.00	21.74	A
ATOM	344	N	LYS	51	44.937	13.147	41.140	1.00	23.06	A
ATOM	345	CA	LYS	51	45.734	11.942	41.210	1.00	24.75	A
ATOM	346	CB	LYS	51	46.372	11.877	39.845	1.00	25.38	A
ATOM	347	CG	LYS	51	46.282	10.502	39.267	1.00	27.22	A
ATOM	348	CD	LYS	51	47.562	9.731	39.535	1.00	28.43	A
ATOM	349	CE	LYS	51	47.832	8.720	38.420	1.00	29.07	A
ATOM	350	NZ	LYS	51	47.723	9.416	37.120	1.00	31.07	A
ATOM	351	C	LYS	51	46.712	11.939	42.391	1.00	24.97	A
ATOM	352	O	LYS	51	46.898	10.946	43.071	1.00	25.24	A
ATOM	353	N	SER	52	47.269	13.125	42.642	1.00	24.89	A
ATOM	354	CA	SER	52	48.080	13.369	43.860	1.00	25.34	A
ATOM	355	CB	SER	52	48.646	14.778	43.845	1.00	24.61	A
ATOM	356	OG	SER	52	49.488	14.948	42.722	1.00	27.47	A
ATOM	357	C	SER	52	47.356	13.303	45.170	1.00	25.41	A
ATOM	358	O	SER	52	47.914	13.093	46.238	1.00	25.98	A
ATOM	359	N	MET	53	46.060	13.539	45.086	1.00	24.31	A
ATOM	360	CA	MET	53	45.264	13.263	46.288	1.00	23.71	A
ATOM	361	CB	MET	53	43.996	14.110	46.247	1.00	24.57	A
ATOM	362	CG	MET	53	44.314	15.603	46.242	1.00	24.67	A
ATOM	363	SD	MET	53	42.918	16.527	45.602	1.00	26.70	A

12/90

ATOM	364	CE	MET	53	42.168	16.941	47.183	1.00	25.25	A
ATOM	365	C	MET	53	44.885	11.815	46.482	1.00	22.82	A
ATOM	366	O	MET	53	44.184	11.426	47.406	1.00	23.10	A
ATOM	367	N	GLY	54	45.398	10.990	45.561	1.00	21.46	A
ATOM	368	CA	GLY	54	45.139	9.582	45.784	1.00	20.14	A
ATOM	369	C	GLY	54	43.877	9.044	45.142	1.00	18.99	A
ATOM	370	O	GLY	54	43.571	7.859	45.273	1.00	19.22	A
ATOM	371	N	PHE	55	43.179	9.940	44.401	1.00	17.25	A
ATOM	372	CA	PHE	55	42.001	9.468	43.678	1.00	17.10	A
ATOM	373	CB	PHE	55	41.111	10.658	43.329	1.00	16.51	A
ATOM	374	CG	PHE	55	40.527	11.295	44.578	1.00	17.17	A
ATOM	375	CD1	PHE	55	39.539	10.616	45.308	1.00	16.04	A
ATOM	376	CD2	PHE	55	40.914	12.598	44.953	1.00	17.36	A
ATOM	377	CE1	PHE	55	38.916	11.251	46.421	1.00	16.37	A
ATOM	378	CE2	PHE	55	40.311	13.236	46.063	1.00	16.66	A
ATOM	379	CZ	PHE	55	39.302	12.557	46.797	1.00	14.85	A
ATOM	380	C	PHE	55	42.348	8.709	42.413	1.00	17.15	A
ATOM	381	O	PHE	55	43.366	8.939	41.767	1.00	16.37	A
ATOM	382	N	GLN	56	41.499	7.728	42.175	1.00	16.07	A
ATOM	383	CA	GLN	56	41.712	6.748	41.123	1.00	17.46	A
ATOM	384	CB	GLN	56	41.798	5.370	41.761	1.00	19.26	A
ATOM	385	CG	GLN	56	43.095	5.313	42.578	1.00	22.69	A
ATOM	386	CD	GLN	56	43.023	4.091	43.445	1.00	25.26	A
ATOM	387	OE1	GLN	56	42.417	4.079	44.503	1.00	25.69	A
ATOM	388	NE2	GLN	56	43.657	3.044	42.934	1.00	27.16	A
ATOM	389	C	GLN	56	40.614	6.703	40.115	1.00	17.01	A
ATOM	390	O	GLN	56	40.790	6.176	39.032	1.00	17.40	A
ATOM	391	N	LYS	57	39.458	7.252	40.511	1.00	15.95	A
ATOM	392	CA	LYS	57	38.299	7.243	39.587	1.00	15.69	A
ATOM	393	CB	LYS	57	37.658	5.869	39.642	1.00	15.87	A
ATOM	394	CG	LYS	57	36.458	5.641	38.755	1.00	17.37	A
ATOM	395	CD	LYS	57	35.867	4.241	38.925	1.00	18.59	A
ATOM	396	CE	LYS	57	36.763	3.055	38.534	1.00	21.57	A
ATOM	397	NZ	LYS	57	35.981	1.796	38.523	1.00	23.41	A
ATOM	398	C	LYS	57	37.368	8.356	40.046	1.00	13.70	A
ATOM	399	O	LYS	57	37.380	8.770	41.203	1.00	13.69	A
ATOM	400	N	VAL	58	36.608	8.872	39.069	1.00	12.80	A
ATOM	401	CA	VAL	58	35.883	10.109	39.318	1.00	11.96	A
ATOM	402	CB	VAL	58	36.546	11.237	38.487	1.00	11.90	A
ATOM	403	CG1	VAL	58	35.811	12.579	38.727	1.00	13.34	A
ATOM	404	CG2	VAL	58	38.008	11.384	38.924	1.00	12.67	A
ATOM	405	C	VAL	58	34.444	9.981	38.936	1.00	11.71	A
ATOM	406	O	VAL	58	34.106	9.597	37.841	1.00	10.64	A
ATOM	407	N	PHE	59	33.570	10.333	39.894	1.00	10.64	A
ATOM	408	CA	PHE	59	32.168	10.492	39.556	1.00	11.33	A
ATOM	409	CB	PHE	59	31.323	9.874	40.747	1.00	10.86	A
ATOM	410	CG	PHE	59	29.857	9.780	40.428	1.00	11.23	A
ATOM	411	CD1	PHE	59	29.115	10.953	40.107	1.00	10.81	A
ATOM	412	CD2	PHE	59	29.210	8.523	40.420	1.00	11.31	A
ATOM	413	CE1	PHE	59	27.755	10.864	39.764	1.00	11.80	A
ATOM	414	CE2	PHE	59	27.846	8.436	40.088	1.00	12.37	A
ATOM	415	CZ	PHE	59	27.132	9.605	39.752	1.00	13.60	A
ATOM	416	C	PHE	59	31.907	11.959	39.423	1.00	10.59	A
ATOM	417	O	PHE	59	32.099	12.741	40.345	1.00	9.43	A
ATOM	418	N	ILE	60	31.464	12.312	38.207	1.00	9.11	A
ATOM	419	CA	ILE	60	31.142	13.727	38.007	1.00	9.82	A
ATOM	420	CB	ILE	60	31.420	14.094	36.545	1.00	9.85	A
ATOM	421	CG2	ILE	60	30.960	15.532	36.211	1.00	7.95	A
ATOM	422	CG1	ILE	60	32.903	13.929	36.287	1.00	10.41	A
ATOM	423	CD1	ILE	60	33.290	14.038	34.788	1.00	11.09	A
ATOM	424	C	ILE	60	29.687	14.038	38.356	1.00	10.15	A

ATOM	425	O	ILE	60	28.783	13.486	37.749	1.00	10.31	A
ATOM	426	N	ALA	61	29.599	14.887	39.376	1.00	10.78	A
ATOM	427	CA	ALA	61	28.259	15.381	39.773	1.00	11.04	A
ATOM	428	CB	ALA	61	27.988	15.045	41.256	1.00	10.63	A
ATOM	429	C	ALA	61	28.125	16.843	39.610	1.00	10.95	A
ATOM	430	O	ALA	61	27.273	17.483	40.221	1.00	11.01	A
ATOM	431	N	LEU	62	28.960	17.369	38.725	1.00	11.88	A
ATOM	432	CA	LEU	62	28.910	18.783	38.380	1.00	10.05	A
ATOM	433	CB	LEU	62	30.287	19.199	37.804	1.00	10.28	A
ATOM	434	CG	LEU	62	31.339	19.099	38.890	1.00	9.68	A
ATOM	435	CD1	LEU	62	32.752	19.250	38.287	1.00	10.25	A
ATOM	436	CD2	LEU	62	31.157	20.191	39.931	1.00	11.88	A
ATOM	437	C	LEU	62	27.889	19.006	37.303	1.00	11.26	A
ATOM	438	O	LEU	62	27.560	18.102	36.555	1.00	10.95	A
ATOM	439	N	HIS	63	27.405	20.249	37.250	1.00	9.05	A
ATOM	440	CA	HIS	63	26.404	20.555	36.223	1.00	10.45	A
ATOM	441	CB	HIS	63	24.992	20.719	36.828	1.00	10.09	A
ATOM	442	CG	HIS	63	24.602	19.596	37.731	1.00	10.59	A
ATOM	443	ND1	HIS	63	24.759	18.311	37.430	1.00	10.49	A
ATOM	444	CD2	HIS	63	23.958	19.698	38.984	1.00	10.33	A
ATOM	445	NE2	HIS	63	23.777	18.429	39.402	1.00	10.66	A
ATOM	446	CE1	HIS	63	24.245	17.563	38.464	1.00	10.78	A
ATOM	447	C	HIS	63	26.754	21.894	35.643	1.00	11.58	A
ATOM	448	O	HIS	63	27.062	22.846	36.358	1.00	13.88	A
ATOM	449	N	GLY	64	26.742	21.927	34.336	1.00	12.04	A
ATOM	450	CA	GLY	64	26.976	23.188	33.602	1.00	13.78	A
ATOM	451	C	GLY	64	28.385	23.214	33.074	1.00	15.37	A
ATOM	452	O	GLY	64	29.084	22.237	33.261	1.00	17.95	A
ATOM	453	N	ARG	65	28.786	24.323	32.454	1.00	15.02	A
ATOM	454	CA	ARG	65	30.131	24.270	31.849	1.00	18.93	A
ATOM	455	CB	ARG	65	30.331	25.512	31.005	1.00	18.52	A
ATOM	456	CG	ARG	65	29.258	25.647	29.919	1.00	22.02	A
ATOM	457	CD	ARG	65	29.135	27.068	29.389	1.00	25.44	A
ATOM	458	NE	ARG	65	28.265	27.839	30.301	1.00	28.04	A
ATOM	459	CZ	ARG	65	27.604	28.911	29.858	1.00	28.69	A
ATOM	460	NH1	ARG	65	27.695	29.281	28.577	1.00	29.65	A
ATOM	461	NH2	ARG	65	26.823	29.604	30.699	1.00	29.43	A
ATOM	462	C	ARG	65	31.240	24.146	32.895	1.00	20.64	A
ATOM	463	O	ARG	65	31.068	24.417	34.079	1.00	23.00	A
ATOM	464	N	GLY	66	32.398	23.728	32.435	1.00	22.08	A
ATOM	465	CA	GLY	66	33.417	23.398	33.437	1.00	22.53	A
ATOM	466	C	GLY	66	33.276	22.051	34.113	1.00	22.05	A
ATOM	467	O	GLY	66	34.247	21.551	34.650	1.00	25.13	A
ATOM	468	N	GLY	67	32.071	21.478	34.114	1.00	20.38	A
ATOM	469	CA	GLY	67	31.926	20.095	34.630	1.00	18.09	A
ATOM	470	C	GLY	67	31.280	19.149	33.643	1.00	16.95	A
ATOM	471	O	GLY	67	31.473	17.944	33.605	1.00	15.87	A
ATOM	472	N	GLU	68	30.485	19.784	32.807	1.00	15.68	A
ATOM	473	CA	GLU	68	29.703	19.104	31.786	1.00	15.29	A
ATOM	474	CB	GLU	68	28.226	19.562	31.904	1.00	14.59	A
ATOM	475	CG	GLU	68	27.307	18.447	32.268	1.00	14.74	A
ATOM	476	CD	GLU	68	25.850	18.841	32.500	1.00	13.46	A
ATOM	477	OE1	GLU	68	25.554	19.906	33.044	1.00	12.15	A
ATOM	478	OE2	GLU	68	25.019	18.046	32.111	1.00	11.64	A
ATOM	479	C	GLU	68	30.098	19.221	30.316	1.00	15.59	A
ATOM	480	O	GLU	68	29.485	18.606	29.450	1.00	17.28	A
ATOM	481	N	ASP	69	31.037	20.111	30.042	1.00	13.30	A
ATOM	482	CA	ASP	69	31.170	20.561	28.644	1.00	13.44	A
ATOM	483	CB	ASP	69	31.095	22.117	28.550	1.00	13.64	A
ATOM	484	CG	ASP	69	32.367	22.789	29.016	1.00	15.19	A
ATOM	485	OD1	ASP	69	33.253	22.087	29.526	1.00	15.35	A

ATOM	486	OD2	ASP	69	32.495	24.010	28.834	1.00	18.28	A
ATOM	487	C	ASP	69	32.391	20.011	27.903	1.00	12.23	A
ATOM	488	O	ASP	69	32.820	20.518	26.881	1.00	11.21	A
ATOM	489	N	GLY	70	32.953	18.964	28.511	1.00	11.75	A
ATOM	490	CA	GLY	70	34.120	18.237	27.868	1.00	10.70	A
ATOM	491	C	GLY	70	35.476	18.665	28.410	1.00	11.03	A
ATOM	492	O	GLY	70	36.509	18.012	28.246	1.00	10.36	A
ATOM	493	N	THR	71	35.452	19.843	29.096	1.00	10.08	A
ATOM	494	CA	THR	71	36.756	20.397	29.506	1.00	11.12	A
ATOM	495	CB	THR	71	36.621	21.854	29.942	1.00	12.28	A
ATOM	496	OG1	THR	71	35.735	21.941	31.088	1.00	17.99	A
ATOM	497	CG2	THR	71	35.999	22.620	28.781	1.00	8.06	A
ATOM	498	C	THR	71	37.375	19.590	30.619	1.00	10.30	A
ATOM	499	O	THR	71	38.515	19.141	30.578	1.00	11.26	A
ATOM	500	N	LEU	72	36.518	19.349	31.644	1.00	10.87	A
ATOM	501	CA	LEU	72	36.921	18.449	32.724	1.00	12.01	A
ATOM	502	CB	LEU	72	35.718	18.256	33.595	1.00	13.90	A
ATOM	503	CG	LEU	72	35.891	18.037	35.095	1.00	17.88	A
ATOM	504	CD1	LEU	72	34.737	17.215	35.655	1.00	17.66	A
ATOM	505	CD2	LEU	72	37.267	17.749	35.625	1.00	18.95	A
ATOM	506	C	LEU	72	37.317	17.056	32.244	1.00	11.11	A
ATOM	507	O	LEU	72	38.334	16.491	32.604	1.00	12.01	A
ATOM	508	N	GLN	73	36.458	16.571	31.360	1.00	9.66	A
ATOM	509	CA	GLN	73	36.625	15.229	30.767	1.00	10.30	A
ATOM	510	CB	GLN	73	35.513	15.047	29.768	1.00	8.53	A
ATOM	511	CG	GLN	73	34.184	14.693	30.481	1.00	10.78	A
ATOM	512	CD	GLN	73	33.412	15.932	31.021	1.00	10.84	A
ATOM	513	OE1	GLN	73	32.391	15.760	31.681	1.00	12.80	A
ATOM	514	NE2	GLN	73	33.848	17.139	30.669	1.00	6.37	A
ATOM	515	C	GLN	73	37.990	15.076	30.086	1.00	9.99	A
ATOM	516	O	GLN	73	38.678	14.084	30.247	1.00	12.32	A
ATOM	517	N	GLY	74	38.356	16.142	29.390	1.00	10.25	A
ATOM	518	CA	GLY	74	39.656	16.062	28.695	1.00	11.63	A
ATOM	519	C	GLY	74	40.772	16.007	29.687	1.00	11.64	A
ATOM	520	O	GLY	74	41.696	15.253	29.492	1.00	12.30	A
ATOM	521	N	MET	75	40.672	16.804	30.759	1.00	12.05	A
ATOM	522	CA	MET	75	41.703	16.757	31.809	1.00	13.63	A
ATOM	523	CB	MET	75	41.398	17.761	32.954	1.00	12.80	A
ATOM	524	CG	MET	75	42.479	17.686	34.062	1.00	16.91	A
ATOM	525	SD	MET	75	41.913	18.414	35.595	1.00	19.10	A
ATOM	526	CE	MET	75	40.819	17.122	36.135	1.00	19.55	A
ATOM	527	C	MET	75	41.828	15.389	32.447	1.00	13.99	A
ATOM	528	O	MET	75	42.900	14.833	32.636	1.00	14.22	A
ATOM	529	N	LEU	76	40.655	14.848	32.796	1.00	14.33	A
ATOM	530	CA	LEU	76	40.660	13.513	33.384	1.00	15.67	A
ATOM	531	CB	LEU	76	39.251	13.093	33.754	1.00	14.37	A
ATOM	532	CG	LEU	76	38.739	14.000	34.873	1.00	14.55	A
ATOM	533	CD1	LEU	76	37.240	13.726	35.016	1.00	15.19	A
ATOM	534	CD2	LEU	76	39.511	13.819	36.194	1.00	16.77	A
ATOM	535	C	LEU	76	41.260	12.436	32.477	1.00	16.12	A
ATOM	536	O	LEU	76	41.952	11.538	32.936	1.00	17.80	A
ATOM	537	N	GLU	77	41.010	12.614	31.180	1.00	16.58	A
ATOM	538	CA	GLU	77	41.619	11.768	30.144	1.00	18.98	A
ATOM	539	CB	GLU	77	41.101	12.134	28.732	1.00	19.70	A
ATOM	540	CG	GLU	77	39.614	11.774	28.659	1.00	21.68	A
ATOM	541	CD	GLU	77	39.188	10.945	27.479	1.00	23.85	A
ATOM	542	OE1	GLU	77	37.996	10.693	27.365	1.00	24.03	A
ATOM	543	OE2	GLU	77	40.028	10.532	26.678	1.00	25.94	A
ATOM	544	C	GLU	77	43.130	11.821	30.140	1.00	19.02	A
ATOM	545	O	GLU	77	43.789	10.778	30.143	1.00	18.94	A
ATOM	546	N	LEU	78	43.649	13.052	30.141	1.00	19.84	A

15/90

ATOM	547	CA	LEU	78	45.125	13.215	30.194	1.00	20.89	A
ATOM	548	CB	LEU	78	45.552	14.676	29.954	1.00	21.38	A
ATOM	549	CG	LEU	78	45.838	15.150	28.503	1.00	22.76	A
ATOM	550	CD1	LEU	78	47.121	14.562	27.936	1.00	22.06	A
ATOM	551	CD2	LEU	78	44.663	14.899	27.576	1.00	21.85	A
ATOM	552	C	LEU	78	45.758	12.792	31.520	1.00	21.44	A
ATOM	553	O	LEU	78	46.943	12.487	31.598	1.00	22.68	A
ATOM	554	N	MET	79	44.947	12.769	32.577	1.00	20.42	A
ATOM	555	CA	MET	79	45.446	12.270	33.884	1.00	21.29	A
ATOM	556	CB	MET	79	44.712	12.888	35.076	1.00	22.51	A
ATOM	557	CG	MET	79	44.998	14.376	35.099	1.00	24.47	A
ATOM	558	SD	MET	79	43.980	15.247	36.260	1.00	27.63	A
ATOM	559	CE	MET	79	44.620	14.669	37.828	1.00	25.14	A
ATOM	560	C	MET	79	45.358	10.809	34.045	1.00	19.33	A
ATOM	561	O	MET	79	45.902	10.223	34.964	1.00	20.38	A
ATOM	562	N	GLY	80	44.645	10.239	33.109	1.00	18.56	A
ATOM	563	CA	GLY	80	44.345	8.806	33.099	1.00	17.33	A
ATOM	564	C	GLY	80	43.458	8.348	34.214	1.00	18.05	A
ATOM	565	O	GLY	80	43.620	7.270	34.754	1.00	19.39	A
ATOM	566	N	LEU	81	42.496	9.215	34.535	1.00	16.13	A
ATOM	567	CA	LEU	81	41.460	8.808	35.499	1.00	15.26	A
ATOM	568	CB	LEU	81	41.238	9.974	36.452	1.00	15.13	A
ATOM	569	CG	LEU	81	42.385	10.233	37.429	1.00	15.22	A
ATOM	570	CD1	LEU	81	42.125	11.534	38.211	1.00	16.71	A
ATOM	571	CD2	LEU	81	42.698	9.058	38.325	1.00	16.67	A
ATOM	572	C	LEU	81	40.141	8.447	34.845	1.00	14.76	A
ATOM	573	O	LEU	81	39.550	9.247	34.155	1.00	15.80	A
ATOM	574	N	PRO	82	39.666	7.232	35.033	1.00	14.69	A
ATOM	575	CD	PRO	82	40.352	6.085	35.626	1.00	15.73	A
ATOM	576	CA	PRO	82	38.333	6.879	34.531	1.00	13.81	A
ATOM	577	CB	PRO	82	38.156	5.412	34.904	1.00	15.15	A
ATOM	578	CG	PRO	82	39.220	5.145	35.979	1.00	16.34	A
ATOM	579	C	PRO	82	37.299	7.754	35.211	1.00	14.18	A
ATOM	580	O	PRO	82	37.436	8.115	36.370	1.00	15.00	A
ATOM	581	N	TYR	83	36.324	8.126	34.390	1.00	13.96	A
ATOM	582	CA	TYR	83	35.292	9.011	34.959	1.00	12.60	A
ATOM	583	CB	TYR	83	35.703	10.479	34.695	1.00	12.63	A
ATOM	584	CG	TYR	83	35.823	10.772	33.216	1.00	11.70	A
ATOM	585	CD1	TYR	83	34.688	11.197	32.498	1.00	10.92	A
ATOM	586	CE1	TYR	83	34.795	11.394	31.106	1.00	13.51	A
ATOM	587	CD2	TYR	83	37.072	10.550	32.559	1.00	13.26	A
ATOM	588	CE2	TYR	83	37.153	10.787	31.172	1.00	14.56	A
ATOM	589	CZ	TYR	83	36.015	11.208	30.459	1.00	13.47	A
ATOM	590	OH	TYR	83	36.109	11.488	29.124	1.00	14.86	A
ATOM	591	C	TYR	83	33.947	8.656	34.383	1.00	12.29	A
ATOM	592	O	TYR	83	33.839	8.075	33.311	1.00	11.32	A
ATOM	593	N	THR	84	32.887	9.018	35.153	1.00	11.24	A
ATOM	594	CA	THR	84	31.539	8.688	34.673	1.00	10.84	A
ATOM	595	CB	THR	84	30.597	8.872	35.874	1.00	10.21	A
ATOM	596	OG1	THR	84	30.640	10.232	36.365	1.00	9.18	A
ATOM	597	CG2	THR	84	30.873	7.851	37.037	1.00	11.85	A
ATOM	598	C	THR	84	31.023	9.561	33.530	1.00	10.05	A
ATOM	599	O	THR	84	31.500	10.668	33.334	1.00	12.17	A
ATOM	600	N	GLY	85	30.001	9.043	32.805	1.00	9.82	A
ATOM	601	CA	GLY	85	29.385	9.920	31.822	1.00	9.82	A
ATOM	602	C	GLY	85	30.137	9.936	30.477	1.00	9.67	A
ATOM	603	O	GLY	85	31.096	9.206	30.200	1.00	10.49	A
ATOM	604	N	SER	86	29.589	10.815	29.646	1.00	9.78	A
ATOM	605	CA	SER	86	30.131	10.909	28.287	1.00	9.99	A
ATOM	606	CB	SER	86	29.225	11.813	27.457	1.00	9.93	A
ATOM	607	OG	SER	86	27.873	11.346	27.455	1.00	9.80	A

16/90

ATOM	608	C	SER	86	31.523	11.515	28.223	1.00	9.97	A
ATOM	609	O	SER	86	32.033	12.180	29.113	1.00	9.35	A
ATOM	610	N	GLY	87	32.145	11.212	27.072	1.00	10.85	A
ATOM	611	CA	GLY	87	33.513	11.687	26.888	1.00	10.06	A
ATOM	612	C	GLY	87	33.562	13.117	26.390	1.00	9.63	A
ATOM	613	O	GLY	87	32.594	13.867	26.435	1.00	10.74	A
ATOM	614	N	VAL	88	34.763	13.500	25.962	1.00	10.36	A
ATOM	615	CA	VAL	88	34.943	14.924	25.660	1.00	9.46	A
ATOM	616	CB	VAL	88	36.375	15.163	25.193	1.00	9.77	A
ATOM	617	CG1	VAL	88	36.618	16.583	24.715	1.00	8.63	A
ATOM	618	CG2	VAL	88	37.352	14.734	26.293	1.00	8.35	A
ATOM	619	C	VAL	88	33.996	15.467	24.600	1.00	10.37	A
ATOM	620	O	VAL	88	33.315	16.457	24.808	1.00	9.31	A
ATOM	621	N	MET	89	33.998	14.758	23.449	1.00	9.71	A
ATOM	622	CA	MET	89	33.145	15.280	22.389	1.00	9.70	A
ATOM	623	CB	MET	89	33.401	14.437	21.134	1.00	11.62	A
ATOM	624	CG	MET	89	32.780	15.187	20.002	1.00	12.00	A
ATOM	625	SD	MET	89	31.174	14.677	19.739	1.00	18.74	A
ATOM	626	CE	MET	89	32.310	13.767	18.572	1.00	9.39	A
ATOM	627	C	MET	89	31.689	15.362	22.712	1.00	9.35	A
ATOM	628	O	MET	89	31.040	16.377	22.517	1.00	9.32	A
ATOM	629	N	ALA	90	31.180	14.219	23.175	1.00	9.16	A
ATOM	630	CA	ALA	90	29.743	14.265	23.415	1.00	8.35	A
ATOM	631	CB	ALA	90	29.250	12.872	23.689	1.00	11.91	A
ATOM	632	C	ALA	90	29.298	15.203	24.515	1.00	8.86	A
ATOM	633	O	ALA	90	28.240	15.807	24.450	1.00	9.46	A
ATOM	634	N	SER	91	30.158	15.334	25.517	1.00	8.88	A
ATOM	635	CA	SER	91	29.848	16.323	26.577	1.00	8.52	A
ATOM	636	CB	SER	91	30.892	16.277	27.663	1.00	7.71	A
ATOM	637	OG	SER	91	30.815	14.999	28.283	1.00	9.99	A
ATOM	638	C	SER	91	29.803	17.709	26.041	1.00	8.74	A
ATOM	639	O	SER	91	28.886	18.486	26.280	1.00	10.07	A
ATOM	640	N	ALA	92	30.823	17.989	25.214	1.00	8.36	A
ATOM	641	CA	ALA	92	30.919	19.318	24.604	1.00	7.88	A
ATOM	642	CB	ALA	92	32.245	19.431	23.796	1.00	9.50	A
ATOM	643	C	ALA	92	29.758	19.664	23.712	1.00	8.96	A
ATOM	644	O	ALA	92	29.241	20.780	23.690	1.00	8.92	A
ATOM	645	N	LEU	93	29.385	18.670	22.911	1.00	9.87	A
ATOM	646	CA	LEU	93	28.347	18.851	21.918	1.00	9.46	A
ATOM	647	CB	LEU	93	28.328	17.662	20.936	1.00	11.71	A
ATOM	648	CG	LEU	93	29.103	17.877	19.652	1.00	15.83	A
ATOM	649	CD1	LEU	93	30.515	18.443	19.782	1.00	18.40	A
ATOM	650	CD2	LEU	93	28.895	16.594	18.812	1.00	18.44	A
ATOM	651	C	LEU	93	26.993	18.908	22.644	1.00	10.44	A
ATOM	652	O	LEU	93	26.154	19.698	22.292	1.00	11.59	A
ATOM	653	N	SER	94	26.812	18.087	23.655	1.00	9.86	A
ATOM	654	CA	SER	94	25.521	18.091	24.334	1.00	11.07	A
ATOM	655	CB	SER	94	25.422	16.990	25.374	1.00	12.32	A
ATOM	656	OG	SER	94	25.364	15.721	24.681	1.00	15.71	A
ATOM	657	C	SER	94	25.253	19.373	25.097	1.00	10.21	A
ATOM	658	O	SER	94	24.091	19.782	25.286	1.00	9.94	A
ATOM	659	N	MET	95	26.382	19.970	25.505	1.00	10.45	A
ATOM	660	CA	MET	95	26.295	21.257	26.203	1.00	11.57	A
ATOM	661	CB	MET	95	27.644	21.687	26.861	1.00	12.95	A
ATOM	662	CG	MET	95	27.543	22.860	27.833	1.00	15.48	A
ATOM	663	SD	MET	95	27.531	22.293	29.549	1.00	23.18	A
ATOM	664	CE	MET	95	25.938	21.644	29.566	1.00	13.35	A
ATOM	665	C	MET	95	25.827	22.368	25.321	1.00	10.80	A
ATOM	666	O	MET	95	25.238	23.356	25.759	1.00	11.86	A
ATOM	667	N	ASP	96	26.120	22.177	24.026	1.00	9.55	A
ATOM	668	CA	ASP	96	25.874	23.218	23.078	1.00	9.11	A

17/90

ATOM	669	CB	ASP	96	27.125	23.258	22.149	1.00	9.85	A
ATOM	670	CG	ASP	96	27.099	24.432	21.172	1.00	11.93	A
ATOM	671	OD1	ASP	96	26.037	24.746	20.634	1.00	9.80	A
ATOM	672	OD2	ASP	96	28.190	24.987	20.949	1.00	12.49	A
ATOM	673	C	ASP	96	24.607	22.966	22.331	1.00	8.31	A
ATOM	674	O	ASP	96	24.535	22.140	21.455	1.00	6.92	A
ATOM	675	N	LYS	97	23.547	23.683	22.739	1.00	8.63	A
ATOM	676	CA	LYS	97	22.250	23.330	22.200	1.00	8.08	A
ATOM	677	CB	LYS	97	21.109	24.117	22.947	1.00	7.96	A
ATOM	678	CG	LYS	97	20.848	23.538	24.331	1.00	8.39	A
ATOM	679	CD	LYS	97	19.750	24.450	25.006	1.00	6.69	A
ATOM	680	CE	LYS	97	19.274	23.900	26.341	1.00	6.86	A
ATOM	681	NZ	LYS	97	20.312	24.097	27.399	1.00	5.89	A
ATOM	682	C	LYS	97	22.133	23.653	20.739	1.00	9.07	A
ATOM	683	O	LYS	97	21.508	22.960	19.951	1.00	10.33	A
ATOM	684	N	LEU	98	22.808	24.739	20.380	1.00	9.06	A
ATOM	685	CA	LEU	98	22.855	25.089	18.963	1.00	9.87	A
ATOM	686	CB	LEU	98	23.695	26.329	18.814	1.00	10.02	A
ATOM	687	CG	LEU	98	23.750	26.979	17.421	1.00	13.68	A
ATOM	688	CD1	LEU	98	24.177	28.421	17.617	1.00	14.88	A
ATOM	689	CD2	LEU	98	24.761	26.329	16.498	1.00	16.87	A
ATOM	690	C	LEU	98	23.400	23.957	18.115	1.00	9.14	A
ATOM	691	O	LEU	98	22.836	23.605	17.097	1.00	9.42	A
ATOM	692	N	ARG	99	24.540	23.469	18.585	1.00	10.31	A
ATOM	693	CA	ARG	99	25.177	22.429	17.784	1.00	10.06	A
ATOM	694	CB	ARG	99	26.697	22.375	18.045	1.00	9.44	A
ATOM	695	CG	ARG	99	27.270	23.634	17.380	1.00	10.90	A
ATOM	696	CD	ARG	99	28.756	23.809	17.645	1.00	12.60	A
ATOM	697	NE	ARG	99	29.301	24.976	16.959	1.00	11.61	A
ATOM	698	CZ	ARG	99	29.146	26.243	17.382	1.00	13.18	A
ATOM	699	NH1	ARG	99	28.759	26.544	18.635	1.00	12.49	A
ATOM	700	NH2	ARG	99	29.377	27.259	16.529	1.00	11.11	A
ATOM	701	C	ARG	99	24.539	21.075	17.826	1.00	10.03	A
ATOM	702	O	ARG	99	24.526	20.312	16.866	1.00	8.92	A
ATOM	703	N	SER	100	23.955	20.812	18.989	1.00	7.83	A
ATOM	704	CA	SER	100	23.105	19.643	19.100	1.00	7.96	A
ATOM	705	CB	SER	100	22.479	19.472	20.478	1.00	6.80	A
ATOM	706	OG	SER	100	23.439	19.039	21.441	1.00	8.69	A
ATOM	707	C	SER	100	21.944	19.737	18.155	1.00	9.04	A
ATOM	708	O	SER	100	21.588	18.756	17.536	1.00	8.42	A
ATOM	709	N	LYS	101	21.328	20.939	18.063	1.00	10.35	A
ATOM	710	CA	LYS	101	20.249	21.041	17.094	1.00	11.56	A
ATOM	711	CB	LYS	101	19.578	22.407	17.249	1.00	13.19	A
ATOM	712	CG	LYS	101	18.676	22.429	18.492	1.00	16.70	A
ATOM	713	CD	LYS	101	17.979	23.765	18.721	1.00	19.49	A
ATOM	714	CE	LYS	101	16.658	23.560	19.529	1.00	21.33	A
ATOM	715	NZ	LYS	101	15.571	23.149	18.605	1.00	23.97	A
ATOM	716	C	LYS	101	20.692	20.810	15.639	1.00	9.45	A
ATOM	717	O	LYS	101	20.013	20.121	14.895	1.00	10.27	A
ATOM	718	N	LEU	102	21.833	21.429	15.263	1.00	9.61	A
ATOM	719	CA	LEU	102	22.287	21.176	13.893	1.00	9.74	A
ATOM	720	CB	LEU	102	23.543	21.952	13.677	1.00	10.75	A
ATOM	721	CG	LEU	102	23.312	23.462	13.627	1.00	10.17	A
ATOM	722	CD1	LEU	102	24.668	24.147	13.687	1.00	11.53	A
ATOM	723	CD2	LEU	102	22.504	23.883	12.434	1.00	11.44	A
ATOM	724	C	LEU	102	22.627	19.710	13.642	1.00	10.77	A
ATOM	725	O	LEU	102	22.327	19.151	12.588	1.00	10.29	A
ATOM	726	N	LEU	103	23.270	19.098	14.643	1.00	11.06	A
ATOM	727	CA	LEU	103	23.534	17.645	14.477	1.00	11.09	A
ATOM	728	CB	LEU	103	24.189	17.084	15.731	1.00	14.35	A
ATOM	729	CG	LEU	103	25.635	17.350	15.939	1.00	17.95	A

18/90

ATOM	730	CD1	LEU	103	25.956	17.450	17.444	1.00	19.68	A
ATOM	731	CD2	LEU	103	26.325	16.167	15.240	1.00	19.34	A
ATOM	732	C	LEU	103	22.309	16.793	14.260	1.00	11.30	A
ATOM	733	O	LEU	103	22.184	15.898	13.406	1.00	9.28	A
ATOM	734	N	TRP	104	21.361	17.128	15.153	1.00	9.91	A
ATOM	735	CA	TRP	104	20.151	16.330	15.118	1.00	9.98	A
ATOM	736	CB	TRP	104	19.225	16.688	16.294	1.00	9.50	A
ATOM	737	CG	TRP	104	19.657	16.029	17.579	1.00	9.24	A
ATOM	738	CD2	TRP	104	19.418	16.482	18.901	1.00	7.95	A
ATOM	739	CE2	TRP	104	20.054	15.496	19.813	1.00	9.47	A
ATOM	740	CE3	TRP	104	18.742	17.592	19.396	1.00	9.20	A
ATOM	741	CD1	TRP	104	20.414	14.865	17.758	1.00	8.52	A
ATOM	742	NE1	TRP	104	20.658	14.531	19.059	1.00	8.39	A
ATOM	743	CZ2	TRP	104	19.945	15.668	21.206	1.00	10.24	A
ATOM	744	CZ3	TRP	104	18.651	17.738	20.796	1.00	8.22	A
ATOM	745	CH2	TRP	104	19.222	16.790	21.657	1.00	9.51	A
ATOM	746	C	TRP	104	19.373	16.513	13.838	1.00	10.34	A
ATOM	747	O	TRP	104	18.861	15.555	13.277	1.00	11.82	A
ATOM	748	N	GLN	105	19.300	17.771	13.417	1.00	11.07	A
ATOM	749	CA	GLN	105	18.616	18.082	12.148	1.00	13.11	A
ATOM	750	CB	GLN	105	18.571	19.621	12.172	1.00	14.45	A
ATOM	751	CG	GLN	105	18.266	20.437	10.943	1.00	18.70	A
ATOM	752	CD	GLN	105	18.011	21.847	11.467	1.00	21.34	A
ATOM	753	OE1	GLN	105	17.083	22.048	12.239	1.00	24.97	A
ATOM	754	NE2	GLN	105	18.843	22.821	11.070	1.00	20.13	A
ATOM	755	C	GLN	105	19.326	17.486	10.929	1.00	13.12	A
ATOM	756	O	GLN	105	18.768	16.965	9.964	1.00	12.19	A
ATOM	757	N	GLY	106	20.648	17.486	11.030	1.00	12.65	A
ATOM	758	CA	GLY	106	21.452	16.858	9.990	1.00	13.19	A
ATOM	759	C	GLY	106	21.295	15.369	9.908	1.00	13.63	A
ATOM	760	O	GLY	106	21.348	14.758	8.841	1.00	14.13	A
ATOM	761	N	ALA	107	20.983	14.788	11.084	1.00	11.85	A
ATOM	762	CA	ALA	107	20.562	13.421	11.169	1.00	13.06	A
ATOM	763	CB	ALA	107	20.855	12.915	12.560	1.00	12.52	A
ATOM	764	C	ALA	107	19.103	13.097	10.841	1.00	12.96	A
ATOM	765	O	ALA	107	18.691	11.962	10.890	1.00	13.56	A
ATOM	766	N	GLY	108	18.357	14.138	10.551	1.00	12.24	A
ATOM	767	CA	GLY	108	16.904	13.987	10.265	1.00	13.18	A
ATOM	768	C	GLY	108	15.989	13.699	11.445	1.00	13.28	A
ATOM	769	O	GLY	108	14.894	13.127	11.347	1.00	14.92	A
ATOM	770	N	LEU	109	16.484	14.131	12.602	1.00	11.91	A
ATOM	771	CA	LEU	109	15.704	13.940	13.823	1.00	13.00	A
ATOM	772	CB	LEU	109	16.738	13.696	14.950	1.00	12.60	A
ATOM	773	CG	LEU	109	17.509	12.386	14.822	1.00	14.04	A
ATOM	774	CD1	LEU	109	18.525	12.262	15.956	1.00	15.01	A
ATOM	775	CD2	LEU	109	16.576	11.177	14.816	1.00	15.94	A
ATOM	776	C	LEU	109	14.848	15.207	14.096	1.00	12.94	A
ATOM	777	O	LEU	109	15.192	16.304	13.713	1.00	13.33	A
ATOM	778	N	PRO	110	13.681	15.004	14.749	1.00	13.30	A
ATOM	779	CD	PRO	110	13.193	13.737	15.273	1.00	11.20	A
ATOM	780	CA	PRO	110	12.758	16.129	14.970	1.00	12.32	A
ATOM	781	CB	PRO	110	11.488	15.363	15.471	1.00	12.31	A
ATOM	782	CG	PRO	110	11.954	14.084	16.110	1.00	11.45	A
ATOM	783	C	PRO	110	13.247	17.144	15.977	1.00	11.63	A
ATOM	784	O	PRO	110	13.462	16.861	17.135	1.00	12.53	A
ATOM	785	N	VAL	111	13.358	18.347	15.473	1.00	13.51	A
ATOM	786	CA	VAL	111	13.686	19.515	16.300	1.00	14.97	A
ATOM	787	CB	VAL	111	15.103	19.861	15.823	1.00	14.48	A
ATOM	788	CG1	VAL	111	15.562	21.260	16.072	1.00	17.85	A
ATOM	789	CG2	VAL	111	16.130	18.790	16.321	1.00	14.84	A
ATOM	790	C	VAL	111	12.643	20.602	16.074	1.00	14.02	A

19/90

ATOM	791	O	VAL	111	12.091	20.672	15.017	1.00	17.48	A
ATOM	792	N	ALA	112	12.425	21.438	17.075	1.00	16.48	A
ATOM	793	CA	ALA	112	11.534	22.614	16.962	1.00	16.33	A
ATOM	794	CB	ALA	112	11.406	23.324	18.329	1.00	15.78	A
ATOM	795	C	ALA	112	12.142	23.579	16.026	1.00	15.12	A
ATOM	796	O	ALA	112	13.350	23.741	16.036	1.00	13.35	A
ATOM	797	N	PRO	113	11.318	24.245	15.193	1.00	15.36	A
ATOM	798	CD	PRO	113	9.883	24.015	14.958	1.00	14.72	A
ATOM	799	CA	PRO	113	11.897	25.347	14.416	1.00	14.65	A
ATOM	800	CB	PRO	113	10.632	25.997	13.828	1.00	14.26	A
ATOM	801	CG	PRO	113	9.666	24.836	13.657	1.00	14.97	A
ATOM	802	C	PRO	113	12.597	26.326	15.309	1.00	15.41	A
ATOM	803	O	PRO	113	12.178	26.542	16.439	1.00	14.18	A
ATOM	804	N	TRP	114	13.691	26.872	14.798	1.00	15.65	A
ATOM	805	CA	TRP	114	14.500	27.703	15.672	1.00	16.21	A
ATOM	806	CB	TRP	114	15.488	26.801	16.527	1.00	19.20	A
ATOM	807	CG	TRP	114	16.870	26.590	15.886	1.00	25.64	A
ATOM	808	CD2	TRP	114	17.426	25.484	15.253	1.00	28.09	A
ATOM	809	CE2	TRP	114	18.811	25.873	14.838	1.00	30.19	A
ATOM	810	CE3	TRP	114	16.975	24.194	15.022	1.00	28.95	A
ATOM	811	CD1	TRP	114	17.906	27.556	15.823	1.00	26.86	A
ATOM	812	NE1	TRP	114	19.040	27.169	15.200	1.00	29.63	A
ATOM	813	CZ2	TRP	114	19.649	24.922	14.241	1.00	30.39	A
ATOM	814	CZ3	TRP	114	17.855	23.270	14.437	1.00	31.72	A
ATOM	815	CH2	TRP	114	19.173	23.617	14.054	1.00	31.50	A
ATOM	816	C	TRP	114	15.253	28.680	14.830	1.00	15.65	A
ATOM	817	O	TRP	114	15.442	28.486	13.637	1.00	15.12	A
ATOM	818	N	VAL	115	15.714	29.722	15.494	1.00	14.90	A
ATOM	819	CA	VAL	115	16.721	30.582	14.891	1.00	16.10	A
ATOM	820	CB	VAL	115	16.027	31.921	14.558	1.00	15.92	A
ATOM	821	CG1	VAL	115	16.996	33.032	14.106	1.00	17.45	A
ATOM	822	CG2	VAL	115	14.989	31.657	13.434	1.00	17.25	A
ATOM	823	C	VAL	115	17.825	30.749	15.928	1.00	16.51	A
ATOM	824	O	VAL	115	17.541	30.919	17.103	1.00	17.17	A
ATOM	825	N	ALA	116	19.096	30.669	15.506	1.00	16.95	A
ATOM	826	CA	ALA	116	20.112	30.962	16.500	1.00	17.54	A
ATOM	827	CB	ALA	116	21.260	29.971	16.409	1.00	16.17	A
ATOM	828	C	ALA	116	20.712	32.308	16.262	1.00	18.21	A
ATOM	829	O	ALA	116	20.804	32.727	15.120	1.00	19.77	A
ATOM	830	N	LEU	117	21.140	32.999	17.339	1.00	18.49	A
ATOM	831	CA	LEU	117	21.945	34.159	16.993	1.00	19.68	A
ATOM	832	CB	LEU	117	21.011	35.341	16.748	1.00	22.51	A
ATOM	833	CG	LEU	117	20.189	35.822	17.908	1.00	21.46	A
ATOM	834	CD1	LEU	117	20.811	37.097	18.460	1.00	26.25	A
ATOM	835	CD2	LEU	117	18.798	36.270	17.469	1.00	24.28	A
ATOM	836	C	LEU	117	23.059	34.505	17.946	1.00	19.62	A
ATOM	837	O	LEU	117	23.054	34.125	19.092	1.00	19.58	A
ATOM	838	N	THR	118	24.028	35.243	17.441	1.00	19.90	A
ATOM	839	CA	THR	118	25.100	35.593	18.369	1.00	21.24	A
ATOM	840	CB	THR	118	26.463	35.544	17.668	1.00	21.24	A
ATOM	841	OG1	THR	118	26.510	36.486	16.572	1.00	20.74	A
ATOM	842	CG2	THR	118	26.744	34.115	17.191	1.00	21.69	A
ATOM	843	C	THR	118	24.858	36.914	19.027	1.00	21.87	A
ATOM	844	O	THR	118	24.020	37.652	18.565	1.00	21.00	A
ATOM	845	N	ARG	119	25.592	37.178	20.113	1.00	23.64	A
ATOM	846	CA	ARG	119	25.411	38.496	20.759	1.00	25.37	A
ATOM	847	CB	ARG	119	26.070	38.550	22.134	1.00	25.88	A
ATOM	848	CG	ARG	119	25.611	39.729	23.004	1.00	28.86	A
ATOM	849	CD	ARG	119	26.522	39.925	24.224	1.00	29.75	A
ATOM	850	NE	ARG	119	27.855	40.282	23.750	1.00	31.70	A
ATOM	851	CZ	ARG	119	28.689	41.035	24.478	1.00	32.86	A

ATOM	852	NH1	ARG	119	29.780	41.523	23.897	1.00	33.17	A
ATOM	853	NH2	ARG	119	28.446	41.328	25.761	1.00	33.12	A
ATOM	854	C	ARG	119	25.925	39.636	19.918	1.00	25.38	A
ATOM	855	O	ARG	119	25.323	40.690	19.842	1.00	26.19	A
ATOM	856	N	ALA	120	27.022	39.356	19.229	1.00	25.58	A
ATOM	857	CA	ALA	120	27.490	40.229	18.144	1.00	26.14	A
ATOM	858	CB	ALA	120	28.732	39.620	17.503	1.00	26.92	A
ATOM	859	C	ALA	120	26.467	40.585	17.086	1.00	26.11	A
ATOM	860	O	ALA	120	26.232	41.751	16.804	1.00	26.70	A
ATOM	861	N	GLU	121	25.806	39.558	16.558	1.00	25.89	A
ATOM	862	CA	GLU	121	24.640	39.794	15.693	1.00	26.57	A
ATOM	863	CB	GLU	121	24.047	38.485	15.178	1.00	26.68	A
ATOM	864	CG	GLU	121	24.906	37.879	14.079	1.00	27.40	A
ATOM	865	CD	GLU	121	24.669	36.391	13.850	1.00	29.13	A
ATOM	866	OE1	GLU	121	23.766	35.789	14.437	1.00	27.50	A
ATOM	867	OE2	GLU	121	25.410	35.831	13.042	1.00	30.71	A
ATOM	868	C	GLU	121	23.535	40.618	16.314	1.00	26.82	A
ATOM	869	O	GLU	121	23.101	41.581	15.726	1.00	26.33	A
ATOM	870	N	PHE	122	23.119	40.254	17.535	1.00	27.85	A
ATOM	871	CA	PHE	122	22.211	41.076	18.349	1.00	28.81	A
ATOM	872	CB	PHE	122	22.067	40.374	19.712	1.00	27.93	A
ATOM	873	CG	PHE	122	21.426	41.186	20.823	1.00	26.97	A
ATOM	874	CD1	PHE	122	20.035	41.386	20.829	1.00	26.64	A
ATOM	875	CD2	PHE	122	22.239	41.719	21.852	1.00	27.71	A
ATOM	876	CE1	PHE	122	19.443	42.111	21.874	1.00	27.57	A
ATOM	877	CE2	PHE	122	21.646	42.454	22.910	1.00	28.60	A
ATOM	878	CZ	PHE	122	20.247	42.635	22.913	1.00	27.43	A
ATOM	879	C	PHE	122	22.653	42.529	18.557	1.00	29.97	A
ATOM	880	O	PHE	122	21.910	43.443	18.266	1.00	30.93	A
ATOM	881	N	GLU	123	23.863	42.713	19.088	1.00	31.99	A
ATOM	882	CA	GLU	123	24.287	44.029	19.575	1.00	33.68	A
ATOM	883	CB	GLU	123	24.702	43.994	21.057	1.00	34.84	A
ATOM	884	CG	GLU	123	25.822	43.081	21.605	1.00	35.30	A
ATOM	885	CD	GLU	123	27.226	43.324	21.079	1.00	37.66	A
ATOM	886	OE1	GLU	123	27.503	43.007	19.910	1.00	37.93	A
ATOM	887	OE2	GLU	123	28.057	43.814	21.848	1.00	38.16	A
ATOM	888	C	GLU	123	25.385	44.767	18.867	1.00	34.34	A
ATOM	889	O	GLU	123	26.224	45.383	19.514	1.00	35.64	A
ATOM	890	N	LYS	124	25.387	44.761	17.529	1.00	34.54	A
ATOM	891	CA	LYS	124	26.324	45.719	16.895	1.00	34.31	A
ATOM	892	CB	LYS	124	26.155	45.612	15.370	1.00	33.22	A
ATOM	893	CG	LYS	124	26.726	44.336	14.730	1.00	33.00	A
ATOM	894	CD	LYS	124	27.993	44.659	13.903	1.00	31.52	A
ATOM	895	CE	LYS	124	27.644	45.589	12.723	1.00	31.92	A
ATOM	896	NZ	LYS	124	28.835	46.030	11.979	1.00	31.71	A
ATOM	897	C	LYS	124	26.110	47.162	17.385	1.00	34.97	A
ATOM	898	O	LYS	124	26.588	47.587	18.443	1.00	34.97	A
ATOM	899	N	GLY	125	25.327	47.890	16.568	1.00	34.96	A
ATOM	900	CA	GLY	125	24.137	48.574	17.073	1.00	34.43	A
ATOM	901	C	GLY	125	23.043	47.561	17.299	1.00	34.57	A
ATOM	902	O	GLY	125	22.521	47.337	18.380	1.00	34.73	A
ATOM	903	N	LEU	126	22.792	46.895	16.172	1.00	34.72	A
ATOM	904	CA	LEU	126	22.100	45.611	16.030	1.00	34.29	A
ATOM	905	CB	LEU	126	20.563	45.733	15.832	1.00	34.56	A
ATOM	906	CG	LEU	126	19.591	46.395	16.809	1.00	34.02	A
ATOM	907	CD1	LEU	126	19.700	45.847	18.231	1.00	33.39	A
ATOM	908	CD2	LEU	126	19.645	47.924	16.651	1.00	33.64	A
ATOM	909	C	LEU	126	22.573	45.048	14.727	1.00	34.14	A
ATOM	910	O	LEU	126	23.270	45.688	13.946	1.00	32.91	A
ATOM	911	N	SER	127	22.071	43.850	14.489	1.00	33.77	A
ATOM	912	CA	SER	127	21.528	43.637	13.161	1.00	34.78	A

ATOM	913	CB	SER	127	22.190	42.435	12.510	1.00	34.15	A
ATOM	914	OG	SER	127	21.797	42.395	11.141	1.00	34.18	A
ATOM	915	C	SER	127	20.033	43.500	13.203	1.00	35.24	A
ATOM	916	O	SER	127	19.460	42.753	13.972	1.00	35.12	A
ATOM	917	N	ASP	128	19.432	44.302	12.325	1.00	36.04	A
ATOM	918	CA	ASP	128	18.004	44.262	12.066	1.00	36.11	A
ATOM	919	CB	ASP	128	17.456	45.681	12.127	1.00	36.65	A
ATOM	920	CG	ASP	128	18.031	46.498	10.984	1.00	36.88	A
ATOM	921	OD1	ASP	128	17.310	46.664	9.987	1.00	37.67	A
ATOM	922	OD2	ASP	128	19.188	46.927	11.092	1.00	34.41	A
ATOM	923	C	ASP	128	17.739	43.615	10.721	1.00	36.70	A
ATOM	924	O	ASP	128	16.738	43.814	10.044	1.00	37.20	A
ATOM	925	N	LYS	129	18.763	42.850	10.357	1.00	35.64	A
ATOM	926	CA	LYS	129	18.568	41.537	9.780	1.00	35.16	A
ATOM	927	CB	LYS	129	19.004	41.467	8.312	1.00	34.40	A
ATOM	928	CG	LYS	129	18.407	42.484	7.316	1.00	34.32	A
ATOM	929	CD	LYS	129	18.623	42.089	5.833	1.00	33.84	A
ATOM	930	CE	LYS	129	20.071	41.783	5.401	1.00	33.06	A
ATOM	931	NZ	LYS	129	20.838	43.037	5.262	1.00	34.65	A
ATOM	932	C	LYS	129	19.386	40.608	10.633	1.00	34.67	A
ATOM	933	O	LYS	129	20.101	39.735	10.173	1.00	35.40	A
ATOM	934	N	GLN	130	19.242	40.860	11.943	1.00	34.86	A
ATOM	935	CA	GLN	130	18.951	39.848	12.968	1.00	33.86	A
ATOM	936	CB	GLN	130	20.176	39.507	13.824	1.00	33.72	A
ATOM	937	CG	GLN	130	20.421	37.998	13.900	1.00	34.87	A
ATOM	938	CD	GLN	130	21.055	37.479	12.607	1.00	35.02	A
ATOM	939	OE1	GLN	130	22.245	37.228	12.547	1.00	35.32	A
ATOM	940	NE2	GLN	130	20.229	37.292	11.572	1.00	34.74	A
ATOM	941	C	GLN	130	17.819	40.264	13.878	1.00	33.98	A
ATOM	942	O	GLN	130	17.783	40.010	15.075	1.00	33.71	A
ATOM	943	N	LEU	131	16.880	40.939	13.199	1.00	33.72	A
ATOM	944	CA	LEU	131	15.577	41.405	13.671	1.00	33.15	A
ATOM	945	CB	LEU	131	15.716	42.702	14.497	1.00	32.66	A
ATOM	946	CG	LEU	131	15.170	42.671	15.940	1.00	32.69	A
ATOM	947	CD1	LEU	131	13.930	41.764	16.078	1.00	33.16	A
ATOM	948	CD2	LEU	131	16.260	42.291	16.948	1.00	32.46	A
ATOM	949	C	LEU	131	14.818	41.720	12.402	1.00	33.15	A
ATOM	950	O	LEU	131	15.078	42.681	11.685	1.00	33.60	A
ATOM	951	N	ALA	132	13.908	40.794	12.134	1.00	33.53	A
ATOM	952	CA	ALA	132	13.480	40.299	10.816	1.00	32.45	A
ATOM	953	CB	ALA	132	14.247	40.863	9.607	1.00	33.32	A
ATOM	954	C	ALA	132	13.758	38.821	10.755	1.00	31.96	A
ATOM	955	O	ALA	132	12.868	37.990	10.682	1.00	31.70	A
ATOM	956	N	GLU	133	15.063	38.551	10.782	1.00	31.92	A
ATOM	957	CA	GLU	133	15.516	37.177	10.579	1.00	32.35	A
ATOM	958	CB	GLU	133	16.968	37.058	10.153	1.00	32.29	A
ATOM	959	CG	GLU	133	17.148	37.608	8.739	1.00	31.83	A
ATOM	960	CD	GLU	133	16.227	36.976	7.707	1.00	32.95	A
ATOM	961	OE1	GLU	133	15.526	35.990	7.988	1.00	32.25	A
ATOM	962	OE2	GLU	133	16.223	37.495	6.585	1.00	33.39	A
ATOM	963	C	GLU	133	15.295	36.115	11.559	1.00	31.81	A
ATOM	964	O	GLU	133	15.560	34.962	11.274	1.00	32.87	A
ATOM	965	N	ILE	134	14.785	36.526	12.711	1.00	32.79	A
ATOM	966	CA	ILE	134	14.043	35.627	13.612	1.00	31.80	A
ATOM	967	CB	ILE	134	13.919	36.428	14.898	1.00	31.48	A
ATOM	968	CG2	ILE	134	13.118	35.756	16.034	1.00	32.13	A
ATOM	969	CG1	ILE	134	15.324	36.824	15.340	1.00	31.28	A
ATOM	970	CD1	ILE	134	15.323	38.075	16.228	1.00	32.71	A
ATOM	971	C	ILE	134	12.700	35.339	12.944	1.00	31.18	A
ATOM	972	O	ILE	134	12.571	34.457	12.099	1.00	30.23	A
ATOM	973	N	SER	135	11.729	36.222	13.293	1.00	31.39	A

ATOM	974	CA	SER	135	10.345	36.287	12.792	1.00	29.37	A
ATOM	975	CB	SER	135	10.093	37.101	11.499	1.00	32.42	A
ATOM	976	OG	SER	135	8.724	37.585	11.478	1.00	33.38	A
ATOM	977	C	SER	135	9.779	34.937	12.773	1.00	28.49	A
ATOM	978	O	SER	135	9.970	34.346	13.837	1.00	25.18	A
ATOM	979	N	ALA	136	9.130	34.542	11.598	1.00	26.08	A
ATOM	980	CA	ALA	136	8.521	33.302	11.053	1.00	24.00	A
ATOM	981	CB	ALA	136	9.284	32.821	9.800	1.00	24.99	A
ATOM	982	C	ALA	136	8.251	32.086	11.948	1.00	23.04	A
ATOM	983	O	ALA	136	7.526	31.168	11.630	1.00	22.43	A
ATOM	984	N	LEU	137	8.836	32.115	13.132	1.00	21.14	A
ATOM	985	CA	LEU	137	8.473	31.172	14.196	1.00	19.73	A
ATOM	986	CB	LEU	137	9.465	31.380	15.350	1.00	19.29	A
ATOM	987	CG	LEU	137	10.881	30.979	14.954	1.00	17.62	A
ATOM	988	CD1	LEU	137	11.901	31.476	15.962	1.00	18.78	A
ATOM	989	CD2	LEU	137	10.923	29.494	14.587	1.00	17.11	A
ATOM	990	C	LEU	137	7.096	31.403	14.756	1.00	20.27	A
ATOM	991	O	LEU	137	6.578	30.563	15.459	1.00	20.68	A
ATOM	992	N	GLY	138	6.538	32.611	14.511	1.00	19.40	A
ATOM	993	CA	GLY	138	5.325	32.956	15.292	1.00	19.92	A
ATOM	994	C	GLY	138	5.571	33.335	16.758	1.00	17.87	A
ATOM	995	O	GLY	138	6.703	33.479	17.213	1.00	16.91	A
ATOM	996	N	LEU	139	4.438	33.484	17.482	1.00	16.77	A
ATOM	997	CA	LEU	139	4.493	33.678	18.921	1.00	17.08	A
ATOM	998	CB	LEU	139	4.178	35.105	19.353	1.00	17.27	A
ATOM	999	CG	LEU	139	5.275	36.083	18.967	1.00	19.57	A
ATOM	1000	CD1	LEU	139	4.784	37.504	19.259	1.00	22.01	A
ATOM	1001	CD2	LEU	139	6.591	35.800	19.663	1.00	19.99	A
ATOM	1002	C	LEU	139	3.462	32.794	19.546	1.00	16.29	A
ATOM	1003	O	LEU	139	2.427	32.579	18.933	1.00	16.99	A
ATOM	1004	N	PRO	140	3.759	32.274	20.770	1.00	15.56	A
ATOM	1005	CD	PRO	140	2.877	31.335	21.451	1.00	15.33	A
ATOM	1006	CA	PRO	140	4.953	32.604	21.556	1.00	14.07	A
ATOM	1007	CB	PRO	140	4.603	32.102	22.979	1.00	13.99	A
ATOM	1008	CG	PRO	140	3.250	31.457	22.923	1.00	14.15	A
ATOM	1009	C	PRO	140	6.198	31.899	21.072	1.00	14.16	A
ATOM	1010	O	PRO	140	6.138	31.052	20.212	1.00	14.44	A
ATOM	1011	N	VAL	141	7.311	32.338	21.637	1.00	13.66	A
ATOM	1012	CA	VAL	141	8.567	31.611	21.505	1.00	13.70	A
ATOM	1013	CB	VAL	141	9.529	32.311	20.519	1.00	14.01	A
ATOM	1014	CG1	VAL	141	9.034	32.101	19.103	1.00	15.19	A
ATOM	1015	CG2	VAL	141	9.796	33.783	20.866	1.00	16.06	A
ATOM	1016	C	VAL	141	9.245	31.491	22.838	1.00	14.14	A
ATOM	1017	O	VAL	141	8.948	32.205	23.790	1.00	14.00	A
ATOM	1018	N	ILE	142	10.231	30.562	22.847	1.00	12.92	A
ATOM	1019	CA	ILE	142	11.088	30.572	24.020	1.00	14.30	A
ATOM	1020	CB	ILE	142	11.078	29.225	24.729	1.00	14.95	A
ATOM	1021	CG2	ILE	142	11.955	28.150	24.063	1.00	15.92	A
ATOM	1022	CG1	ILE	142	11.449	29.372	26.202	1.00	16.78	A
ATOM	1023	CD1	ILE	142	11.013	28.145	27.010	1.00	17.91	A
ATOM	1024	C	ILE	142	12.462	30.995	23.592	1.00	13.56	A
ATOM	1025	O	ILE	142	12.921	30.772	22.470	1.00	13.80	A
ATOM	1026	N	VAL	143	13.079	31.690	24.545	1.00	12.35	A
ATOM	1027	CA	VAL	143	14.429	32.132	24.266	1.00	12.59	A
ATOM	1028	CB	VAL	143	14.432	33.669	24.413	1.00	11.82	A
ATOM	1029	CG1	VAL	143	15.852	34.195	24.323	1.00	13.39	A
ATOM	1030	CG2	VAL	143	13.551	34.301	23.328	1.00	12.02	A
ATOM	1031	C	VAL	143	15.334	31.459	25.282	1.00	12.87	A
ATOM	1032	O	VAL	143	14.972	31.320	26.441	1.00	12.39	A
ATOM	1033	N	LYS	144	16.491	30.957	24.795	1.00	12.19	A
ATOM	1034	CA	LYS	144	17.409	30.293	25.731	1.00	11.01	A

ATOM	1035	CB	LYS	144	17.131	28.791	25.791	1.00	11.58	A
ATOM	1036	CG	LYS	144	17.283	28.020	24.501	1.00	10.83	A
ATOM	1037	CD	LYS	144	16.800	26.558	24.594	1.00	13.23	A
ATOM	1038	CE	LYS	144	15.310	26.384	24.710	1.00	13.17	A
ATOM	1039	NZ	LYS	144	14.909	24.998	24.398	1.00	10.72	A
ATOM	1040	C	LYS	144	18.854	30.486	25.359	1.00	10.82	A
ATOM	1041	O	LYS	144	19.207	30.533	24.192	1.00	10.70	A
ATOM	1042	N	PRO	145	19.712	30.525	26.378	1.00	10.78	A
ATOM	1043	CD	PRO	145	19.458	30.503	27.812	1.00	7.24	A
ATOM	1044	CA	PRO	145	21.158	30.477	26.056	1.00	8.70	A
ATOM	1045	CB	PRO	145	21.885	30.576	27.398	1.00	9.15	A
ATOM	1046	CG	PRO	145	20.774	31.019	28.377	1.00	8.91	A
ATOM	1047	C	PRO	145	21.470	29.113	25.478	1.00	10.87	A
ATOM	1048	O	PRO	145	20.797	28.132	25.770	1.00	11.64	A
ATOM	1049	N	SER	146	22.496	29.109	24.643	1.00	10.56	A
ATOM	1050	CA	SER	146	22.881	27.797	24.070	1.00	9.64	A
ATOM	1051	CB	SER	146	23.960	28.003	22.977	1.00	9.85	A
ATOM	1052	OG	SER	146	24.252	26.738	22.301	1.00	12.13	A
ATOM	1053	C	SER	146	23.417	26.803	25.068	1.00	8.52	A
ATOM	1054	O	SER	146	23.138	25.629	24.890	1.00	10.14	A
ATOM	1055	N	ARG	147	24.225	27.280	26.027	1.00	8.04	A
ATOM	1056	CA	ARG	147	25.084	26.416	26.878	1.00	10.54	A
ATOM	1057	CB	ARG	147	26.575	26.672	26.541	1.00	12.93	A
ATOM	1058	CG	ARG	147	26.856	26.288	25.055	1.00	16.94	A
ATOM	1059	CD	ARG	147	28.265	26.660	24.562	1.00	22.11	A
ATOM	1060	NE	ARG	147	28.531	28.064	24.861	1.00	25.45	A
ATOM	1061	CZ	ARG	147	29.452	28.424	25.784	1.00	28.67	A
ATOM	1062	NH1	ARG	147	30.369	27.579	26.300	1.00	28.09	A
ATOM	1063	NH2	ARG	147	29.462	29.681	26.231	1.00	28.84	A
ATOM	1064	C	ARG	147	24.815	26.491	28.375	1.00	11.77	A
ATOM	1065	O	ARG	147	25.675	26.215	29.198	1.00	12.31	A
ATOM	1066	N	GLU	148	23.546	26.780	28.681	1.00	10.71	A
ATOM	1067	CA	GLU	148	23.178	26.677	30.123	1.00	9.93	A
ATOM	1068	CB	GLU	148	22.326	27.889	30.481	1.00	9.22	A
ATOM	1069	CG	GLU	148	23.187	29.008	31.065	1.00	11.93	A
ATOM	1070	CD	GLU	148	23.777	28.653	32.427	1.00	12.44	A
ATOM	1071	OE1	GLU	148	23.314	27.685	33.051	1.00	12.29	A
ATOM	1072	OE2	GLU	148	24.715	29.345	32.828	1.00	12.30	A
ATOM	1073	C	GLU	148	22.418	25.412	30.462	1.00	9.77	A
ATOM	1074	O	GLU	148	22.327	24.458	29.698	1.00	9.15	A
ATOM	1075	N	GLY	149	21.913	25.390	31.685	1.00	8.89	A
ATOM	1076	CA	GLY	149	21.120	24.310	32.208	1.00	10.00	A
ATOM	1077	C	GLY	149	20.169	24.876	33.218	1.00	9.17	A
ATOM	1078	O	GLY	149	20.237	26.058	33.570	1.00	10.97	A
ATOM	1079	N	SER	150	19.293	23.957	33.661	1.00	10.81	A
ATOM	1080	CA	SER	150	18.375	24.330	34.764	1.00	9.12	A
ATOM	1081	CB	SER	150	19.174	24.756	36.019	1.00	8.48	A
ATOM	1082	OG	SER	150	19.760	23.621	36.673	1.00	10.03	A
ATOM	1083	C	SER	150	17.438	25.495	34.450	1.00	10.07	A
ATOM	1084	O	SER	150	16.990	26.160	35.375	1.00	9.83	A
ATOM	1085	N	SER	151	17.218	25.774	33.147	1.00	8.38	A
ATOM	1086	CA	SER	151	16.389	26.867	32.621	1.00	9.28	A
ATOM	1087	CB	SER	151	14.969	26.752	33.161	1.00	11.17	A
ATOM	1088	OG	SER	151	14.464	25.486	32.748	1.00	10.33	A
ATOM	1089	C	SER	151	16.887	28.214	32.919	1.00	10.38	A
ATOM	1090	O	SER	151	16.162	29.192	32.827	1.00	9.66	A
ATOM	1091	N	VAL	152	18.151	28.238	33.303	1.00	9.46	A
ATOM	1092	CA	VAL	152	18.812	29.517	33.475	1.00	11.30	A
ATOM	1093	CB	VAL	152	20.200	29.263	34.057	1.00	11.60	A
ATOM	1094	CG1	VAL	152	21.066	30.533	34.226	1.00	11.10	A
ATOM	1095	CG2	VAL	152	20.060	28.610	35.473	1.00	10.89	A

24/90

ATOM	1096	C	VAL	152	18.839	30.368	32.227	1.00	11.36	A
ATOM	1097	O	VAL	152	19.189	29.936	31.147	1.00	11.41	A
ATOM	1098	N	GLY	153	18.410	31.634	32.437	1.00	12.05	A
ATOM	1099	CA	GLY	153	18.460	32.579	31.325	1.00	12.43	A
ATOM	1100	C	GLY	153	17.311	32.515	30.355	1.00	10.77	A
ATOM	1101	O	GLY	153	17.324	33.176	29.321	1.00	12.31	A
ATOM	1102	N	MET	154	16.330	31.697	30.678	1.00	13.06	A
ATOM	1103	CA	MET	154	15.268	31.428	29.715	1.00	12.69	A
ATOM	1104	CB	MET	154	14.876	29.949	29.740	1.00	15.83	A
ATOM	1105	CG	MET	154	16.044	29.125	29.214	1.00	14.83	A
ATOM	1106	SD	MET	154	15.732	27.359	29.002	1.00	13.51	A
ATOM	1107	CE	MET	154	14.219	27.408	28.054	1.00	13.28	A
ATOM	1108	C	MET	154	14.080	32.259	29.993	1.00	14.43	A
ATOM	1109	O	MET	154	13.727	32.535	31.138	1.00	13.34	A
ATOM	1110	N	SER	155	13.454	32.628	28.889	1.00	14.74	A
ATOM	1111	CA	SER	155	12.098	33.112	29.081	1.00	15.11	A
ATOM	1112	CB	SER	155	12.132	34.575	29.507	1.00	16.74	A
ATOM	1113	OG	SER	155	12.940	35.350	28.654	1.00	16.14	A
ATOM	1114	C	SER	155	11.117	32.862	27.985	1.00	14.84	A
ATOM	1115	O	SER	155	11.433	32.551	26.845	1.00	13.90	A
ATOM	1116	N	LYS	156	9.855	32.943	28.406	1.00	15.03	A
ATOM	1117	CA	LYS	156	8.827	32.810	27.358	1.00	16.30	A
ATOM	1118	CB	LYS	156	7.630	32.078	27.960	1.00	16.44	A
ATOM	1119	CG	LYS	156	6.453	31.949	27.021	1.00	15.44	A
ATOM	1120	CD	LYS	156	5.219	31.322	27.644	1.00	16.99	A
ATOM	1121	CE	LYS	156	4.012	31.323	26.702	1.00	17.32	A
ATOM	1122	NZ	LYS	156	2.920	30.437	27.180	1.00	16.92	A
ATOM	1123	C	LYS	156	8.437	34.193	26.862	1.00	17.90	A
ATOM	1124	O	LYS	156	8.247	35.088	27.673	1.00	17.93	A
ATOM	1125	N	VAL	157	8.354	34.344	25.512	1.00	17.50	A
ATOM	1126	CA	VAL	157	7.975	35.622	24.887	1.00	19.34	A
ATOM	1127	CB	VAL	157	9.029	36.056	23.821	1.00	18.76	A
ATOM	1128	CG1	VAL	157	8.667	37.314	23.017	1.00	17.56	A
ATOM	1129	CG2	VAL	157	10.356	36.366	24.521	1.00	19.10	A
ATOM	1130	C	VAL	157	6.657	35.602	24.198	1.00	21.31	A
ATOM	1131	O	VAL	157	6.420	34.742	23.346	1.00	20.15	A
ATOM	1132	N	VAL	158	5.886	36.693	24.548	1.00	23.64	A
ATOM	1133	CA	VAL	158	5.055	37.492	23.570	1.00	26.50	A
ATOM	1134	CB	VAL	158	3.595	37.362	24.027	1.00	26.25	A
ATOM	1135	CG1	VAL	158	2.727	37.096	22.808	1.00	24.04	A
ATOM	1136	CG2	VAL	158	3.379	36.267	25.123	1.00	25.93	A
ATOM	1137	C	VAL	158	5.342	38.949	23.019	1.00	28.59	A
ATOM	1138	O	VAL	158	6.439	39.418	22.706	1.00	29.61	A
ATOM	1139	N	ALA	159	4.225	39.653	22.822	1.00	30.49	A
ATOM	1140	CA	ALA	159	3.884	40.940	22.213	1.00	31.98	A
ATOM	1141	CB	ALA	159	4.085	42.025	23.269	1.00	33.18	A
ATOM	1142	C	ALA	159	4.439	41.349	20.852	1.00	32.76	A
ATOM	1143	O	ALA	159	3.798	42.012	20.026	1.00	31.78	A
ATOM	1144	N	GLU	160	5.684	40.885	20.707	1.00	32.19	A
ATOM	1145	CA	GLU	160	6.860	41.516	20.142	1.00	32.77	A
ATOM	1146	CB	GLU	160	6.723	41.603	18.621	1.00	32.69	A
ATOM	1147	CG	GLU	160	8.127	41.404	18.053	1.00	34.57	A
ATOM	1148	CD	GLU	160	8.302	42.252	16.827	1.00	34.45	A
ATOM	1149	OE1	GLU	160	7.651	41.964	15.825	1.00	35.14	A
ATOM	1150	OE2	GLU	160	9.092	43.198	16.884	1.00	34.49	A
ATOM	1151	C	GLU	160	7.334	42.813	20.816	1.00	32.02	A
ATOM	1152	O	GLU	160	8.064	43.604	20.256	1.00	33.60	A
ATOM	1153	N	ASN	161	6.926	43.030	22.066	1.00	31.55	A
ATOM	1154	CA	ASN	161	7.620	44.006	22.945	1.00	31.18	A
ATOM	1155	CB	ASN	161	6.784	44.244	24.268	1.00	32.20	A
ATOM	1156	CG	ASN	161	7.479	45.081	25.369	1.00	33.86	A

25/90

ATOM	1157	OD1	ASN	161	8.559	44.816	25.902	1.00	35.18	A
ATOM	1158	ND2	ASN	161	6.786	46.155	25.714	1.00	34.08	A
ATOM	1159	C	ASN	161	8.922	43.349	23.329	1.00	29.53	A
ATOM	1160	O	ASN	161	10.022	43.884	23.374	1.00	29.29	A
ATOM	1161	N	ALA	162	8.649	42.088	23.640	1.00	27.23	A
ATOM	1162	CA	ALA	162	9.353	41.421	24.678	1.00	24.91	A
ATOM	1163	CB	ALA	162	8.384	40.502	25.410	1.00	24.30	A
ATOM	1164	C	ALA	162	10.538	40.666	24.156	1.00	23.51	A
ATOM	1165	O	ALA	162	11.433	40.385	24.926	1.00	22.89	A
ATOM	1166	N	LEU	163	10.556	40.359	22.840	1.00	24.39	A
ATOM	1167	CA	LEU	163	11.715	39.546	22.372	1.00	23.32	A
ATOM	1168	CB	LEU	163	11.645	39.338	20.853	1.00	23.29	A
ATOM	1169	CG	LEU	163	11.703	37.895	20.351	1.00	23.34	A
ATOM	1170	CD1	LEU	163	11.893	37.893	18.839	1.00	22.06	A
ATOM	1171	CD2	LEU	163	12.788	37.095	21.033	1.00	21.22	A
ATOM	1172	C	LEU	163	13.071	40.138	22.716	1.00	23.52	A
ATOM	1173	O	LEU	163	13.936	39.480	23.241	1.00	22.43	A
ATOM	1174	N	GLN	164	13.239	41.434	22.459	1.00	23.45	A
ATOM	1175	CA	GLN	164	14.553	42.007	22.761	1.00	23.19	A
ATOM	1176	CB	GLN	164	14.732	43.370	22.045	1.00	24.45	A
ATOM	1177	CG	GLN	164	14.544	43.250	20.505	1.00	28.07	A
ATOM	1178	CD	GLN	164	13.085	43.401	19.996	1.00	29.26	A
ATOM	1179	OE1	GLN	164	12.033	43.207	20.621	1.00	28.58	A
ATOM	1180	NE2	GLN	164	13.092	43.779	18.714	1.00	30.16	A
ATOM	1181	C	GLN	164	15.024	42.005	24.206	1.00	22.46	A
ATOM	1182	O	GLN	164	16.173	41.680	24.477	1.00	21.27	A
ATOM	1183	N	ASP	165	14.102	42.270	25.163	1.00	21.70	A
ATOM	1184	CA	ASP	165	14.485	42.097	26.566	1.00	21.05	A
ATOM	1185	CB	ASP	165	13.370	42.510	27.566	1.00	23.53	A
ATOM	1186	CG	ASP	165	12.677	43.828	27.229	1.00	26.30	A
ATOM	1187	OD1	ASP	165	13.373	44.806	26.928	1.00	28.03	A
ATOM	1188	OD2	ASP	165	11.435	43.857	27.264	1.00	26.53	A
ATOM	1189	C	ASP	165	14.851	40.654	26.886	1.00	18.69	A
ATOM	1190	O	ASP	165	15.716	40.353	27.691	1.00	18.61	A
ATOM	1191	N	ALA	166	14.143	39.749	26.210	1.00	18.09	A
ATOM	1192	CA	ALA	166	14.401	38.334	26.555	1.00	16.37	A
ATOM	1193	CB	ALA	166	13.329	37.391	25.987	1.00	15.98	A
ATOM	1194	C	ALA	166	15.740	37.900	25.986	1.00	15.41	A
ATOM	1195	O	ALA	166	16.473	37.176	26.618	1.00	14.90	A
ATOM	1196	N	LEU	167	16.058	38.424	24.785	1.00	15.69	A
ATOM	1197	CA	LEU	167	17.411	38.115	24.277	1.00	14.55	A
ATOM	1198	CB	LEU	167	17.605	38.627	22.827	1.00	13.77	A
ATOM	1199	CG	LEU	167	16.633	37.979	21.833	1.00	12.38	A
ATOM	1200	CD1	LEU	167	16.606	38.722	20.511	1.00	13.51	A
ATOM	1201	CD2	LEU	167	17.100	36.542	21.521	1.00	11.14	A
ATOM	1202	C	LEU	167	18.481	38.761	25.092	1.00	14.98	A
ATOM	1203	O	LEU	167	19.556	38.235	25.322	1.00	13.12	A
ATOM	1204	N	ARG	168	18.127	39.983	25.554	1.00	15.90	A
ATOM	1205	CA	ARG	168	19.124	40.652	26.408	1.00	17.00	A
ATOM	1206	CB	ARG	168	18.784	42.137	26.611	1.00	17.73	A
ATOM	1207	CG	ARG	168	19.962	42.944	27.198	1.00	22.74	A
ATOM	1208	CD	ARG	168	19.793	44.457	27.400	1.00	24.77	A
ATOM	1209	NE	ARG	168	20.083	45.262	26.206	1.00	28.30	A
ATOM	1210	CZ	ARG	168	19.237	45.450	25.166	1.00	29.10	A
ATOM	1211	NH1	ARG	168	19.595	46.285	24.191	1.00	30.28	A
ATOM	1212	NH2	ARG	168	18.033	44.859	25.079	1.00	29.27	A
ATOM	1213	C	ARG	168	19.434	39.960	27.702	1.00	17.53	A
ATOM	1214	O	ARG	168	20.576	39.935	28.188	1.00	19.22	A
ATOM	1215	N	LEU	169	18.389	39.310	28.221	1.00	14.94	A
ATOM	1216	CA	LEU	169	18.699	38.450	29.336	1.00	14.01	A
ATOM	1217	CB	LEU	169	17.346	38.134	29.976	1.00	14.65	A

26/90

ATOM	1218	CG	LEU	169	17.391	37.248	31.202	1.00	14.78	A
ATOM	1219	CD1	LEU	169	17.329	35.825	30.794	1.00	18.78	A
ATOM	1220	CD2	LEU	169	18.507	37.468	32.202	1.00	17.43	A
ATOM	1221	C	LEU	169	19.532	37.208	28.988	1.00	12.45	A
ATOM	1222	O	LEU	169	20.484	36.887	29.680	1.00	12.81	A
ATOM	1223	N	ALA	170	19.101	36.509	27.937	1.00	12.15	A
ATOM	1224	CA	ALA	170	19.821	35.262	27.563	1.00	11.63	A
ATOM	1225	CB	ALA	170	19.071	34.571	26.438	1.00	11.98	A
ATOM	1226	C	ALA	170	21.310	35.481	27.224	1.00	11.33	A
ATOM	1227	O	ALA	170	22.160	34.682	27.575	1.00	12.06	A
ATOM	1228	N	PHE	171	21.586	36.607	26.592	1.00	10.23	A
ATOM	1229	CA	PHE	171	22.989	36.931	26.341	1.00	11.52	A
ATOM	1230	CB	PHE	171	23.109	38.080	25.324	1.00	12.10	A
ATOM	1231	CG	PHE	171	22.688	37.699	23.943	1.00	12.63	A
ATOM	1232	CD1	PHE	171	23.407	36.679	23.277	1.00	14.99	A
ATOM	1233	CD2	PHE	171	21.636	38.401	23.331	1.00	13.96	A
ATOM	1234	CE1	PHE	171	23.045	36.370	21.948	1.00	15.23	A
ATOM	1235	CE2	PHE	171	21.270	38.097	22.011	1.00	16.44	A
ATOM	1236	CZ	PHE	171	21.998	37.083	21.352	1.00	16.07	A
ATOM	1237	C	PHE	171	23.820	37.343	27.542	1.00	12.41	A
ATOM	1238	O	PHE	171	25.050	37.447	27.455	1.00	13.42	A
ATOM	1239	N	GLN	172	23.120	37.527	28.707	1.00	11.09	A
ATOM	1240	CA	GLN	172	23.955	37.643	29.895	1.00	11.91	A
ATOM	1241	CB	GLN	172	23.109	38.282	31.037	1.00	10.93	A
ATOM	1242	CG	GLN	172	22.658	39.690	30.589	1.00	10.97	A
ATOM	1243	CD	GLN	172	21.801	40.405	31.645	1.00	10.98	A
ATOM	1244	OE1	GLN	172	20.853	41.104	31.314	1.00	13.88	A
ATOM	1245	NE2	GLN	172	22.148	40.208	32.901	1.00	11.31	A
ATOM	1246	C	GLN	172	24.554	36.303	30.355	1.00	11.32	A
ATOM	1247	O	GLN	172	25.384	36.212	31.234	1.00	11.27	A
ATOM	1248	N	HIS	173	24.101	35.238	29.690	1.00	12.38	A
ATOM	1249	CA	HIS	173	24.512	33.904	30.122	1.00	13.88	A
ATOM	1250	CB	HIS	173	23.260	33.077	30.388	1.00	15.51	A
ATOM	1251	CG	HIS	173	22.582	33.603	31.634	1.00	16.34	A
ATOM	1252	ND1	HIS	173	21.549	34.468	31.651	1.00	17.59	A
ATOM	1253	CD2	HIS	173	22.963	33.295	32.938	1.00	17.37	A
ATOM	1254	NE2	HIS	173	22.122	34.010	33.739	1.00	17.25	A
ATOM	1255	CE1	HIS	173	21.258	34.716	32.977	1.00	15.42	A
ATOM	1256	C	HIS	173	25.305	33.139	29.080	1.00	13.31	A
ATOM	1257	O	HIS	173	25.950	32.163	29.420	1.00	14.24	A
ATOM	1258	N	ASP	174	25.259	33.635	27.851	1.00	14.35	A
ATOM	1259	CA	ASP	174	25.980	33.003	26.734	1.00	16.43	A
ATOM	1260	CB	ASP	174	25.211	31.720	26.325	1.00	15.55	A
ATOM	1261	CG	ASP	174	26.027	30.754	25.460	1.00	17.36	A
ATOM	1262	OD1	ASP	174	25.729	29.574	25.476	1.00	15.62	A
ATOM	1263	OD2	ASP	174	26.969	31.166	24.784	1.00	18.06	A
ATOM	1264	C	ASP	174	25.999	33.912	25.529	1.00	17.75	A
ATOM	1265	O	ASP	174	25.053	34.631	25.226	1.00	19.18	A
ATOM	1266	N	GLU	175	27.107	33.771	24.785	1.00	17.79	A
ATOM	1267	CA	GLU	175	27.252	34.496	23.527	1.00	19.00	A
ATOM	1268	CB	GLU	175	28.747	34.389	23.100	1.00	21.04	A
ATOM	1269	CG	GLU	175	29.550	35.469	23.846	1.00	26.24	A
ATOM	1270	CD	GLU	175	29.003	36.830	23.451	1.00	29.39	A
ATOM	1271	OE1	GLU	175	28.936	37.120	22.257	1.00	32.74	A
ATOM	1272	OE2	GLU	175	28.626	37.606	24.329	1.00	31.55	A
ATOM	1273	C	GLU	175	26.388	34.022	22.396	1.00	17.97	A
ATOM	1274	O	GLU	175	26.222	34.697	21.397	1.00	19.77	A
ATOM	1275	N	GLU	176	25.840	32.830	22.578	1.00	15.95	A
ATOM	1276	CA	GLU	176	24.980	32.283	21.517	1.00	15.36	A
ATOM	1277	CB	GLU	176	25.704	31.030	20.946	1.00	18.09	A
ATOM	1278	CG	GLU	176	27.166	31.377	20.557	1.00	19.94	A

27/90

ATOM	1279	CD	GLU	176	27.852	30.347	19.631	1.00	22.30	A
ATOM	1280	OE1	GLU	176	27.394	29.212	19.510	1.00	19.30	A
ATOM	1281	OE2	GLU	176	28.876	30.706	19.057	1.00	22.91	A
ATOM	1282	C	GLU	176	23.685	31.922	22.194	1.00	14.75	A
ATOM	1283	O	GLU	176	23.692	31.366	23.273	1.00	13.45	A
ATOM	1284	N	VAL	177	22.592	32.317	21.528	1.00	14.77	A
ATOM	1285	CA	VAL	177	21.206	32.133	21.981	1.00	14.56	A
ATOM	1286	CB	VAL	177	20.679	33.523	22.410	1.00	14.49	A
ATOM	1287	CG1	VAL	177	19.153	33.640	22.640	1.00	17.08	A
ATOM	1288	CG2	VAL	177	21.374	33.879	23.719	1.00	15.60	A
ATOM	1289	C	VAL	177	20.353	31.512	20.897	1.00	14.62	A
ATOM	1290	O	VAL	177	20.539	31.715	19.707	1.00	14.46	A
ATOM	1291	N	LEU	178	19.363	30.746	21.357	1.00	14.32	A
ATOM	1292	CA	LEU	178	18.320	30.220	20.471	1.00	13.86	A
ATOM	1293	CB	LEU	178	18.169	28.728	20.764	1.00	15.07	A
ATOM	1294	CG	LEU	178	19.408	27.894	20.442	1.00	16.23	A
ATOM	1295	CD1	LEU	178	19.319	26.549	21.150	1.00	18.34	A
ATOM	1296	CD2	LEU	178	19.401	27.645	18.934	1.00	18.78	A
ATOM	1297	C	LEU	178	16.975	30.837	20.793	1.00	12.81	A
ATOM	1298	O	LEU	178	16.612	30.944	21.955	1.00	13.73	A
ATOM	1299	N	ILE	179	16.246	31.142	19.701	1.00	14.16	A
ATOM	1300	CA	ILE	179	14.811	31.392	19.815	1.00	14.49	A
ATOM	1301	CB	ILE	179	14.531	32.681	19.006	1.00	15.16	A
ATOM	1302	CG2	ILE	179	13.071	33.111	19.172	1.00	15.22	A
ATOM	1303	CG1	ILE	179	15.543	33.733	19.464	1.00	15.33	A
ATOM	1304	CD1	ILE	179	15.673	34.849	18.438	1.00	16.34	A
ATOM	1305	C	ILE	179	14.094	30.242	19.148	1.00	14.72	A
ATOM	1306	O	ILE	179	14.361	29.894	18.021	1.00	14.93	A
ATOM	1307	N	GLU	180	13.193	29.649	19.894	1.00	14.19	A
ATOM	1308	CA	GLU	180	12.500	28.471	19.388	1.00	13.24	A
ATOM	1309	CB	GLU	180	12.688	27.264	20.306	1.00	14.10	A
ATOM	1310	CG	GLU	180	14.123	27.050	20.687	1.00	17.17	A
ATOM	1311	CD	GLU	180	14.295	25.735	21.393	1.00	18.55	A
ATOM	1312	OE1	GLU	180	15.458	25.354	21.528	1.00	22.04	A
ATOM	1313	OE2	GLU	180	13.317	25.121	21.818	1.00	16.37	A
ATOM	1314	C	GLU	180	11.017	28.734	19.389	1.00	14.87	A
ATOM	1315	O	GLU	180	10.429	29.281	20.330	1.00	14.44	A
ATOM	1316	N	LYS	181	10.413	28.186	18.325	1.00	12.99	A
ATOM	1317	CA	LYS	181	8.955	28.104	18.334	1.00	12.98	A
ATOM	1318	CB	LYS	181	8.544	27.143	17.220	1.00	12.73	A
ATOM	1319	CG	LYS	181	7.020	27.186	17.017	1.00	16.63	A
ATOM	1320	CD	LYS	181	6.613	26.093	16.054	1.00	18.52	A
ATOM	1321	CE	LYS	181	5.129	25.796	16.223	1.00	21.67	A
ATOM	1322	NZ	LYS	181	4.938	25.000	17.437	1.00	22.08	A
ATOM	1323	C	LYS	181	8.514	27.463	19.633	1.00	12.93	A
ATOM	1324	O	LYS	181	9.017	26.437	20.039	1.00	11.85	A
ATOM	1325	N	TRP	182	7.534	28.087	20.292	1.00	13.73	A
ATOM	1326	CA	TRP	182	6.908	27.434	21.438	1.00	14.23	A
ATOM	1327	CB	TRP	182	5.818	28.417	22.024	1.00	15.28	A
ATOM	1328	CG	TRP	182	5.296	28.044	23.401	1.00	15.98	A
ATOM	1329	CD2	TRP	182	5.937	28.224	24.639	1.00	16.30	A
ATOM	1330	CE2	TRP	182	5.054	27.601	25.648	1.00	18.19	A
ATOM	1331	CE3	TRP	182	7.134	28.824	25.057	1.00	18.26	A
ATOM	1332	CD1	TRP	182	4.091	27.380	23.684	1.00	18.22	A
ATOM	1333	NE1	TRP	182	3.946	27.105	25.007	1.00	17.08	A
ATOM	1334	CZ2	TRP	182	5.457	27.623	27.002	1.00	17.92	A
ATOM	1335	CZ3	TRP	182	7.509	28.826	26.421	1.00	19.76	A
ATOM	1336	CH2	TRP	182	6.666	28.230	27.378	1.00	17.98	A
ATOM	1337	C	TRP	182	6.209	26.131	21.036	1.00	14.87	A
ATOM	1338	O	TRP	182	5.325	26.099	20.181	1.00	15.24	A
ATOM	1339	N	LEU	183	6.596	25.090	21.764	1.00	13.62	A

28/90

ATOM	1340	CA	LEU	183	5.880	23.813	21.772	1.00	14.38	A
ATOM	1341	CB	LEU	183	6.882	22.628	21.964	1.00	14.55	A
ATOM	1342	CG	LEU	183	8.075	22.790	21.001	1.00	14.15	A
ATOM	1343	CD1	LEU	183	9.183	21.840	21.372	1.00	15.28	A
ATOM	1344	CD2	LEU	183	7.751	22.667	19.493	1.00	14.51	A
ATOM	1345	C	LEU	183	4.782	23.738	22.857	1.00	14.48	A
ATOM	1346	O	LEU	183	4.906	24.137	24.018	1.00	14.67	A
ATOM	1347	N	SER	184	3.714	23.115	22.388	1.00	14.39	A
ATOM	1348	CA	SER	184	2.496	22.949	23.187	1.00	16.48	A
ATOM	1349	CB	SER	184	1.383	22.370	22.282	1.00	17.16	A
ATOM	1350	OG	SER	184	1.552	20.948	22.128	1.00	17.81	A
ATOM	1351	C	SER	184	2.657	22.098	24.447	1.00	16.43	A
ATOM	1352	O	SER	184	1.852	22.183	25.363	1.00	17.76	A
ATOM	1353	N	GLY	185	3.659	21.221	24.416	1.00	13.38	A
ATOM	1354	CA	GLY	185	3.698	20.134	25.393	1.00	14.08	A
ATOM	1355	C	GLY	185	2.644	19.101	25.114	1.00	13.86	A
ATOM	1356	O	GLY	185	1.900	19.187	24.150	1.00	14.06	A
ATOM	1357	N	PRO	186	2.531	18.087	25.968	1.00	14.27	A
ATOM	1358	CD	PRO	186	1.549	17.044	25.717	1.00	16.62	A
ATOM	1359	CA	PRO	186	3.228	17.936	27.238	1.00	14.97	A
ATOM	1360	CB	PRO	186	2.542	16.723	27.857	1.00	15.45	A
ATOM	1361	CG	PRO	186	1.791	15.976	26.763	1.00	18.01	A
ATOM	1362	C	PRO	186	4.713	17.675	27.095	1.00	13.98	A
ATOM	1363	O	PRO	186	5.222	17.376	26.030	1.00	14.10	A
ATOM	1364	N	GLU	187	5.363	17.804	28.240	1.00	13.35	A
ATOM	1365	CA	GLU	187	6.812	17.744	28.290	1.00	12.92	A
ATOM	1366	CB	GLU	187	7.250	18.996	29.094	1.00	13.98	A
ATOM	1367	CG	GLU	187	8.745	18.924	29.333	1.00	15.51	A
ATOM	1368	CD	GLU	187	9.316	20.148	29.957	1.00	15.13	A
ATOM	1369	OE1	GLU	187	8.623	21.112	30.320	1.00	13.74	A
ATOM	1370	OE2	GLU	187	10.509	20.095	30.130	1.00	16.23	A
ATOM	1371	C	GLU	187	7.234	16.456	29.002	1.00	12.45	A
ATOM	1372	O	GLU	187	6.569	15.961	29.895	1.00	13.90	A
ATOM	1373	N	PHE	188	8.352	15.908	28.560	1.00	11.38	A
ATOM	1374	CA	PHE	188	8.857	14.593	28.942	1.00	11.52	A
ATOM	1375	CB	PHE	188	8.595	13.522	27.845	1.00	10.31	A
ATOM	1376	CG	PHE	188	7.127	13.385	27.520	1.00	12.18	A
ATOM	1377	CD1	PHE	188	6.488	14.207	26.554	1.00	12.70	A
ATOM	1378	CD2	PHE	188	6.387	12.438	28.270	1.00	11.48	A
ATOM	1379	CE1	PHE	188	5.084	14.085	26.377	1.00	12.85	A
ATOM	1380	CE2	PHE	188	5.021	12.319	28.048	1.00	11.56	A
ATOM	1381	CZ	PHE	188	4.363	13.142	27.118	1.00	13.17	A
ATOM	1382	C	PHE	188	10.368	14.692	29.116	1.00	11.74	A
ATOM	1383	O	PHE	188	11.029	15.609	28.645	1.00	12.43	A
ATOM	1384	N	THR	189	10.890	13.746	29.877	1.00	12.40	A
ATOM	1385	CA	THR	189	12.349	13.589	29.923	1.00	12.40	A
ATOM	1386	CB	THR	189	12.966	14.421	31.050	1.00	13.83	A
ATOM	1387	OG1	THR	189	14.381	14.456	30.804	1.00	13.95	A
ATOM	1388	CG2	THR	189	12.708	13.844	32.455	1.00	13.54	A
ATOM	1389	C	THR	189	12.675	12.112	30.044	1.00	12.12	A
ATOM	1390	O	THR	189	11.893	11.355	30.569	1.00	12.43	A
ATOM	1391	N	VAL	190	13.816	11.705	29.439	1.00	11.50	A
ATOM	1392	CA	VAL	190	14.067	10.264	29.398	1.00	12.22	A
ATOM	1393	CB	VAL	190	13.911	9.743	27.971	1.00	12.96	A
ATOM	1394	CG1	VAL	190	14.202	8.253	27.835	1.00	12.10	A
ATOM	1395	CG2	VAL	190	12.521	10.085	27.450	1.00	12.78	A
ATOM	1396	C	VAL	190	15.486	10.069	29.781	1.00	11.73	A
ATOM	1397	O	VAL	190	16.398	10.640	29.183	1.00	11.92	A
ATOM	1398	N	ALA	191	15.645	9.267	30.814	1.00	12.55	A
ATOM	1399	CA	ALA	191	17.011	8.986	31.276	1.00	12.62	A
ATOM	1400	CB	ALA	191	17.002	8.669	32.740	1.00	12.08	A

29/90

ATOM	1401	C	ALA	191	17.634	7.786	30.621	1.00	14.24	A
ATOM	1402	O	ALA	191	16.954	6.849	30.244	1.00	15.40	A
ATOM	1403	N	ILE	192	18.963	7.825	30.515	1.00	14.27	A
ATOM	1404	CA	ILE	192	19.706	6.724	29.920	1.00	15.05	A
ATOM	1405	CB	ILE	192	20.289	7.195	28.553	1.00	16.89	A
ATOM	1406	CG2	ILE	192	19.265	6.991	27.457	1.00	21.10	A
ATOM	1407	CG1	ILE	192	20.673	8.666	28.410	1.00	21.84	A
ATOM	1408	CD1	ILE	192	19.559	9.591	27.792	1.00	20.90	A
ATOM	1409	C	ILE	192	20.774	6.264	30.897	1.00	14.81	A
ATOM	1410	O	ILE	192	21.407	7.046	31.578	1.00	11.08	A
ATOM	1411	N	LEU	193	20.891	4.939	31.012	1.00	14.74	A
ATOM	1412	CA	LEU	193	21.882	4.407	31.967	1.00	14.06	A
ATOM	1413	CB	LEU	193	21.229	3.910	33.261	1.00	13.87	A
ATOM	1414	CG	LEU	193	22.116	3.276	34.354	1.00	14.48	A
ATOM	1415	CD1	LEU	193	23.237	4.218	34.802	1.00	15.03	A
ATOM	1416	CD2	LEU	193	21.214	2.811	35.523	1.00	15.41	A
ATOM	1417	C	LEU	193	22.467	3.266	31.231	1.00	15.13	A
ATOM	1418	O	LEU	193	21.865	2.207	31.078	1.00	14.97	A
ATOM	1419	N	GLY	194	23.675	3.527	30.746	1.00	17.04	A
ATOM	1420	CA	GLY	194	24.348	2.504	29.930	1.00	18.43	A
ATOM	1421	C	GLY	194	23.609	2.201	28.639	1.00	20.30	A
ATOM	1422	O	GLY	194	23.310	3.061	27.816	1.00	20.86	A
ATOM	1423	N	GLU	195	23.365	0.906	28.498	1.00	21.07	A
ATOM	1424	CA	GLU	195	22.620	0.425	27.340	1.00	22.81	A
ATOM	1425	CB	GLU	195	22.993	-1.032	27.025	1.00	26.03	A
ATOM	1426	CG	GLU	195	24.501	-1.318	26.828	1.00	29.64	A
ATOM	1427	CD	GLU	195	24.694	-2.663	26.144	1.00	32.75	A
ATOM	1428	OE1	GLU	195	25.540	-3.451	26.595	1.00	34.78	A
ATOM	1429	OE2	GLU	195	24.005	-2.918	25.147	1.00	34.80	A
ATOM	1430	C	GLU	195	21.130	0.484	27.541	1.00	22.30	A
ATOM	1431	O	GLU	195	20.342	0.059	26.715	1.00	22.99	A
ATOM	1432	N	GLU	196	20.743	0.987	28.702	1.00	21.57	A
ATOM	1433	CA	GLU	196	19.303	0.988	28.912	1.00	21.29	A
ATOM	1434	CB	GLU	196	18.984	0.366	30.257	1.00	23.88	A
ATOM	1435	CG	GLU	196	17.647	-0.369	30.258	1.00	27.85	A
ATOM	1436	CD	GLU	196	17.860	-1.676	29.528	1.00	29.02	A
ATOM	1437	OE1	GLU	196	18.726	-2.451	29.943	1.00	32.05	A
ATOM	1438	OE2	GLU	196	17.182	-1.902	28.527	1.00	32.30	A
ATOM	1439	C	GLU	196	18.730	2.378	28.941	1.00	20.69	A
ATOM	1440	O	GLU	196	19.288	3.310	29.503	1.00	18.79	A
ATOM	1441	N	ILE	197	17.535	2.445	28.343	1.00	19.63	A
ATOM	1442	CA	ILE	197	16.718	3.635	28.480	1.00	20.74	A
ATOM	1443	CB	ILE	197	16.119	3.820	27.110	1.00	21.21	A
ATOM	1444	CG2	ILE	197	15.331	2.620	26.551	1.00	23.81	A
ATOM	1445	CG1	ILE	197	15.340	5.089	26.959	1.00	22.78	A
ATOM	1446	CD1	ILE	197	15.696	5.536	25.544	1.00	25.24	A
ATOM	1447	C	ILE	197	15.686	3.456	29.567	1.00	19.62	A
ATOM	1448	O	ILE	197	14.989	2.448	29.595	1.00	19.75	A
ATOM	1449	N	LEU	198	15.638	4.431	30.487	1.00	18.46	A
ATOM	1450	CA	LEU	198	14.748	4.328	31.652	1.00	18.59	A
ATOM	1451	CB	LEU	198	15.390	5.113	32.816	1.00	19.43	A
ATOM	1452	CG	LEU	198	16.024	4.233	33.904	1.00	21.94	A
ATOM	1453	CD1	LEU	198	16.776	3.033	33.351	1.00	20.39	A
ATOM	1454	CD2	LEU	198	16.850	5.086	34.862	1.00	21.20	A
ATOM	1455	C	LEU	198	13.352	4.864	31.341	1.00	17.53	A
ATOM	1456	O	LEU	198	13.130	5.617	30.403	1.00	15.26	A
ATOM	1457	N	PRO	199	12.370	4.440	32.161	1.00	17.93	A
ATOM	1458	CD	PRO	199	12.449	3.447	33.218	1.00	17.77	A
ATOM	1459	CA	PRO	199	11.001	4.939	31.954	1.00	16.95	A
ATOM	1460	CB	PRO	199	10.316	4.460	33.240	1.00	17.51	A
ATOM	1461	CG	PRO	199	10.992	3.131	33.526	1.00	18.31	A

30/90

ATOM	1462	C	PRO	199	10.913	6.457	31.870	1.00	16.65	A
ATOM	1463	O	PRO	199	11.339	7.143	32.793	1.00	15.24	A
ATOM	1464	N	SER	200	10.322	6.951	30.761	1.00	15.16	A
ATOM	1465	CA	SER	200	10.118	8.406	30.659	1.00	15.81	A
ATOM	1466	CB	SER	200	9.453	8.829	29.343	1.00	16.25	A
ATOM	1467	OG	SER	200	8.067	8.506	29.328	1.00	18.91	A
ATOM	1468	C	SER	200	9.294	8.996	31.784	1.00	16.16	A
ATOM	1469	O	SER	200	8.475	8.326	32.403	1.00	16.70	A
ATOM	1470	N	ILE	201	9.527	10.292	31.997	1.00	15.51	A
ATOM	1471	CA	ILE	201	8.718	11.017	32.948	1.00	14.48	A
ATOM	1472	CB	ILE	201	9.641	11.643	34.033	1.00	14.22	A
ATOM	1473	CG2	ILE	201	8.885	12.608	34.994	1.00	14.55	A
ATOM	1474	CG1	ILE	201	10.437	10.535	34.744	1.00	15.08	A
ATOM	1475	CD1	ILE	201	11.730	10.963	35.480	1.00	13.59	A
ATOM	1476	C	ILE	201	8.032	12.108	32.196	1.00	14.54	A
ATOM	1477	O	ILE	201	8.643	12.782	31.394	1.00	13.04	A
ATOM	1478	N	ARG	202	6.745	12.255	32.511	1.00	12.19	A
ATOM	1479	CA	ARG	202	6.061	13.467	32.075	1.00	12.63	A
ATOM	1480	CB	ARG	202	4.592	13.064	31.805	1.00	13.29	A
ATOM	1481	CG	ARG	202	3.790	14.169	31.131	1.00	16.96	A
ATOM	1482	CD	ARG	202	2.343	13.795	30.854	1.00	15.17	A
ATOM	1483	NE	ARG	202	1.608	15.053	30.823	1.00	22.04	A
ATOM	1484	CZ	ARG	202	0.556	15.058	29.997	1.00	21.42	A
ATOM	1485	NH1	ARG	202	-0.226	16.122	29.909	1.00	20.63	A
ATOM	1486	NH2	ARG	202	0.299	13.985	29.241	1.00	22.41	A
ATOM	1487	C	ARG	202	6.124	14.507	33.159	1.00	13.03	A
ATOM	1488	O	ARG	202	5.964	14.216	34.334	1.00	12.29	A
ATOM	1489	N	ILE	203	6.385	15.743	32.756	1.00	12.76	A
ATOM	1490	CA	ILE	203	6.628	16.827	33.719	1.00	12.53	A
ATOM	1491	CB	ILE	203	8.031	17.422	33.489	1.00	13.00	A
ATOM	1492	CG2	ILE	203	8.328	18.542	34.447	1.00	13.91	A
ATOM	1493	CG1	ILE	203	9.086	16.297	33.728	1.00	14.93	A
ATOM	1494	CD1	ILE	203	10.444	16.633	33.126	1.00	14.61	A
ATOM	1495	C	ILE	203	5.582	17.931	33.484	1.00	14.01	A
ATOM	1496	O	ILE	203	5.406	18.416	32.367	1.00	13.92	A
ATOM	1497	N	GLN	204	4.928	18.314	34.603	1.00	13.56	A
ATOM	1498	CA	GLN	204	3.893	19.369	34.531	1.00	17.13	A
ATOM	1499	CB	GLN	204	2.441	18.825	34.679	1.00	18.22	A
ATOM	1500	CG	GLN	204	1.419	19.859	34.121	1.00	22.87	A
ATOM	1501	CD	GLN	204	-0.027	19.405	34.273	1.00	25.81	A
ATOM	1502	OE1	GLN	204	-0.456	18.363	33.790	1.00	27.74	A
ATOM	1503	NE2	GLN	204	-0.808	20.281	34.940	1.00	26.34	A
ATOM	1504	C	GLN	204	4.138	20.468	35.514	1.00	16.32	A
ATOM	1505	O	GLN	204	3.744	20.390	36.676	1.00	15.53	A
ATOM	1506	N	PRO	205	4.826	21.516	35.018	1.00	16.25	A
ATOM	1507	CD	PRO	205	5.382	21.612	33.645	1.00	18.14	A
ATOM	1508	CA	PRO	205	5.057	22.696	35.836	1.00	16.53	A
ATOM	1509	CB	PRO	205	5.989	23.578	34.991	1.00	17.84	A
ATOM	1510	CG	PRO	205	6.034	22.983	33.584	1.00	18.36	A
ATOM	1511	C	PRO	205	3.761	23.454	36.128	1.00	17.20	A
ATOM	1512	O	PRO	205	2.799	23.396	35.393	1.00	15.96	A
ATOM	1513	N	SER	206	3.784	24.159	37.240	1.00	15.88	A
ATOM	1514	CA	SER	206	2.504	24.819	37.535	1.00	19.50	A
ATOM	1515	CB	SER	206	2.376	25.092	39.020	1.00	19.61	A
ATOM	1516	OG	SER	206	3.429	25.932	39.479	1.00	21.49	A
ATOM	1517	C	SER	206	2.343	26.091	36.740	1.00	20.02	A
ATOM	1518	O	SER	206	1.223	26.505	36.485	1.00	22.52	A
ATOM	1519	N	GLY	207	3.516	26.653	36.355	1.00	19.77	A
ATOM	1520	CA	GLY	207	3.565	27.804	35.443	1.00	19.32	A
ATOM	1521	C	GLY	207	3.658	27.502	33.944	1.00	19.72	A
ATOM	1522	O	GLY	207	3.289	26.441	33.450	1.00	20.04	A

ATOM	1523	N	THR	208	4.185	28.507	33.236	1.00	19.83	A
ATOM	1524	CA	THR	208	4.217	28.360	31.784	1.00	20.50	A
ATOM	1525	CB	THR	208	4.402	29.690	31.064	1.00	21.50	A
ATOM	1526	OG1	THR	208	5.631	30.255	31.543	1.00	21.79	A
ATOM	1527	CG2	THR	208	3.214	30.663	31.243	1.00	20.99	A
ATOM	1528	C	THR	208	5.357	27.474	31.300	1.00	19.60	A
ATOM	1529	O	THR	208	5.256	26.918	30.221	1.00	20.63	A
ATOM	1530	N	PHE	209	6.414	27.393	32.129	1.00	17.66	A
ATOM	1531	CA	PHE	209	7.335	26.305	31.759	1.00	16.22	A
ATOM	1532	CB	PHE	209	8.330	26.755	30.630	1.00	15.13	A
ATOM	1533	CG	PHE	209	9.363	27.797	30.978	1.00	14.86	A
ATOM	1534	CD1	PHE	209	9.004	29.155	31.117	1.00	14.92	A
ATOM	1535	CD2	PHE	209	10.716	27.417	31.119	1.00	14.90	A
ATOM	1536	CE1	PHE	209	9.976	30.128	31.410	1.00	16.14	A
ATOM	1537	CE2	PHE	209	11.706	28.375	31.395	1.00	15.87	A
ATOM	1538	CZ	PHE	209	11.323	29.748	31.548	1.00	14.63	A
ATOM	1539	O	PHE	209	8.087	25.721	32.910	1.00	14.85	A
ATOM	1540	O	PHE	209	7.928	26.112	34.056	1.00	14.79	A
ATOM	1541	N	TYR	210	8.913	24.719	32.565	1.00	12.80	A
ATOM	1542	CA	TYR	210	9.729	24.110	33.590	1.00	13.05	A
ATOM	1543	CB	TYR	210	9.971	22.628	33.129	1.00	12.10	A
ATOM	1544	CG	TYR	210	10.541	21.708	34.210	1.00	12.24	A
ATOM	1545	CD1	TYR	210	10.190	21.766	35.574	1.00	12.46	A
ATOM	1546	CE1	TYR	210	10.718	20.833	36.480	1.00	12.63	A
ATOM	1547	CD2	TYR	210	11.438	20.709	33.771	1.00	12.06	A
ATOM	1548	CE2	TYR	210	11.966	19.782	34.663	1.00	11.28	A
ATOM	1549	CZ	TYR	210	11.607	19.820	36.012	1.00	14.32	A
ATOM	1550	OH	TYR	210	12.086	18.835	36.860	1.00	11.12	A
ATOM	1551	C	TYR	210	10.980	24.887	33.894	1.00	12.36	A
ATOM	1552	O	TYR	210	12.059	24.539	33.442	1.00	11.96	A
ATOM	1553	N	ASP	211	10.788	25.926	34.730	1.00	12.29	A
ATOM	1554	CA	ASP	211	11.817	26.912	34.998	1.00	12.59	A
ATOM	1555	CB	ASP	211	11.297	28.342	35.100	1.00	15.38	A
ATOM	1556	CG	ASP	211	10.268	28.578	36.171	1.00	15.51	A
ATOM	1557	OD1	ASP	211	10.005	27.704	36.989	1.00	14.40	A
ATOM	1558	OD2	ASP	211	9.709	29.674	36.167	1.00	18.54	A
ATOM	1559	C	ASP	211	12.615	26.573	36.242	1.00	12.60	A
ATOM	1560	O	ASP	211	12.338	25.534	36.820	1.00	12.11	A
ATOM	1561	N	TYR	212	13.564	27.443	36.608	1.00	12.29	A
ATOM	1562	CA	TYR	212	14.380	27.095	37.803	1.00	13.11	A
ATOM	1563	CB	TYR	212	15.461	28.176	38.025	1.00	13.46	A
ATOM	1564	CG	TYR	212	16.502	27.795	39.044	1.00	15.08	A
ATOM	1565	CD1	TYR	212	16.258	28.064	40.402	1.00	13.79	A
ATOM	1566	CE1	TYR	212	17.247	27.805	41.371	1.00	15.98	A
ATOM	1567	CD2	TYR	212	17.726	27.224	38.637	1.00	13.96	A
ATOM	1568	CE2	TYR	212	18.711	26.933	39.587	1.00	16.49	A
ATOM	1569	CZ	TYR	212	18.474	27.243	40.959	1.00	16.39	A
ATOM	1570	OH	TYR	212	19.477	27.027	41.879	1.00	16.77	A
ATOM	1571	C	TYR	212	13.545	26.865	39.047	1.00	13.93	A
ATOM	1572	O	TYR	212	13.747	25.900	39.789	1.00	12.61	A
ATOM	1573	N	GLU	213	12.549	27.763	39.180	1.00	13.97	A
ATOM	1574	CA	GLU	213	11.637	27.564	40.313	1.00	15.60	A
ATOM	1575	CB	GLU	213	10.647	28.738	40.379	1.00	17.27	A
ATOM	1576	CG	GLU	213	10.211	28.818	41.835	1.00	22.67	A
ATOM	1577	CD	GLU	213	8.741	28.724	41.945	1.00	26.77	A
ATOM	1578	OE1	GLU	213	8.227	27.595	42.006	1.00	29.44	A
ATOM	1579	OE2	GLU	213	8.102	29.781	42.028	1.00	28.82	A
ATOM	1580	C	GLU	213	10.896	26.258	40.345	1.00	14.70	A
ATOM	1581	O	GLU	213	10.906	25.552	41.338	1.00	15.43	A
ATOM	1582	N	ALA	214	10.334	25.903	39.174	1.00	14.97	A
ATOM	1583	CA	ALA	214	9.616	24.647	39.035	1.00	14.11	A

ATOM	1584	CB	ALA	214	8.925	24.535	37.669	1.00	13.14	A
ATOM	1585	C	ALA	214	10.494	23.453	39.249	1.00	12.82	A
ATOM	1586	O	ALA	214	10.079	22.443	39.779	1.00	14.11	A
ATOM	1587	N	LYS	215	11.757	23.636	38.860	1.00	12.62	A
ATOM	1588	CA	LYS	215	12.661	22.497	38.952	1.00	12.03	A
ATOM	1589	CB	LYS	215	13.921	22.736	38.096	1.00	10.83	A
ATOM	1590	CG	LYS	215	13.640	22.480	36.595	1.00	9.58	A
ATOM	1591	CD	LYS	215	14.912	22.800	35.717	1.00	10.32	A
ATOM	1592	CE	LYS	215	14.502	22.275	34.307	1.00	9.67	A
ATOM	1593	NZ	LYS	215	15.408	22.702	33.216	1.00	9.97	A
ATOM	1594	C	LYS	215	13.085	22.210	40.360	1.00	12.17	A
ATOM	1595	O	LYS	215	13.236	21.052	40.723	1.00	12.39	A
ATOM	1596	N	TYR	216	13.276	23.275	41.132	1.00	12.37	A
ATOM	1597	CA	TYR	216	14.019	23.096	42.392	1.00	12.72	A
ATOM	1598	CB	TYR	216	15.388	23.781	42.286	1.00	12.51	A
ATOM	1599	CG	TYR	216	16.165	23.207	41.115	1.00	10.41	A
ATOM	1600	CD1	TYR	216	16.448	21.821	41.030	1.00	12.49	A
ATOM	1601	CE1	TYR	216	17.183	21.349	39.917	1.00	12.94	A
ATOM	1602	CD2	TYR	216	16.594	24.110	40.122	1.00	13.08	A
ATOM	1603	CE2	TYR	216	17.344	23.632	39.001	1.00	10.75	A
ATOM	1604	CZ	TYR	216	17.605	22.256	38.929	1.00	11.75	A
ATOM	1605	OH	TYR	216	18.252	21.743	37.803	1.00	12.68	A
ATOM	1606	C	TYR	216	13.387	23.636	43.642	1.00	14.85	A
ATOM	1607	O	TYR	216	13.796	23.273	44.735	1.00	13.78	A
ATOM	1608	N	LEU	217	12.446	24.584	43.421	1.00	15.69	A
ATOM	1609	CA	LEU	217	12.025	25.408	44.588	1.00	16.95	A
ATOM	1610	CB	LEU	217	12.351	26.866	44.307	1.00	15.69	A
ATOM	1611	CG	LEU	217	13.835	27.156	44.030	1.00	15.40	A
ATOM	1612	CD1	LEU	217	14.008	28.609	43.675	1.00	14.35	A
ATOM	1613	CD2	LEU	217	14.770	26.729	45.162	1.00	15.23	A
ATOM	1614	C	LEU	217	10.550	25.337	44.892	1.00	19.38	A
ATOM	1615	O	LEU	217	10.028	25.906	45.854	1.00	22.05	A
ATOM	1616	N	SER	218	9.862	24.614	44.020	1.00	20.18	A
ATOM	1617	CA	SER	218	8.427	24.424	44.109	1.00	20.77	A
ATOM	1618	CB	SER	218	7.864	24.554	42.707	1.00	20.73	A
ATOM	1619	OG	SER	218	6.444	24.560	42.775	1.00	19.99	A
ATOM	1620	C	SER	218	8.020	23.050	44.575	1.00	21.98	A
ATOM	1621	O	SER	218	8.577	22.029	44.170	1.00	22.09	A
ATOM	1622	N	ASP	219	6.929	23.093	45.388	1.00	21.70	A
ATOM	1623	CA	ASP	219	6.157	21.881	45.654	1.00	24.28	A
ATOM	1624	CB	ASP	219	5.695	21.882	47.147	1.00	26.98	A
ATOM	1625	CG	ASP	219	4.840	20.658	47.499	1.00	30.57	A
ATOM	1626	OD1	ASP	219	3.600	20.748	47.385	1.00	32.36	A
ATOM	1627	OD2	ASP	219	5.397	19.613	47.859	1.00	32.46	A
ATOM	1628	C	ASP	219	5.004	21.676	44.689	1.00	23.35	A
ATOM	1629	O	ASP	219	4.279	20.705	44.795	1.00	25.47	A
ATOM	1630	N	GLU	220	4.844	22.595	43.741	1.00	21.85	A
ATOM	1631	CA	GLU	220	3.690	22.562	42.828	1.00	20.19	A
ATOM	1632	CB	GLU	220	3.227	23.986	42.486	1.00	22.36	A
ATOM	1633	CG	GLU	220	2.797	24.821	43.710	1.00	26.22	A
ATOM	1634	CD	GLU	220	2.368	26.234	43.317	1.00	27.38	A
ATOM	1635	OE1	GLU	220	2.557	27.141	44.139	1.00	30.80	A
ATOM	1636	OE2	GLU	220	1.865	26.444	42.203	1.00	29.05	A
ATOM	1637	C	GLU	220	3.889	21.797	41.537	1.00	19.13	A
ATOM	1638	O	GLU	220	2.958	21.479	40.807	1.00	17.31	A
ATOM	1639	N	THR	221	5.156	21.511	41.259	1.00	16.62	A
ATOM	1640	CA	THR	221	5.411	20.768	40.020	1.00	16.99	A
ATOM	1641	CB	THR	221	6.927	20.711	39.800	1.00	16.77	A
ATOM	1642	OG1	THR	221	7.433	22.041	39.826	1.00	16.09	A
ATOM	1643	CG2	THR	221	7.230	20.065	38.429	1.00	15.53	A
ATOM	1644	C	THR	221	4.926	19.355	40.147	1.00	18.20	A

33/90

ATOM	1645	O	THR	221	5.177	18.742	41.174	1.00	18.69	A
ATOM	1646	N	GLN	222	4.268	18.871	39.079	1.00	17.53	A
ATOM	1647	CA	GLN	222	3.835	17.471	39.099	1.00	17.98	A
ATOM	1648	CB	GLN	222	2.387	17.386	38.605	1.00	18.24	A
ATOM	1649	CG	GLN	222	1.494	18.172	39.581	1.00	19.69	A
ATOM	1650	CD	GLN	222	0.077	18.309	39.095	1.00	20.24	A
ATOM	1651	OE1	GLN	222	-0.687	17.364	39.113	1.00	20.99	A
ATOM	1652	NE2	GLN	222	-0.279	19.547	38.681	1.00	21.32	A
ATOM	1653	C	GLN	222	4.714	16.676	38.155	1.00	16.01	A
ATOM	1654	O	GLN	222	5.227	17.220	37.193	1.00	18.43	A
ATOM	1655	N	TYR	223	4.878	15.410	38.476	1.00	16.00	A
ATOM	1656	CA	TYR	223	5.685	14.515	37.645	1.00	15.20	A
ATOM	1657	CB	TYR	223	7.048	14.140	38.291	1.00	16.92	A
ATOM	1658	CG	TYR	223	7.805	15.337	38.817	1.00	16.06	A
ATOM	1659	CD1	TYR	223	8.748	16.014	38.016	1.00	16.45	A
ATOM	1660	CE1	TYR	223	9.439	17.131	38.545	1.00	16.65	A
ATOM	1661	CD2	TYR	223	7.536	15.768	40.139	1.00	17.52	A
ATOM	1662	CE2	TYR	223	8.202	16.898	40.658	1.00	18.79	A
ATOM	1663	CZ	TYR	223	9.152	17.574	39.860	1.00	18.06	A
ATOM	1664	OH	TYR	223	9.763	18.688	40.380	1.00	17.20	A
ATOM	1665	C	TYR	223	4.947	13.214	37.571	1.00	16.26	A
ATOM	1666	O	TYR	223	4.456	12.762	38.577	1.00	17.75	A
ATOM	1667	N	PHE	224	4.903	12.627	36.384	1.00	15.25	A
ATOM	1668	CA	PHE	224	4.234	11.357	36.196	1.00	15.64	A
ATOM	1669	CB	PHE	224	3.047	11.566	35.238	1.00	16.11	A
ATOM	1670	CG	PHE	224	2.124	12.654	35.711	1.00	17.67	A
ATOM	1671	CD1	PHE	224	1.153	12.352	36.695	1.00	19.17	A
ATOM	1672	CD2	PHE	224	2.240	13.957	35.194	1.00	18.64	A
ATOM	1673	CE1	PHE	224	0.312	13.392	37.168	1.00	19.80	A
ATOM	1674	CE2	PHE	224	1.384	14.985	35.657	1.00	19.99	A
ATOM	1675	CZ	PHE	224	0.425	14.704	36.645	1.00	19.04	A
ATOM	1676	C	PHE	224	5.202	10.360	35.590	1.00	16.83	A
ATOM	1677	O	PHE	224	5.714	10.530	34.496	1.00	15.71	A
ATOM	1678	N	CYS	225	5.433	9.299	36.358	1.00	18.46	A
ATOM	1679	CA	CYS	225	6.333	8.190	35.990	1.00	18.43	A
ATOM	1680	CB	CYS	225	7.766	8.379	36.544	1.00	18.34	A
ATOM	1681	SG	CYS	225	8.981	7.223	35.785	1.00	19.38	A
ATOM	1682	C	CYS	225	5.784	6.873	36.509	1.00	19.92	A
ATOM	1683	O	CYS	225	5.808	6.638	37.709	1.00	19.29	A
ATOM	1684	N	PRO	226	5.197	6.073	35.612	1.00	19.86	A
ATOM	1685	CD	PRO	226	4.385	4.927	36.038	1.00	21.16	A
ATOM	1686	CA	PRO	226	5.148	6.261	34.150	1.00	20.17	A
ATOM	1687	CB	PRO	226	4.496	4.939	33.703	1.00	20.81	A
ATOM	1688	CG	PRO	226	3.519	4.619	34.817	1.00	22.29	A
ATOM	1689	C	PRO	226	4.327	7.466	33.666	1.00	18.72	A
ATOM	1690	O	PRO	226	3.438	8.046	34.284	1.00	19.47	A
ATOM	1691	N	ALA	227	4.729	7.840	32.456	1.00	18.42	A
ATOM	1692	CA	ALA	227	4.335	9.086	31.844	1.00	18.44	A
ATOM	1693	CB	ALA	227	5.315	9.397	30.715	1.00	17.58	A
ATOM	1694	C	ALA	227	2.930	9.090	31.282	1.00	18.44	A
ATOM	1695	O	ALA	227	2.393	10.136	30.983	1.00	18.56	A
ATOM	1696	N	GLY	228	2.368	7.886	31.153	1.00	19.04	A
ATOM	1697	CA	GLY	228	0.972	7.732	30.691	1.00	19.27	A
ATOM	1698	C	GLY	228	0.834	7.675	29.185	1.00	19.94	A
ATOM	1699	O	GLY	228	-0.230	7.799	28.617	1.00	19.66	A
ATOM	1700	N	LEU	229	1.971	7.455	28.535	1.00	18.86	A
ATOM	1701	CA	LEU	229	1.861	7.192	27.117	1.00	19.54	A
ATOM	1702	CB	LEU	229	3.264	7.349	26.517	1.00	20.35	A
ATOM	1703	CG	LEU	229	3.837	8.738	26.688	1.00	19.86	A
ATOM	1704	CD1	LEU	229	5.296	8.736	26.230	1.00	20.79	A
ATOM	1705	CD2	LEU	229	3.032	9.709	25.836	1.00	20.05	A

ATOM	1706	C	LEU	229	1.426	5.757	26.916	1.00	21.00	A
ATOM	1707	O	LEU	229	1.720	4.887	27.734	1.00	20.79	A
ATOM	1708	N	GLU	230	0.732	5.556	25.789	1.00	21.68	A
ATOM	1709	CA	GLU	230	0.637	4.185	25.256	1.00	24.25	A
ATOM	1710	CB	GLU	230	-0.115	4.194	23.928	1.00	26.27	A
ATOM	1711	CG	GLU	230	-1.557	3.712	23.961	1.00	29.65	A
ATOM	1712	CD	GLU	230	-2.422	4.540	24.892	1.00	31.62	A
ATOM	1713	OE1	GLU	230	-3.058	3.953	25.767	1.00	33.89	A
ATOM	1714	OE2	GLU	230	-2.478	5.764	24.740	1.00	32.58	A
ATOM	1715	C	GLU	230	1.960	3.545	24.971	1.00	24.57	A
ATOM	1716	O	GLU	230	2.956	4.201	24.698	1.00	24.88	A
ATOM	1717	N	ALA	231	1.931	2.214	25.054	1.00	24.52	A
ATOM	1718	CA	ALA	231	3.154	1.430	24.916	1.00	25.20	A
ATOM	1719	CB	ALA	231	2.822	-0.077	24.918	1.00	25.67	A
ATOM	1720	C	ALA	231	3.937	1.745	23.656	1.00	24.90	A
ATOM	1721	O	ALA	231	5.141	1.936	23.686	1.00	25.09	A
ATOM	1722	N	SER	232	3.187	1.844	22.543	1.00	24.92	A
ATOM	1723	CA	SER	232	3.815	2.260	21.278	1.00	24.64	A
ATOM	1724	CB	SER	232	2.844	2.162	20.084	1.00	25.04	A
ATOM	1725	OG	SER	232	1.704	3.045	20.196	1.00	25.12	A
ATOM	1726	C	SER	232	4.415	3.651	21.323	1.00	24.75	A
ATOM	1727	O	SER	232	5.472	3.900	20.753	1.00	23.99	A
ATOM	1728	N	GLN	233	3.699	4.527	22.041	1.00	23.55	A
ATOM	1729	CA	GLN	233	4.221	5.891	22.191	1.00	23.16	A
ATOM	1730	CB	GLN	233	3.108	6.841	22.701	1.00	24.10	A
ATOM	1731	CG	GLN	233	1.819	6.867	21.839	1.00	24.09	A
ATOM	1732	CD	GLN	233	0.845	7.875	22.449	1.00	24.33	A
ATOM	1733	OE1	GLN	233	0.525	8.905	21.875	1.00	26.07	A
ATOM	1734	NE2	GLN	233	0.413	7.561	23.661	1.00	22.87	A
ATOM	1735	C	GLN	233	5.448	6.008	23.086	1.00	22.32	A
ATOM	1736	O	GLN	233	6.427	6.680	22.770	1.00	20.93	A
ATOM	1737	N	GLU	234	5.401	5.282	24.212	1.00	21.22	A
ATOM	1738	CA	GLU	234	6.629	5.141	25.002	1.00	20.46	A
ATOM	1739	CB	GLU	234	6.437	4.230	26.214	1.00	19.97	A
ATOM	1740	CG	GLU	234	7.703	4.143	27.102	1.00	19.18	A
ATOM	1741	CD	GLU	234	8.089	5.411	27.850	1.00	19.66	A
ATOM	1742	OE1	GLU	234	9.161	5.441	28.458	1.00	19.01	A
ATOM	1743	OE2	GLU	234	7.341	6.373	27.848	1.00	18.94	A
ATOM	1744	C	GLU	234	7.784	4.608	24.152	1.00	21.21	A
ATOM	1745	O	GLU	234	8.861	5.159	24.152	1.00	20.20	A
ATOM	1746	N	ALA	235	7.478	3.580	23.352	1.00	20.33	A
ATOM	1747	CA	ALA	235	8.536	3.005	22.511	1.00	20.60	A
ATOM	1748	CB	ALA	235	8.083	1.708	21.843	1.00	20.09	A
ATOM	1749	C	ALA	235	9.146	3.895	21.455	1.00	20.29	A
ATOM	1750	O	ALA	235	10.357	3.882	21.290	1.00	19.67	A
ATOM	1751	N	ASN	236	8.275	4.667	20.757	1.00	20.44	A
ATOM	1752	CA	ASN	236	8.628	5.720	19.794	1.00	21.46	A
ATOM	1753	CB	ASN	236	7.330	6.476	19.313	1.00	24.30	A
ATOM	1754	CG	ASN	236	7.552	7.867	18.638	1.00	27.44	A
ATOM	1755	OD1	ASN	236	8.651	8.397	18.514	1.00	29.57	A
ATOM	1756	ND2	ASN	236	6.433	8.499	18.213	1.00	28.88	A
ATOM	1757	C	ASN	236	9.572	6.673	20.477	1.00	20.43	A
ATOM	1758	O	ASN	236	10.613	7.015	19.954	1.00	19.04	A
ATOM	1759	N	LEU	237	9.151	7.086	21.678	1.00	18.02	A
ATOM	1760	CA	LEU	237	9.924	8.107	22.418	1.00	17.66	A
ATOM	1761	CB	LEU	237	9.168	8.457	23.726	1.00	15.70	A
ATOM	1762	CG	LEU	237	9.913	9.448	24.656	1.00	13.93	A
ATOM	1763	CD1	LEU	237	10.297	10.782	24.001	1.00	13.03	A
ATOM	1764	CD2	LEU	237	8.992	9.759	25.833	1.00	12.36	A
ATOM	1765	C	LEU	237	11.310	7.590	22.737	1.00	17.11	A
ATOM	1766	O	LEU	237	12.302	8.249	22.478	1.00	17.55	A

ATOM	1767	N	GLN	238	11.351	6.350	23.255	1.00	18.35	A
ATOM	1768	CA	GLN	238	12.635	5.747	23.623	1.00	19.12	A
ATOM	1769	CB	GLN	238	12.411	4.403	24.329	1.00	20.22	A
ATOM	1770	CG	GLN	238	11.439	4.572	25.497	1.00	23.53	A
ATOM	1771	CD	GLN	238	11.926	4.015	26.786	1.00	26.13	A
ATOM	1772	OE1	GLN	238	12.212	4.764	27.718	1.00	29.91	A
ATOM	1773	NE2	GLN	238	11.944	2.684	26.837	1.00	25.69	A
ATOM	1774	C	GLN	238	13.541	5.569	22.403	1.00	18.40	A
ATOM	1775	O	GLN	238	14.753	5.747	22.446	1.00	17.85	A
ATOM	1776	N	ALA	239	12.887	5.255	21.286	1.00	18.34	A
ATOM	1777	CA	ALA	239	13.640	5.076	20.043	1.00	18.61	A
ATOM	1778	CB	ALA	239	12.800	4.477	18.905	1.00	19.89	A
ATOM	1779	C	ALA	239	14.248	6.336	19.522	1.00	18.25	A
ATOM	1780	O	ALA	239	15.406	6.377	19.148	1.00	18.27	A
ATOM	1781	N	LEU	240	13.431	7.408	19.568	1.00	17.37	A
ATOM	1782	CA	LEU	240	13.923	8.757	19.290	1.00	16.03	A
ATOM	1783	CB	LEU	240	12.720	9.713	19.415	1.00	17.30	A
ATOM	1784	CG	LEU	240	13.063	11.202	19.444	1.00	18.48	A
ATOM	1785	CD1	LEU	240	13.813	11.578	18.185	1.00	18.79	A
ATOM	1786	CD2	LEU	240	11.747	11.959	19.572	1.00	19.86	A
ATOM	1787	C	LEU	240	15.050	9.196	20.221	1.00	15.19	A
ATOM	1788	O	LEU	240	16.073	9.678	19.751	1.00	13.85	A
ATOM	1789	N	VAL	241	14.864	8.989	21.523	1.00	12.90	A
ATOM	1790	CA	VAL	241	15.926	9.350	22.480	1.00	13.05	A
ATOM	1791	CB	VAL	241	15.443	9.091	23.892	1.00	11.20	A
ATOM	1792	CG1	VAL	241	16.603	9.123	24.893	1.00	11.96	A
ATOM	1793	CG2	VAL	241	14.392	10.181	24.272	1.00	11.74	A
ATOM	1794	C	VAL	241	17.230	8.566	22.230	1.00	13.56	A
ATOM	1795	O	VAL	241	18.307	9.118	22.302	1.00	12.35	A
ATOM	1796	N	LEU	242	17.065	7.277	21.937	1.00	14.44	A
ATOM	1797	CA	LEU	242	18.243	6.475	21.597	1.00	13.84	A
ATOM	1798	CB	LEU	242	17.860	4.965	21.415	1.00	14.81	A
ATOM	1799	CG	LEU	242	19.102	4.148	20.910	1.00	14.16	A
ATOM	1800	CD1	LEU	242	20.228	4.073	21.946	1.00	15.38	A
ATOM	1801	CD2	LEU	242	18.662	2.701	20.589	1.00	17.38	A
ATOM	1802	C	LEU	242	18.943	7.008	20.365	1.00	13.58	A
ATOM	1803	O	LEU	242	20.173	7.121	20.361	1.00	13.54	A
ATOM	1804	N	LYS	243	18.148	7.395	19.358	1.00	14.06	A
ATOM	1805	CA	LYS	243	18.790	7.988	18.167	1.00	15.07	A
ATOM	1806	CB	LYS	243	17.780	8.282	17.072	1.00	15.58	A
ATOM	1807	CG	LYS	243	17.262	6.986	16.457	1.00	18.38	A
ATOM	1808	CD	LYS	243	16.404	7.246	15.214	1.00	21.28	A
ATOM	1809	CE	LYS	243	15.812	5.926	14.707	1.00	23.23	A
ATOM	1810	NZ	LYS	243	15.062	6.196	13.477	1.00	25.91	A
ATOM	1811	C	LYS	243	19.574	9.251	18.442	1.00	14.49	A
ATOM	1812	O	LYS	243	20.658	9.524	17.938	1.00	13.28	A
ATOM	1813	N	ALA	244	18.973	10.036	19.337	1.00	11.78	A
ATOM	1814	CA	ALA	244	19.534	11.327	19.619	1.00	11.38	A
ATOM	1815	CB	ALA	244	18.463	12.149	20.382	1.00	11.09	A
ATOM	1816	C	ALA	244	20.789	11.239	20.423	1.00	10.39	A
ATOM	1817	O	ALA	244	21.723	12.006	20.271	1.00	10.26	A
ATOM	1818	N	TRP	245	20.787	10.253	21.349	1.00	10.34	A
ATOM	1819	CA	TRP	245	21.901	9.965	22.195	1.00	10.91	A
ATOM	1820	CB	TRP	245	21.330	8.984	23.204	1.00	11.25	A
ATOM	1821	CG	TRP	245	22.315	8.554	24.258	1.00	14.79	A
ATOM	1822	CD2	TRP	245	22.695	9.256	25.401	1.00	15.62	A
ATOM	1823	CE2	TRP	245	23.575	8.329	26.170	1.00	15.29	A
ATOM	1824	CE3	TRP	245	22.414	10.559	25.885	1.00	15.41	A
ATOM	1825	CD1	TRP	245	22.948	7.309	24.329	1.00	16.28	A
ATOM	1826	NE1	TRP	245	23.704	7.160	25.462	1.00	15.67	A
ATOM	1827	CZ2	TRP	245	24.101	8.764	27.378	1.00	15.31	A

ATOM	1828	CZ3	TRP	245	22.972	10.954	27.118	1.00	15.17	A
ATOM	1829	CH2	TRP	245	23.798	10.052	27.837	1.00	14.90	A
ATOM	1830	C	TRP	245	23.087	9.395	21.364	1.00	12.52	A
ATOM	1831	O	TRP	245	24.200	9.834	21.464	1.00	11.63	A
ATOM	1832	N	THR	246	22.738	8.507	20.454	1.00	13.93	A
ATOM	1833	CA	THR	246	23.849	7.990	19.651	1.00	15.11	A
ATOM	1834	CB	THR	246	23.404	6.641	19.090	1.00	15.91	A
ATOM	1835	OG1	THR	246	22.295	6.798	18.300	1.00	18.62	A
ATOM	1836	CG2	THR	246	22.950	5.712	20.191	1.00	15.88	A
ATOM	1837	C	THR	246	24.409	8.949	18.628	1.00	13.79	A
ATOM	1838	O	THR	246	25.607	8.973	18.339	1.00	13.90	A
ATOM	1839	N	THR	247	23.541	9.830	18.132	1.00	14.07	A
ATOM	1840	CA	THR	247	24.052	10.800	17.182	1.00	14.15	A
ATOM	1841	CB	THR	247	22.913	11.567	16.393	1.00	16.02	A
ATOM	1842	OG1	THR	247	23.417	12.704	15.684	1.00	21.08	A
ATOM	1843	CG2	THR	247	21.887	12.150	17.253	1.00	19.49	A
ATOM	1844	C	THR	247	25.051	11.733	17.841	1.00	12.81	A
ATOM	1845	O	THR	247	26.004	12.148	17.215	1.00	11.57	A
ATOM	1846	N	LEU	248	24.778	12.061	19.123	1.00	10.96	A
ATOM	1847	CA	LEU	248	25.688	12.899	19.865	1.00	11.62	A
ATOM	1848	CB	LEU	248	25.049	13.490	21.127	1.00	13.59	A
ATOM	1849	CG	LEU	248	24.089	14.603	20.770	1.00	14.00	A
ATOM	1850	CD1	LEU	248	23.294	14.966	22.010	1.00	17.77	A
ATOM	1851	CD2	LEU	248	24.852	15.833	20.292	1.00	17.73	A
ATOM	1852	C	LEU	248	26.937	12.202	20.359	1.00	11.19	A
ATOM	1853	O	LEU	248	27.894	12.854	20.730	1.00	11.64	A
ATOM	1854	N	GLY	249	26.884	10.892	20.339	1.00	11.15	A
ATOM	1855	CA	GLY	249	28.049	10.130	20.820	1.00	11.34	A
ATOM	1856	C	GLY	249	28.129	9.954	22.323	1.00	10.50	A
ATOM	1857	O	GLY	249	29.155	9.564	22.860	1.00	10.77	A
ATOM	1858	N	CYS	250	27.008	10.238	23.010	1.00	10.17	A
ATOM	1859	CA	CYS	250	26.992	10.075	24.464	1.00	11.00	A
ATOM	1860	CB	CYS	250	25.702	10.598	25.017	1.00	10.46	A
ATOM	1861	SG	CYS	250	25.449	12.348	24.601	1.00	13.79	A
ATOM	1862	C	CYS	250	27.156	8.655	24.985	1.00	11.26	A
ATOM	1863	O	CYS	250	26.849	7.656	24.320	1.00	15.08	A
ATOM	1864	N	LYS	251	27.648	8.606	26.210	1.00	12.49	A
ATOM	1865	CA	LYS	251	27.773	7.308	26.860	1.00	12.67	A
ATOM	1866	CB	LYS	251	29.070	6.597	26.416	1.00	13.62	A
ATOM	1867	CG	LYS	251	30.333	7.344	26.870	1.00	13.96	A
ATOM	1868	CD	LYS	251	31.628	6.517	26.804	1.00	17.16	A
ATOM	1869	CE	LYS	251	32.857	7.386	27.192	1.00	16.48	A
ATOM	1870	NZ	LYS	251	34.126	6.628	27.041	1.00	18.84	A
ATOM	1871	C	LYS	251	27.712	7.450	28.368	1.00	13.11	A
ATOM	1872	O	LYS	251	27.687	8.522	28.943	1.00	12.45	A
ATOM	1873	N	GLY	252	27.641	6.270	28.966	1.00	13.21	A
ATOM	1874	CA	GLY	252	27.554	6.129	30.389	1.00	12.71	A
ATOM	1875	C	GLY	252	26.168	6.328	30.937	1.00	12.23	A
ATOM	1876	O	GLY	252	25.462	5.411	31.260	1.00	12.05	A
ATOM	1877	N	TRP	253	25.832	7.600	31.028	1.00	10.05	A
ATOM	1878	CA	TRP	253	24.484	7.938	31.489	1.00	10.92	A
ATOM	1879	CB	TRP	253	24.320	7.731	33.005	1.00	11.70	A
ATOM	1880	CG	TRP	253	25.014	8.763	33.860	1.00	10.89	A
ATOM	1881	CD2	TRP	253	24.393	9.601	34.808	1.00	11.33	A
ATOM	1882	CE2	TRP	253	25.477	10.383	35.444	1.00	11.89	A
ATOM	1883	CE3	TRP	253	23.062	9.759	35.231	1.00	11.05	A
ATOM	1884	CD1	TRP	253	26.376	9.055	33.923	1.00	11.10	A
ATOM	1885	NE1	TRP	253	26.679	10.012	34.856	1.00	11.07	A
ATOM	1886	CZ2	TRP	253	25.160	11.286	36.505	1.00	14.05	A
ATOM	1887	CZ3	TRP	253	22.782	10.667	36.295	1.00	11.57	A
ATOM	1888	CH2	TRP	253	23.807	11.409	36.915	1.00	12.89	A

ATOM	1889	C	TRP	253	24.136	9.370	31.178	1.00	9.93	A
ATOM	1890	O	TRP	253	25.006	10.164	30.900	1.00	10.15	A
ATOM	1891	N	GLY	254	22.823	9.677	31.266	1.00	11.12	A
ATOM	1892	CA	GLY	254	22.397	11.026	30.885	1.00	10.76	A
ATOM	1893	C	GLY	254	20.892	11.124	30.764	1.00	10.17	A
ATOM	1894	O	GLY	254	20.136	10.235	31.151	1.00	10.21	A
ATOM	1895	N	ARG	255	20.453	12.294	30.251	1.00	9.98	A
ATOM	1896	CA	ARG	255	18.990	12.519	30.300	1.00	10.05	A
ATOM	1897	CB	ARG	255	18.609	13.160	31.665	1.00	9.49	A
ATOM	1898	CG	ARG	255	17.108	12.922	31.825	1.00	9.75	A
ATOM	1899	CD	ARG	255	16.484	13.625	33.053	1.00	10.06	A
ATOM	1900	NE	ARG	255	16.317	15.033	32.788	1.00	6.37	A
ATOM	1901	CZ	ARG	255	17.103	16.044	33.188	1.00	5.55	A
ATOM	1902	NH1	ARG	255	18.045	15.878	34.105	1.00	10.01	A
ATOM	1903	NH2	ARG	255	16.976	17.194	32.535	1.00	7.49	A
ATOM	1904	C	ARG	255	18.579	13.461	29.220	1.00	9.86	A
ATOM	1905	O	ARG	255	19.118	14.549	29.136	1.00	10.82	A
ATOM	1906	N	ILE	256	17.669	13.002	28.360	1.00	9.27	A
ATOM	1907	CA	ILE	256	17.251	13.840	27.219	1.00	9.10	A
ATOM	1908	CB	ILE	256	17.339	13.044	25.911	1.00	10.35	A
ATOM	1909	CG2	ILE	256	16.763	13.835	24.734	1.00	9.10	A
ATOM	1910	CG1	ILE	256	18.847	12.701	25.716	1.00	9.87	A
ATOM	1911	CD1	ILE	256	19.112	12.079	24.331	1.00	10.37	A
ATOM	1912	C	ILE	256	15.827	14.367	27.444	1.00	8.85	A
ATOM	1913	O	ILE	256	14.908	13.655	27.788	1.00	10.94	A
ATOM	1914	N	ASP	257	15.721	15.656	27.276	1.00	7.27	A
ATOM	1915	CA	ASP	257	14.408	16.333	27.381	1.00	9.35	A
ATOM	1916	CB	ASP	257	14.567	17.773	27.918	1.00	9.03	A
ATOM	1917	CG	ASP	257	15.274	17.800	29.278	1.00	11.03	A
ATOM	1918	OD1	ASP	257	15.304	16.869	30.038	1.00	11.21	A
ATOM	1919	OD2	ASP	257	15.839	18.819	29.594	1.00	10.66	A
ATOM	1920	C	ASP	257	13.747	16.446	26.052	1.00	9.71	A
ATOM	1921	O	ASP	257	14.367	16.734	25.029	1.00	9.28	A
ATOM	1922	N	VAL	258	12.444	16.133	26.084	1.00	9.95	A
ATOM	1923	CA	VAL	258	11.642	16.197	24.845	1.00	10.54	A
ATOM	1924	CB	VAL	258	11.698	14.882	24.001	1.00	13.76	A
ATOM	1925	CG1	VAL	258	12.659	13.799	24.435	1.00	12.27	A
ATOM	1926	CG2	VAL	258	10.455	14.378	23.310	1.00	13.34	A
ATOM	1927	C	VAL	258	10.222	16.696	25.109	1.00	11.06	A
ATOM	1928	O	VAL	258	9.698	16.503	26.199	1.00	12.53	A
ATOM	1929	N	MET	259	9.637	17.355	24.106	1.00	12.04	A
ATOM	1930	CA	MET	259	8.268	17.862	24.274	1.00	12.07	A
ATOM	1931	CB	MET	259	8.262	19.395	24.415	1.00	12.44	A
ATOM	1932	CG	MET	259	8.791	19.892	25.771	1.00	10.12	A
ATOM	1933	SD	MET	259	8.727	21.671	25.796	1.00	14.52	A
ATOM	1934	CE	MET	259	7.007	22.021	26.103	1.00	10.06	A
ATOM	1935	C	MET	259	7.457	17.551	23.049	1.00	12.92	A
ATOM	1936	O	MET	259	7.932	17.549	21.932	1.00	12.90	A
ATOM	1937	N	LEU	260	6.171	17.324	23.301	1.00	14.48	A
ATOM	1938	CA	LEU	260	5.220	17.197	22.203	1.00	14.47	A
ATOM	1939	CB	LEU	260	3.947	16.544	22.758	1.00	15.02	A
ATOM	1940	CG	LEU	260	3.210	15.603	21.826	1.00	18.36	A
ATOM	1941	CD1	LEU	260	4.064	14.323	21.653	1.00	15.94	A
ATOM	1942	CD2	LEU	260	1.815	15.297	22.462	1.00	19.55	A
ATOM	1943	C	LEU	260	4.856	18.565	21.721	1.00	13.92	A
ATOM	1944	O	LEU	260	4.839	19.527	22.477	1.00	14.03	A
ATOM	1945	N	ASP	261	4.528	18.593	20.431	1.00	13.10	A
ATOM	1946	CA	ASP	261	3.921	19.793	19.932	1.00	13.66	A
ATOM	1947	CB	ASP	261	4.697	20.265	18.718	1.00	14.92	A
ATOM	1948	CG	ASP	261	4.576	21.753	18.519	1.00	15.80	A
ATOM	1949	OD1	ASP	261	4.027	22.461	19.379	1.00	17.46	A

ATOM	1950	OD2	ASP	261	5.087	22.208	17.498	1.00	16.35	A
ATOM	1951	C	ASP	261	2.488	19.507	19.583	1.00	12.70	A
ATOM	1952	O	ASP	261	2.016	18.399	19.757	1.00	15.18	A
ATOM	1953	N	SER	262	1.852	20.521	19.062	1.00	13.91	A
ATOM	1954	CA	SER	262	0.408	20.428	18.825	1.00	15.79	A
ATOM	1955	CB	SER	262	-0.156	21.846	18.728	1.00	16.73	A
ATOM	1956	CG	SER	262	0.371	22.547	17.582	1.00	19.18	A
ATOM	1957	C	SER	262	0.011	19.522	17.680	1.00	15.51	A
ATOM	1958	O	SER	262	-1.129	19.141	17.484	1.00	15.47	A
ATOM	1959	N	ASP	263	1.045	19.138	16.949	1.00	14.98	A
ATOM	1960	CA	ASP	263	0.923	18.081	15.953	1.00	15.85	A
ATOM	1961	CB	ASP	263	1.936	18.275	14.783	1.00	15.14	A
ATOM	1962	CG	ASP	263	3.391	18.064	15.220	1.00	16.54	A
ATOM	1963	OD1	ASP	263	3.618	17.826	16.399	1.00	12.96	A
ATOM	1964	OD2	ASP	263	4.270	18.122	14.354	1.00	16.70	A
ATOM	1965	C	ASP	263	0.994	16.670	16.462	1.00	15.78	A
ATOM	1966	O	ASP	263	0.866	15.715	15.714	1.00	16.51	A
ATOM	1967	N	GLY	264	1.202	16.568	17.775	1.00	14.88	A
ATOM	1968	CA	GLY	264	1.191	15.262	18.424	1.00	14.91	A
ATOM	1969	C	GLY	264	2.475	14.488	18.286	1.00	15.52	A
ATOM	1970	O	GLY	264	2.548	13.328	18.647	1.00	16.74	A
ATOM	1971	N	GLN	265	3.485	15.201	17.774	1.00	16.44	A
ATOM	1972	CA	GLN	265	4.791	14.574	17.599	1.00	15.95	A
ATOM	1973	CB	GLN	265	5.250	14.868	16.188	1.00	18.45	A
ATOM	1974	CG	GLN	265	4.175	14.376	15.198	1.00	24.38	A
ATOM	1975	CD	GLN	265	4.836	14.002	13.919	1.00	28.45	A
ATOM	1976	OE1	GLN	265	5.095	12.836	13.648	1.00	31.33	A
ATOM	1977	NE2	GLN	265	5.120	15.032	13.113	1.00	30.82	A
ATOM	1978	C	GLN	265	5.809	15.092	18.582	1.00	14.75	A
ATOM	1979	O	GLN	265	5.744	16.199	19.114	1.00	13.21	A
ATOM	1980	N	PHE	266	6.780	14.186	18.802	1.00	14.06	A
ATOM	1981	CA	PHE	266	7.894	14.543	19.719	1.00	13.29	A
ATOM	1982	CB	PHE	266	8.572	13.280	20.229	1.00	15.70	A
ATOM	1983	CG	PHE	266	7.729	12.453	21.162	1.00	15.87	A
ATOM	1984	CD1	PHE	266	7.326	12.980	22.410	1.00	15.52	A
ATOM	1985	CD2	PHE	266	7.416	11.132	20.786	1.00	17.52	A
ATOM	1986	CE1	PHE	266	6.603	12.137	23.288	1.00	18.97	A
ATOM	1987	CE2	PHE	266	6.694	10.299	21.673	1.00	16.57	A
ATOM	1988	CZ	PHE	266	6.294	10.812	22.930	1.00	17.90	A
ATOM	1989	O	PHE	266	8.978	15.328	19.048	1.00	13.31	A
ATOM	1990	C	PHE	266	9.388	15.069	17.909	1.00	13.57	A
ATOM	1991	N	TYR	267	9.450	16.281	19.850	1.00	11.98	A
ATOM	1992	CA	TYR	267	10.581	17.105	19.436	1.00	10.14	A
ATOM	1993	CB	TYR	267	10.135	18.543	19.134	1.00	10.58	A
ATOM	1994	CG	TYR	267	9.236	18.514	17.938	1.00	10.26	A
ATOM	1995	CD1	TYR	267	9.788	18.613	16.650	1.00	12.70	A
ATOM	1996	CE1	TYR	267	8.964	18.505	15.529	1.00	14.61	A
ATOM	1997	CD2	TYR	267	7.844	18.323	18.110	1.00	12.51	A
ATOM	1998	CE2	TYR	267	7.016	18.201	16.979	1.00	11.77	A
ATOM	1999	CZ	TYR	267	7.584	18.287	15.685	1.00	15.48	A
ATOM	2000	OH	TYR	267	6.830	18.113	14.545	1.00	14.70	A
ATOM	2001	C	TYR	267	11.670	17.195	20.477	1.00	9.22	A
ATOM	2002	O	TYR	267	11.460	17.364	21.659	1.00	8.82	A
ATOM	2003	N	LEU	268	12.935	17.041	19.993	1.00	9.43	A
ATOM	2004	CA	LEU	268	14.060	17.008	20.921	1.00	9.99	A
ATOM	2005	CB	LEU	268	15.268	16.461	20.129	1.00	10.65	A
ATOM	2006	CG	LEU	268	15.061	14.978	19.781	1.00	12.25	A
ATOM	2007	CD1	LEU	268	16.134	14.565	18.754	1.00	12.19	A
ATOM	2008	CD2	LEU	268	15.215	14.134	21.047	1.00	13.66	A
ATOM	2009	C	LEU	268	14.417	18.389	21.427	1.00	10.87	A
ATOM	2010	O	LEU	268	14.477	19.312	20.635	1.00	11.37	A

ATOM	2011	N	LEU	269	14.577	18.501	22.769	1.00	9.58	A
ATOM	2012	CA	LEU	269	15.076	19.763	23.305	1.00	9.23	A
ATOM	2013	CB	LEU	269	14.433	20.106	24.685	1.00	9.31	A
ATOM	2014	CG	LEU	269	12.961	20.622	24.591	1.00	14.80	A
ATOM	2015	CD1	LEU	269	11.932	19.854	23.755	1.00	14.29	A
ATOM	2016	CD2	LEU	269	12.470	20.872	26.004	1.00	13.04	A
ATOM	2017	C	LEU	269	16.602	19.786	23.465	1.00	8.38	A
ATOM	2018	O	LEU	269	17.256	20.636	22.912	1.00	10.19	A
ATOM	2019	N	GLU	270	17.138	18.839	24.228	1.00	8.39	A
ATOM	2020	CA	GLU	270	18.565	18.824	24.619	1.00	9.07	A
ATOM	2021	CB	GLU	270	18.922	19.997	25.532	1.00	9.65	A
ATOM	2022	CG	GLU	270	18.006	19.981	26.766	1.00	9.26	A
ATOM	2023	CD	GLU	270	18.780	20.425	27.972	1.00	9.39	A
ATOM	2024	OE1	GLU	270	18.203	20.386	29.068	1.00	7.51	A
ATOM	2025	OE2	GLU	270	19.966	20.791	27.904	1.00	8.21	A
ATOM	2026	C	GLU	270	18.881	17.557	25.342	1.00	9.71	A
ATOM	2027	O	GLU	270	18.015	16.867	25.855	1.00	10.46	A
ATOM	2028	N	ALA	271	20.208	17.244	25.313	1.00	9.04	A
ATOM	2029	CA	ALA	271	20.713	16.164	26.116	1.00	8.19	A
ATOM	2030	CB	ALA	271	21.645	15.271	25.237	1.00	7.69	A
ATOM	2031	C	ALA	271	21.511	16.785	27.259	1.00	7.44	A
ATOM	2032	O	ALA	271	22.268	17.721	27.058	1.00	10.24	A
ATOM	2033	N	ASN	272	21.352	16.191	28.408	1.00	9.56	A
ATOM	2034	CA	ASN	272	22.136	16.614	29.594	1.00	8.55	A
ATOM	2035	CB	ASN	272	21.153	16.870	30.727	1.00	9.87	A
ATOM	2036	CG	ASN	272	20.232	18.011	30.373	1.00	10.22	A
ATOM	2037	OD1	ASN	272	20.616	19.173	30.436	1.00	10.02	A
ATOM	2038	ND2	ASN	272	19.092	17.649	29.851	1.00	9.96	A
ATOM	2039	C	ASN	272	23.005	15.455	30.017	1.00	9.04	A
ATOM	2040	O	ASN	272	22.489	14.406	30.311	1.00	8.85	A
ATOM	2041	N	THR	273	24.342	15.660	30.066	1.00	10.31	A
ATOM	2042	CA	THR	273	25.232	14.503	30.257	1.00	10.04	A
ATOM	2043	CB	THR	273	26.359	14.687	29.242	1.00	10.78	A
ATOM	2044	OG1	THR	273	26.979	15.989	29.454	1.00	10.13	A
ATOM	2045	CG2	THR	273	25.683	14.603	27.866	1.00	12.46	A
ATOM	2046	C	THR	273	25.768	14.283	31.645	1.00	12.42	A
ATOM	2047	O	THR	273	26.452	13.309	31.958	1.00	11.27	A
ATOM	2048	N	SER	274	25.440	15.274	32.517	1.00	10.32	A
ATOM	2049	CA	SER	274	25.675	15.043	33.965	1.00	11.84	A
ATOM	2050	CB	SER	274	26.869	15.901	34.513	1.00	11.19	A
ATOM	2051	OG	SER	274	27.245	15.528	35.865	1.00	12.41	A
ATOM	2052	C	SER	274	24.449	15.432	34.750	1.00	10.70	A
ATOM	2053	O	SER	274	24.447	16.455	35.412	1.00	10.83	A
ATOM	2054	N	PRO	275	23.436	14.582	34.695	1.00	10.46	A
ATOM	2055	CD	PRO	275	23.397	13.274	34.026	1.00	9.09	A
ATOM	2056	CA	PRO	275	22.131	15.017	35.232	1.00	9.36	A
ATOM	2057	CB	PRO	275	21.227	13.851	34.863	1.00	9.76	A
ATOM	2058	CG	PRO	275	21.926	13.098	33.685	1.00	9.87	A
ATOM	2059	C	PRO	275	22.106	15.240	36.744	1.00	9.49	A
ATOM	2060	O	PRO	275	22.861	14.666	37.507	1.00	8.78	A
ATOM	2061	N	GLY	276	21.110	16.081	37.078	1.00	9.55	A
ATOM	2062	CA	GLY	276	20.858	16.257	38.510	1.00	11.16	A
ATOM	2063	C	GLY	276	20.447	14.987	39.214	1.00	10.92	A
ATOM	2064	O	GLY	276	19.873	14.034	38.692	1.00	10.96	A
ATOM	2065	N	MET	277	20.842	15.015	40.507	1.00	12.27	A
ATOM	2066	CA	MET	277	20.668	13.856	41.386	1.00	13.35	A
ATOM	2067	CB	MET	277	22.011	13.118	41.520	1.00	13.36	A
ATOM	2068	CG	MET	277	22.455	12.413	40.200	1.00	14.51	A
ATOM	2069	SD	MET	277	21.392	11.124	39.655	1.00	14.40	A
ATOM	2070	CE	MET	277	22.476	9.764	40.136	1.00	15.64	A
ATOM	2071	C	MET	277	20.076	14.238	42.734	1.00	14.19	A

40/90

ATOM	2072	O	MET	277	20.155	13.474	43.695	1.00	14.52	A
ATOM	2073	N	THR	278	19.476	15.447	42.787	1.00	13.86	A
ATOM	2074	CA	THR	278	18.891	15.950	44.072	1.00	14.10	A
ATOM	2075	CB	THR	278	18.624	17.458	43.985	1.00	14.67	A
ATOM	2076	OG1	THR	278	17.385	17.735	43.273	1.00	14.39	A
ATOM	2077	CG2	THR	278	19.757	18.179	43.295	1.00	13.26	A
ATOM	2078	C	THR	278	17.570	15.258	44.367	1.00	14.13	A
ATOM	2079	O	THR	278	17.087	14.520	43.525	1.00	13.46	A
ATOM	2080	N	SER	279	16.947	15.580	45.541	1.00	13.68	A
ATOM	2081	CA	SER	279	15.586	15.083	45.784	1.00	13.95	A
ATOM	2082	CB	SER	279	15.158	15.434	47.227	1.00	13.83	A
ATOM	2083	OG	SER	279	15.056	16.860	47.381	1.00	13.23	A
ATOM	2084	C	SER	279	14.491	15.547	44.820	1.00	15.05	A
ATOM	2085	O	SER	279	13.432	14.941	44.752	1.00	15.80	A
ATOM	2086	N	HIS	280	14.760	16.665	44.128	1.00	14.55	A
ATOM	2087	CA	HIS	280	13.829	17.110	43.097	1.00	14.19	A
ATOM	2088	CB	HIS	280	13.811	18.638	43.016	1.00	16.40	A
ATOM	2089	CG	HIS	280	13.085	19.315	44.170	1.00	16.42	A
ATOM	2090	ND1	HIS	280	13.072	18.888	45.444	1.00	19.31	A
ATOM	2091	CD2	HIS	280	12.347	20.500	44.087	1.00	17.25	A
ATOM	2092	NE2	HIS	280	11.904	20.792	45.346	1.00	17.82	A
ATOM	2093	CE1	HIS	280	12.348	19.796	46.205	1.00	14.69	A
ATOM	2094	C	HIS	280	14.160	16.592	41.706	1.00	13.78	A
ATOM	2095	O	HIS	280	13.555	16.992	40.730	1.00	12.19	A
ATOM	2096	N	SER	281	15.191	15.759	41.663	1.00	12.46	A
ATOM	2097	CA	SER	281	15.687	15.398	40.315	1.00	11.18	A
ATOM	2098	CB	SER	281	17.153	15.107	40.358	1.00	8.61	A
ATOM	2099	OG	SER	281	17.839	16.313	40.664	1.00	9.24	A
ATOM	2100	C	SER	281	15.058	14.212	39.628	1.00	10.63	A
ATOM	2101	O	SER	281	14.507	13.315	40.234	1.00	13.38	A
ATOM	2102	N	LEU	282	15.218	14.268	38.297	1.00	10.50	A
ATOM	2103	CA	LEU	282	14.494	13.372	37.417	1.00	11.01	A
ATOM	2104	CB	LEU	282	14.249	14.074	36.034	1.00	11.84	A
ATOM	2105	CG	LEU	282	13.526	15.411	36.193	1.00	11.05	A
ATOM	2106	CD1	LEU	282	13.927	16.363	35.113	1.00	10.63	A
ATOM	2107	CD2	LEU	282	12.045	15.155	36.126	1.00	12.37	A
ATOM	2108	C	LEU	282	15.143	12.035	37.156	1.00	10.72	A
ATOM	2109	O	LEU	282	14.436	11.047	37.070	1.00	11.43	A
ATOM	2110	N	VAL	283	16.508	11.990	36.996	1.00	9.69	A
ATOM	2111	CA	VAL	283	17.062	10.619	36.813	1.00	10.49	A
ATOM	2112	CB	VAL	283	18.578	10.646	36.482	1.00	10.24	A
ATOM	2113	CG1	VAL	283	19.206	9.254	36.479	1.00	11.84	A
ATOM	2114	CG2	VAL	283	18.721	11.261	35.083	1.00	10.67	A
ATOM	2115	C	VAL	283	16.740	9.655	37.980	1.00	10.86	A
ATOM	2116	O	VAL	283	16.342	8.516	37.784	1.00	11.40	A
ATOM	2117	N	PRO	284	16.888	10.145	39.224	1.00	12.11	A
ATOM	2118	CD	PRO	284	17.465	11.403	39.707	1.00	10.28	A
ATOM	2119	CA	PRO	284	16.490	9.253	40.319	1.00	12.76	A
ATOM	2120	CB	PRO	284	16.794	10.078	41.531	1.00	12.55	A
ATOM	2121	CG	PRO	284	17.792	11.115	41.170	1.00	11.22	A
ATOM	2122	C	PRO	284	15.023	8.843	40.339	1.00	13.83	A
ATOM	2123	O	PRO	284	14.682	7.792	40.855	1.00	15.50	A
ATOM	2124	N	MET	285	14.174	9.681	39.742	1.00	13.43	A
ATOM	2125	CA	MET	285	12.777	9.256	39.619	1.00	14.95	A
ATOM	2126	CB	MET	285	11.823	10.391	39.186	1.00	15.06	A
ATOM	2127	CG	MET	285	11.845	11.556	40.118	1.00	17.72	A
ATOM	2128	SD	MET	285	10.712	12.817	39.475	1.00	20.50	A
ATOM	2129	CE	MET	285	10.988	14.065	40.738	1.00	19.33	A
ATOM	2130	C	MET	285	12.564	8.157	38.659	1.00	14.84	A
ATOM	2131	O	MET	285	11.825	7.225	38.929	1.00	17.09	A
ATOM	2132	N	ALA	286	13.218	8.290	37.499	1.00	15.08	A

ATOM	2133	CA	ALA	286	13.222	7.202	36.526	1.00	14.53	A
ATOM	2134	CB	ALA	286	13.954	7.622	35.249	1.00	14.97	A
ATOM	2135	C	ALA	286	13.860	5.929	37.049	1.00	15.69	A
ATOM	2136	O	ALA	286	13.358	4.829	36.900	1.00	17.05	A
ATOM	2137	N	ALA	287	14.969	6.100	37.763	1.00	16.69	A
ATOM	2138	CA	ALA	287	15.595	4.894	38.293	1.00	17.48	A
ATOM	2139	CB	ALA	287	16.954	5.239	38.864	1.00	17.13	A
ATOM	2140	C	ALA	287	14.741	4.194	39.368	1.00	17.88	A
ATOM	2141	O	ALA	287	14.687	2.978	39.423	1.00	18.36	A
ATOM	2142	N	ARG	288	14.041	5.008	40.148	1.00	19.02	A
ATOM	2143	CA	ARG	288	13.155	4.383	41.150	1.00	21.19	A
ATOM	2144	CB	ARG	288	12.517	5.420	42.080	1.00	21.51	A
ATOM	2145	CG	ARG	288	13.566	6.008	43.037	1.00	24.63	A
ATOM	2146	CD	ARG	288	13.096	6.527	44.402	1.00	27.38	A
ATOM	2147	NE	ARG	288	12.292	7.753	44.322	1.00	30.04	A
ATOM	2148	CZ	ARG	288	11.824	8.313	45.465	1.00	31.32	A
ATOM	2149	NH1	ARG	288	12.108	7.813	46.673	1.00	31.77	A
ATOM	2150	NH2	ARG	288	11.012	9.371	45.399	1.00	31.77	A
ATOM	2151	C	ARG	288	12.075	3.583	40.513	1.00	21.63	A
ATOM	2152	O	ARG	288	11.779	2.463	40.928	1.00	21.39	A
ATOM	2153	N	GLN	289	11.522	4.201	39.447	1.00	21.52	A
ATOM	2154	CA	GLN	289	10.519	3.481	38.661	1.00	21.91	A
ATOM	2155	CB	GLN	289	9.862	4.450	37.678	1.00	22.15	A
ATOM	2156	CG	GLN	289	8.723	5.148	38.404	1.00	26.20	A
ATOM	2157	CD	GLN	289	7.651	4.118	38.741	1.00	25.95	A
ATOM	2158	OE1	GLN	289	7.111	3.399	37.909	1.00	27.87	A
ATOM	2159	NE2	GLN	289	7.423	4.033	40.049	1.00	28.78	A
ATOM	2160	C	GLN	289	10.928	2.195	37.984	1.00	22.16	A
ATOM	2161	O	GLN	289	10.146	1.265	37.780	1.00	22.03	A
ATOM	2162	N	ALA	290	12.219	2.150	37.687	1.00	21.60	A
ATOM	2163	CA	ALA	290	12.783	0.961	37.067	1.00	21.37	A
ATOM	2164	CB	ALA	290	13.980	1.368	36.208	1.00	20.39	A
ATOM	2165	C	ALA	290	13.212	-0.131	38.058	1.00	20.77	A
ATOM	2166	O	ALA	290	13.665	-1.212	37.686	1.00	21.39	A
ATOM	2167	N	GLY	291	13.021	0.197	39.331	1.00	21.04	A
ATOM	2168	CA	GLY	291	13.277	-0.717	40.434	1.00	20.86	A
ATOM	2169	C	GLY	291	14.632	-0.693	41.106	1.00	22.17	A
ATOM	2170	O	GLY	291	15.005	-1.648	41.793	1.00	20.85	A
ATOM	2171	N	MET	292	15.372	0.420	40.906	1.00	22.11	A
ATOM	2172	CA	MET	292	16.637	0.436	41.654	1.00	22.90	A
ATOM	2173	CB	MET	292	17.798	0.560	40.643	1.00	24.44	A
ATOM	2174	CG	MET	292	18.074	1.865	39.914	1.00	24.78	A
ATOM	2175	SD	MET	292	19.226	1.657	38.519	1.00	25.01	A
ATOM	2176	CE	MET	292	18.279	0.479	37.554	1.00	26.60	A
ATOM	2177	C	MET	292	16.653	1.467	42.763	1.00	23.31	A
ATOM	2178	O	MET	292	15.978	2.490	42.682	1.00	23.51	A
ATOM	2179	N	SER	293	17.430	1.162	43.830	1.00	22.68	A
ATOM	2180	CA	SER	293	17.714	2.157	44.852	1.00	23.53	A
ATOM	2181	CB	SER	293	18.569	1.554	45.963	1.00	25.21	A
ATOM	2182	CG	SER	293	17.613	1.125	46.917	1.00	28.70	A
ATOM	2183	C	SER	293	18.564	3.225	44.283	1.00	22.08	A
ATOM	2184	O	SER	293	19.276	2.934	43.356	1.00	21.18	A
ATOM	2185	N	PHE	294	18.468	4.411	44.859	1.00	21.17	A
ATOM	2186	CA	PHE	294	19.439	5.449	44.521	1.00	19.64	A
ATOM	2187	CB	PHE	294	19.222	6.632	45.467	1.00	19.41	A
ATOM	2188	CG	PHE	294	19.993	7.866	45.060	1.00	18.68	A
ATOM	2189	CD1	PHE	294	21.266	8.089	45.632	1.00	17.90	A
ATOM	2190	CD2	PHE	294	19.455	8.761	44.102	1.00	18.70	A
ATOM	2191	CE1	PHE	294	22.014	9.215	45.241	1.00	17.64	A
ATOM	2192	CE2	PHE	294	20.217	9.886	43.733	1.00	17.65	A
ATOM	2193	CZ	PHE	294	21.494	10.123	44.293	1.00	17.88	A

ATOM	2194	C	PHE	294	20.878	4.965	44.601	1.00	20.36	A
ATOM	2195	O	PHE	294	21.688	5.179	43.709	1.00	18.97	A
ATOM	2196	N	SER	295	21.191	4.281	45.727	1.00	21.44	A
ATOM	2197	CA	SER	295	22.557	3.800	45.915	1.00	22.93	A
ATOM	2198	CB	SER	295	22.721	3.053	47.266	1.00	24.10	A
ATOM	2199	OG	SER	295	22.316	3.879	48.361	1.00	27.99	A
ATOM	2200	C	SER	295	22.982	2.893	44.782	1.00	22.46	A
ATOM	2201	O	SER	295	24.055	2.991	44.213	1.00	22.67	A
ATOM	2202	N	GLN	296	22.045	2.017	44.416	1.00	22.27	A
ATOM	2203	CA	GLN	296	22.221	1.162	43.255	1.00	21.62	A
ATOM	2204	CB	GLN	296	20.974	0.284	43.134	1.00	23.67	A
ATOM	2205	CG	GLN	296	21.071	-0.876	44.136	1.00	26.51	A
ATOM	2206	CD	GLN	296	19.789	-1.702	44.149	1.00	28.39	A
ATOM	2207	OE1	GLN	296	18.709	-1.268	43.804	1.00	28.61	A
ATOM	2208	NE2	GLN	296	19.963	-2.958	44.578	1.00	30.06	A
ATOM	2209	C	GLN	296	22.487	1.875	41.930	1.00	20.47	A
ATOM	2210	O	GLN	296	23.337	1.508	41.122	1.00	19.13	A
ATOM	2211	N	LEU	297	21.691	2.922	41.736	1.00	18.91	A
ATOM	2212	CA	LEU	297	21.836	3.772	40.563	1.00	17.33	A
ATOM	2213	CB	LEU	297	20.793	4.899	40.600	1.00	16.53	A
ATOM	2214	CG	LEU	297	20.956	6.072	39.609	1.00	14.65	A
ATOM	2215	CD1	LEU	297	20.890	5.664	38.147	1.00	16.69	A
ATOM	2216	CD2	LEU	297	19.937	7.170	39.969	1.00	14.95	A
ATOM	2217	C	LEU	297	23.229	4.350	40.489	1.00	17.07	A
ATOM	2218	O	LEU	297	23.906	4.212	39.482	1.00	15.96	A
ATOM	2219	N	VAL	298	23.651	4.972	41.585	1.00	16.68	A
ATOM	2220	CA	VAL	298	24.966	5.620	41.428	1.00	18.08	A
ATOM	2221	CB	VAL	298	25.208	6.640	42.542	1.00	16.90	A
ATOM	2222	CG1	VAL	298	24.377	7.907	42.401	1.00	17.01	A
ATOM	2223	CG2	VAL	298	25.044	6.019	43.934	1.00	18.24	A
ATOM	2224	C	VAL	298	26.148	4.688	41.403	1.00	19.11	A
ATOM	2225	O	VAL	298	27.198	4.989	40.843	1.00	19.55	A
ATOM	2226	N	VAL	299	25.964	3.512	42.022	1.00	18.77	A
ATOM	2227	CA	VAL	299	27.074	2.578	41.825	1.00	19.69	A
ATOM	2228	CB	VAL	299	27.024	1.451	42.878	1.00	20.60	A
ATOM	2229	CG1	VAL	299	26.924	2.048	44.296	1.00	20.80	A
ATOM	2230	CG2	VAL	299	25.927	0.457	42.563	1.00	21.34	A
ATOM	2231	C	VAL	299	27.156	2.044	40.405	1.00	17.92	A
ATOM	2232	O	VAL	299	28.209	1.742	39.871	1.00	18.71	A
ATOM	2233	N	ARG	300	25.975	1.986	39.741	1.00	18.06	A
ATOM	2234	CA	ARG	300	25.962	1.516	38.352	1.00	17.75	A
ATOM	2235	CB	ARG	300	24.537	1.177	37.882	1.00	20.50	A
ATOM	2236	CG	ARG	300	24.484	0.714	36.431	1.00	24.24	A
ATOM	2237	CD	ARG	300	25.456	-0.393	35.998	1.00	26.75	A
ATOM	2238	NE	ARG	300	25.196	-0.662	34.589	1.00	29.94	A
ATOM	2239	CZ	ARG	300	26.006	-1.416	33.834	1.00	31.87	A
ATOM	2240	NH1	ARG	300	27.181	-1.863	34.304	1.00	32.46	A
ATOM	2241	NH2	ARG	300	25.618	-1.726	32.593	1.00	31.08	A
ATOM	2242	C	ARG	300	26.571	2.533	37.412	1.00	17.13	A
ATOM	2243	O	ARG	300	27.378	2.209	36.560	1.00	16.20	A
ATOM	2244	N	ILE	301	26.214	3.794	37.666	1.00	15.08	A
ATOM	2245	CA	ILE	301	26.929	4.856	36.947	1.00	14.22	A
ATOM	2246	CB	ILE	301	26.358	6.179	37.443	1.00	15.17	A
ATOM	2247	CG2	ILE	301	27.141	7.334	36.873	1.00	12.88	A
ATOM	2248	CG1	ILE	301	24.862	6.279	37.052	1.00	14.32	A
ATOM	2249	CD1	ILE	301	24.163	7.389	37.801	1.00	15.30	A
ATOM	2250	C	ILE	301	28.456	4.801	37.069	1.00	14.34	A
ATOM	2251	O	ILE	301	29.203	4.938	36.108	1.00	14.55	A
ATOM	2252	N	LEU	302	28.901	4.532	38.299	1.00	14.86	A
ATOM	2253	CA	LEU	302	30.337	4.415	38.546	1.00	15.72	A
ATOM	2254	CB	LEU	302	30.606	4.376	40.057	1.00	16.60	A

ATOM	2255	CG	LEU	302	32.084	4.561	40.457	1.00	18.94	A
ATOM	2256	CD1	LEU	302	32.675	5.907	40.087	1.00	19.32	A
ATOM	2257	CD2	LEU	302	32.235	4.462	41.959	1.00	19.06	A
ATOM	2258	C	LEU	302	30.973	3.218	37.899	1.00	16.69	A
ATOM	2259	O	LEU	302	32.082	3.288	37.408	1.00	16.08	A
ATOM	2260	N	GLU	303	30.232	2.128	37.902	1.00	17.45	A
ATOM	2261	CA	GLU	303	30.757	0.977	37.188	1.00	18.83	A
ATOM	2262	CB	GLU	303	29.815	-0.184	37.324	1.00	20.63	A
ATOM	2263	CG	GLU	303	29.753	-0.755	38.714	1.00	23.60	A
ATOM	2264	CD	GLU	303	28.946	-2.001	38.509	1.00	26.07	A
ATOM	2265	OE1	GLU	303	29.427	-3.047	38.930	1.00	29.02	A
ATOM	2266	OE2	GLU	303	27.870	-1.929	37.889	1.00	27.71	A
ATOM	2267	C	GLU	303	30.982	1.163	35.726	1.00	18.85	A
ATOM	2268	O	GLU	303	31.888	0.565	35.183	1.00	18.58	A
ATOM	2269	N	LEU	304	30.150	2.046	35.118	1.00	18.30	A
ATOM	2270	CA	LEU	304	30.300	2.375	33.723	1.00	18.52	A
ATOM	2271	CB	LEU	304	29.000	2.977	33.175	1.00	20.25	A
ATOM	2272	CG	LEU	304	27.856	1.967	33.202	1.00	18.58	A
ATOM	2273	CD1	LEU	304	26.499	2.637	32.960	1.00	19.53	A
ATOM	2274	CD2	LEU	304	28.178	0.835	32.205	1.00	21.49	A
ATOM	2275	C	LEU	304	31.388	3.381	33.455	1.00	19.00	A
ATOM	2276	O	LEU	304	31.732	3.616	32.305	1.00	20.53	A
ATOM	2277	N	ALA	305	31.930	3.968	34.539	1.00	19.05	A
ATOM	2278	CA	ALA	305	33.009	4.906	34.334	1.00	18.98	A
ATOM	2279	CB	ALA	305	33.523	5.470	35.645	1.00	18.76	A
ATOM	2280	C	ALA	305	34.162	4.293	33.554	1.00	19.43	A
ATOM	2281	O	ALA	305	34.589	3.164	33.763	1.00	19.28	A
ATOM	2282	N	ASP	306	34.636	5.119	32.646	1.00	20.10	A
ATOM	2283	CA	ASP	306	35.759	4.773	31.780	1.00	20.88	A
ATOM	2284	CB	ASP	306	35.214	3.891	30.621	1.00	20.87	A
ATOM	2285	CG	ASP	306	34.317	4.641	29.656	1.00	22.91	A
ATOM	2286	OD1	ASP	306	33.729	4.008	28.782	1.00	23.09	A
ATOM	2287	OD2	ASP	306	34.177	5.852	29.792	1.00	22.73	A
ATOM	2288	C	ASP	306	36.518	5.999	31.247	1.00	21.50	A
ATOM	2289	OCT1	ASP	306	36.371	7.146	31.714	1.00	17.22	A
ATOM	2290	OCT2	ASP	306	37.248	5.811	30.281	1.00	23.13	A
ATOM	2291	PB	ADP	800	17.755	23.642	30.020	1.00	9.82	ADP
ATOM	2292	O1B	ADP	800	19.092	23.186	29.650	1.00	10.70	ADP
ATOM	2293	O2B	ADP	800	17.996	24.954	30.653	1.00	10.01	ADP
ATOM	2294	O3B	ADP	800	17.019	22.695	30.880	1.00	9.48	ADP
ATOM	2295	P1	ADP	800	15.854	23.206	27.956	1.00	9.24	ADP
ATOM	2296	O1	ADP	800	15.911	23.333	26.475	1.00	9.58	ADP
ATOM	2297	O2	ADP	800	15.512	21.936	28.292	1.00	10.22	ADP
ATOM	2298	O3	ADP	800	17.118	23.813	28.602	1.00	7.35	ADP
ATOM	2299	O4	ADP	800	14.650	24.156	28.387	1.00	10.44	ADP
ATOM	2300	C1	ADP	800	14.221	24.213	29.783	1.00	11.50	ADP
ATOM	2301	C3	ADP	800	12.671	24.222	29.866	1.00	9.43	ADP
ATOM	2302	O5	ADP	800	12.095	25.233	29.050	1.00	12.32	ADP
ATOM	2303	C7	ADP	800	12.054	22.968	29.327	1.00	8.44	ADP
ATOM	2304	O6	ADP	800	12.185	21.989	30.347	1.00	7.81	ADP
ATOM	2305	C9	ADP	800	10.614	23.301	28.949	1.00	12.51	ADP
ATOM	2306	O7	ADP	800	9.802	23.415	30.129	1.00	10.80	ADP
ATOM	2307	C10	ADP	800	10.966	24.684	28.392	1.00	11.04	ADP
ATOM	2308	N2	ADP	800	11.086	24.702	26.960	1.00	11.90	ADP
ATOM	2309	C11	ADP	800	12.297	24.584	26.315	1.00	12.39	ADP
ATOM	2310	N4	ADP	800	12.109	24.715	24.974	1.00	12.52	ADP
ATOM	2311	C12	ADP	800	10.772	24.930	24.777	1.00	11.34	ADP
ATOM	2312	C13	ADP	800	9.974	25.213	23.689	1.00	12.40	ADP
ATOM	2313	N5	ADP	800	10.530	25.372	22.445	1.00	13.02	ADP
ATOM	2314	N8	ADP	800	8.680	25.431	23.876	1.00	10.67	ADP
ATOM	2315	C14	ADP	800	8.082	25.358	25.067	1.00	11.23	ADP

44/90

ATOM	2316	N10	ADP	800	8.706	25.079	26.215	1.00	9.10	ADP
ATOM	2317	C15	ADP	800	10.082	24.894	26.069	1.00	11.09	ADP
ATOM	2318	P1	PHOS	801	18.221	20.488	32.767	1.00	8.05	PHOS
ATOM	2319	O1	PHOS	801	17.102	20.141	31.932	1.00	9.02	PHOS
ATOM	2320	O2	PHOS	801	18.813	19.228	33.269	1.00	11.91	PHOS
ATOM	2321	O3	PHOS	801	17.715	21.328	33.891	1.00	10.65	PHOS
ATOM	2322	O4	PHOS	801	19.185	21.323	32.170	1.00	10.03	PHOS
ATOM	2323	MG	MG	802	16.306	20.834	30.056	1.00	11.13	MG
ATOM	2324	MG	MG	803	19.912	21.175	30.167	1.00	7.44	MG
ATOM	2325	N	DALA	804	21.135	19.998	34.499	1.00	9.30	DALA
ATOM	2326	CA	DALA	804	20.380	20.048	35.814	1.00	9.92	DALA
ATOM	2327	CB	DALA	804	21.357	19.853	36.987	1.00	11.02	DALA
ATOM	2328	C	DALA	804	19.334	18.966	35.901	1.00	10.91	DALA
ATOM	2329	O	DALA	804	19.571	17.829	35.514	1.00	10.49	DALA
ATOM	2330	N1	DALA	804	18.124	19.405	36.299	1.00	10.56	DALA
ATOM	2331	C1	DALA	804	16.993	18.476	36.378	1.00	11.27	DALA
ATOM	2332	C2	DALA	804	15.699	19.219	36.621	1.00	12.35	DALA
ATOM	2333	C3	DALA	804	17.143	17.502	37.528	1.00	9.73	DALA
ATOM	2334	OCT1	DALA	804	17.726	17.914	38.514	1.00	9.96	DALA
ATOM	2335	OCT2	DALA	804	16.745	16.345	37.402	1.00	9.92	DALA
END										

FIG. 9

REMARK	FILENAME	Ligase	complexed with	AMPPNP						
ATOM	1	N	MET	1	41.536	0.400	51.387	1.00	15.00	A
ATOM	5	CA	MET	1	42.745	-0.414	51.196	1.00	15.00	A
ATOM	6	CB	MET	1	42.435	-1.931	51.166	1.00	15.00	A
ATOM	7	CG	MET	1	43.766	-2.695	51.194	1.00	15.00	A
ATOM	8	SD	MET	1	43.376	-4.352	50.850	1.00	15.00	A
ATOM	9	CE	MET	1	45.074	-4.867	50.468	1.00	15.00	A
ATOM	10	C	MET	1	43.637	-0.080	49.972	1.00	15.00	A
ATOM	11	O	MET	1	44.803	0.197	50.262	1.00	15.00	A
ATOM	12	N	THR	2	43.071	-0.148	48.677	1.00	15.00	A
ATOM	14	CA	THR	2	43.492	0.247	47.250	1.00	15.00	A
ATOM	15	CB	THR	2	44.398	-0.822	46.518	1.00	15.00	A
ATOM	16	CG1	THR	2	45.534	-0.136	45.943	1.00	15.00	A
ATOM	18	CG2	THR	2	43.662	-1.666	45.406	1.00	15.00	A
ATOM	19	C	THR	2	42.471	0.751	46.150	1.00	15.00	A
ATOM	20	O	THR	2	42.907	1.503	45.273	1.00	15.00	A
ATOM	21	N	ASP	3	41.147	0.274	46.095	1.00	15.00	A
ATOM	23	CA	ASP	3	40.260	0.757	44.977	1.00	15.00	A
ATOM	24	CB	ASP	3	39.334	-0.230	44.306	1.00	15.00	A
ATOM	25	CG	ASP	3	39.178	0.116	42.832	1.00	15.00	A
ATOM	26	OD1	ASP	3	38.451	1.036	42.507	1.00	15.00	A
ATOM	27	OD2	ASP	3	39.711	-0.587	41.946	1.00	15.00	A
ATOM	28	C	ASP	3	39.331	1.900	45.275	1.00	15.00	A
ATOM	29	O	ASP	3	38.101	1.796	45.349	1.00	15.00	A
ATOM	30	N	LYS	4	40.070	2.980	45.442	1.00	15.00	A
ATOM	32	CA	LYS	4	39.536	4.242	45.900	1.00	15.00	A
ATOM	33	CB	LYS	4	40.733	5.030	46.426	1.00	15.00	A
ATOM	34	CG	LYS	4	40.294	6.249	47.210	1.00	15.00	A
ATOM	35	CD	LYS	4	41.443	7.058	47.895	1.00	15.00	A
ATOM	36	CE	LYS	4	42.556	6.171	48.400	1.00	15.00	A
ATOM	37	NZ	LYS	4	43.569	5.963	47.345	1.00	15.00	A
ATOM	41	C	LYS	4	38.865	4.986	44.757	1.00	15.00	A
ATOM	42	O	LYS	4	39.397	4.991	43.671	1.00	15.00	A
ATOM	43	N	ILE	5	37.723	5.589	45.050	1.00	15.00	A
ATOM	45	CA	ILE	5	36.952	6.274	44.030	1.00	15.00	A
ATOM	46	CB	ILE	5	35.560	5.582	43.851	1.00	15.00	A
ATOM	47	CG2	ILE	5	34.754	6.228	42.741	1.00	15.00	A
ATOM	48	CG1	ILE	5	35.557	4.040	43.629	1.00	15.00	A
ATOM	49	CD1	ILE	5	36.186	3.506	42.381	1.00	15.00	A
ATOM	50	C	ILE	5	36.760	7.722	44.415	1.00	15.00	A
ATOM	51	O	ILE	5	36.384	8.079	45.540	1.00	15.00	A
ATOM	52	N	ALA	6	37.010	8.555	43.408	1.00	15.00	A
ATOM	54	CA	ALA	6	36.705	9.961	43.651	1.00	15.00	A
ATOM	55	CB	ALA	6	37.805	10.860	43.037	1.00	15.00	A
ATOM	56	C	ALA	6	35.325	10.433	43.188	1.00	15.00	A
ATOM	57	O	ALA	6	34.948	10.388	42.010	1.00	15.00	A
ATOM	58	N	VAL	7	34.589	10.938	44.160	1.00	15.00	A
ATOM	60	CA	VAL	7	33.425	11.674	43.719	1.00	15.00	A
ATOM	61	CB	VAL	7	32.209	11.479	44.631	1.00	15.00	A
ATOM	62	CG1	VAL	7	31.029	12.205	43.965	1.00	15.00	A
ATOM	63	CG2	VAL	7	31.897	10.021	44.956	1.00	15.00	A
ATOM	64	C	VAL	7	33.679	13.158	43.618	1.00	15.00	A
ATOM	65	O	VAL	7	33.742	13.875	44.609	1.00	15.00	A
ATOM	66	N	LEU	8	33.786	13.612	42.355	1.00	15.00	A
ATOM	68	CA	LEU	8	34.018	15.036	42.163	1.00	15.00	A
ATOM	69	CB	LEU	8	34.703	15.317	40.791	1.00	15.00	A
ATOM	70	CG	LEU	8	36.172	14.858	40.744	1.00	15.00	A
ATOM	71	CD1	LEU	8	36.778	14.893	39.352	1.00	15.00	A
ATOM	72	CD2	LEU	8	36.946	15.803	41.656	1.00	15.00	A

46/90

ATOM	73	C	LEU	8	32.752	15.795	42.301	1.00	15.00	A
ATOM	74	O	LEU	8	31.790	15.525	41.639	1.00	15.00	A
ATOM	75	N	LEU	9	32.739	16.714	43.257	1.00	15.00	A
ATOM	77	CA	LEU	9	31.578	17.581	43.485	1.00	15.00	A
ATOM	78	CB	LEU	9	30.622	17.165	44.619	1.00	15.00	A
ATOM	79	CG	LEU	9	31.162	16.522	45.903	1.00	15.00	A
ATOM	80	CD1	LEU	9	32.622	16.730	46.352	1.00	15.00	A
ATOM	81	CD2	LEU	9	30.178	16.688	47.092	1.00	15.00	A
ATOM	82	C	LEU	9	32.034	18.956	43.969	1.00	15.00	A
ATOM	83	O	LEU	9	33.147	19.163	44.436	1.00	15.00	A
ATOM	84	N	GLY	10	31.069	19.846	43.846	1.00	15.00	A
ATOM	86	CA	GLY	10	31.239	21.235	44.230	1.00	15.00	A
ATOM	87	C	GLY	10	31.876	21.972	43.086	1.00	15.00	A
ATOM	88	O	GLY	10	31.219	22.171	42.090	1.00	15.00	A
ATOM	89	N	GLY	11	33.163	22.315	43.247	1.00	15.00	A
ATOM	91	CA	GLY	11	33.922	23.042	42.247	1.00	15.00	A
ATOM	92	C	GLY	11	33.658	24.524	42.279	1.00	15.00	A
ATOM	93	O	GLY	11	33.087	25.008	43.218	1.00	15.00	A
ATOM	94	N	THR	12	34.051	25.254	41.202	1.00	15.00	A
ATOM	96	CA	THR	12	33.887	26.717	41.324	1.00	15.00	A
ATOM	97	CB	THR	12	35.243	27.451	41.115	1.00	15.00	A
ATOM	98	OG1	THR	12	35.350	27.890	39.757	1.00	15.00	A
ATOM	100	CG2	THR	12	36.518	26.689	41.455	1.00	15.00	A
ATOM	101	C	THR	12	32.766	27.324	40.493	1.00	15.00	A
ATOM	102	O	THR	12	32.449	28.519	40.518	1.00	15.00	A
ATOM	103	N	SER	13	32.160	26.425	39.737	1.00	15.00	A
ATOM	105	CA	SER	13	31.003	26.754	38.902	1.00	15.00	A
ATOM	106	CB	SER	13	30.389	25.514	38.203	1.00	15.00	A
ATOM	107	OG	SER	13	29.832	24.525	39.133	1.00	15.00	A
ATOM	109	C	SER	13	29.890	27.407	39.651	1.00	15.00	A
ATOM	110	O	SER	13	29.657	27.240	40.817	1.00	15.00	A
ATOM	111	N	ALA	14	29.109	28.044	38.858	1.00	15.00	A
ATOM	113	CA	ALA	14	27.742	28.501	39.111	1.00	15.00	A
ATOM	114	CB	ALA	14	27.019	28.631	37.779	1.00	15.00	A
ATOM	115	C	ALA	14	26.838	27.576	39.869	1.00	15.00	A
ATOM	116	O	ALA	14	26.133	27.956	40.820	1.00	15.00	A
ATOM	117	N	GLU	15	26.821	26.358	39.311	1.00	15.00	A
ATOM	119	CA	GLU	15	25.953	25.296	39.840	1.00	15.00	A
ATOM	120	CB	GLU	15	25.607	24.330	38.688	1.00	15.00	A
ATOM	121	CG	GLU	15	24.565	24.778	37.691	1.00	15.00	A
ATOM	122	CD	GLU	15	25.054	25.401	36.386	1.00	15.00	A
ATOM	123	OE1	GLU	15	25.216	26.619	36.363	1.00	15.00	A
ATOM	124	OE2	GLU	15	25.193	24.713	35.339	1.00	15.00	A
ATOM	125	C	GLU	15	26.530	24.505	41.007	1.00	15.00	A
ATOM	126	O	GLU	15	26.177	23.364	41.266	1.00	15.00	A
ATOM	127	N	ARG	16	27.441	25.211	41.720	1.00	15.00	A
ATOM	129	CA	ARG	16	28.082	24.735	42.942	1.00	15.00	A
ATOM	130	CB	ARG	16	28.974	25.828	43.612	1.00	15.00	A
ATOM	131	CG	ARG	16	29.725	25.243	44.823	1.00	15.00	A
ATOM	132	CD	ARG	16	30.896	26.063	45.416	1.00	15.00	A
ATOM	133	NE	ARG	16	31.286	25.459	46.695	1.00	15.00	A
ATOM	135	CZ	ARG	16	32.261	24.580	46.869	1.00	15.00	A
ATOM	136	NH1	ARG	16	32.969	24.212	45.804	1.00	15.00	A
ATOM	139	NH2	ARG	16	32.519	24.101	48.105	1.00	15.00	A
ATOM	142	C	ARG	16	27.220	24.115	43.986	1.00	15.00	A
ATOM	143	O	ARG	16	27.531	23.062	44.535	1.00	15.00	A
ATOM	144	N	GLU	17	26.089	24.787	44.223	1.00	15.00	A
ATOM	146	CA	GLU	17	25.212	24.243	45.256	1.00	15.00	A
ATOM	147	CB	GLU	17	24.167	25.251	45.691	1.00	15.00	A
ATOM	148	CG	GLU	17	23.288	24.637	46.740	1.00	15.00	A
ATOM	149	CD	GLU	17	22.376	25.587	47.460	1.00	15.00	A

47/90

ATOM	150	OE1	GLU	17	21.255	25.789	46.944	1.00	15.00	A
ATOM	151	OE2	GLU	17	22.782	26.103	48.546	1.00	15.00	A
ATOM	152	C	GLU	17	24.578	22.969	44.873	1.00	15.00	A
ATOM	153	O	GLU	17	24.509	21.999	45.638	1.00	15.00	A
ATOM	154	N	VAL	18	24.137	23.005	43.618	1.00	15.00	A
ATOM	156	CA	VAL	18	23.480	21.831	43.050	1.00	15.00	A
ATOM	157	CB	VAL	18	22.992	22.096	41.614	1.00	15.00	A
ATOM	158	CG1	VAL	18	22.082	20.932	41.157	1.00	15.00	A
ATOM	159	CG2	VAL	18	22.402	23.484	41.365	1.00	15.00	A
ATOM	160	C	VAL	18	24.468	20.641	43.090	1.00	15.00	A
ATOM	161	O	VAL	18	24.104	19.530	43.420	1.00	15.00	A
ATOM	162	N	SER	19	25.739	20.954	42.787	1.00	15.00	A
ATOM	164	CA	SER	19	26.682	19.871	42.729	1.00	15.00	A
ATOM	165	CB	SER	19	27.848	20.341	41.866	1.00	15.00	A
ATOM	166	OG	SER	19	29.030	19.543	42.004	1.00	15.00	A
ATOM	168	C	SER	19	27.060	19.328	44.107	1.00	15.00	A
ATOM	169	O	SER	19	27.289	18.142	44.211	1.00	15.00	A
ATOM	170	N	LEU	20	27.116	20.203	45.149	1.00	15.00	A
ATOM	172	CA	LEU	20	27.467	19.615	46.447	1.00	15.00	A
ATOM	173	CB	LEU	20	27.647	20.700	47.495	1.00	15.00	A
ATOM	174	CG	LEU	20	29.044	21.353	47.514	1.00	15.00	A
ATOM	175	CD1	LEU	20	29.158	22.078	48.860	1.00	15.00	A
ATOM	176	CD2	LEU	20	30.169	20.321	47.639	1.00	15.00	A
ATOM	177	C	LEU	20	26.400	18.671	46.933	1.00	15.00	A
ATOM	178	O	LEU	20	26.643	17.576	47.398	1.00	15.00	A
ATOM	179	N	ASN	21	25.175	19.124	46.703	1.00	15.00	A
ATOM	181	CA	ASN	21	24.029	18.285	47.003	1.00	15.00	A
ATOM	182	CB	ASN	21	22.785	19.078	46.641	1.00	15.00	A
ATOM	183	CG	ASN	21	22.475	20.158	47.662	1.00	15.00	A
ATOM	184	OD1	ASN	21	21.738	21.078	47.337	1.00	15.00	A
ATOM	185	ND2	ASN	21	23.035	20.008	48.865	1.00	15.00	A
ATOM	188	C	ASN	21	23.947	16.984	46.237	1.00	15.00	A
ATOM	189	O	ASN	21	23.706	15.941	46.826	1.00	15.00	A
ATOM	190	N	SER	22	24.120	17.079	44.910	1.00	15.00	A
ATOM	192	CA	SER	22	24.130	15.791	44.180	1.00	15.00	A
ATOM	193	CB	SER	22	24.313	15.850	42.665	1.00	15.00	A
ATOM	194	OG	SER	22	23.208	16.565	42.149	1.00	15.00	A
ATOM	196	C	SER	22	25.203	14.884	44.607	1.00	15.00	A
ATOM	197	O	SER	22	24.990	13.685	44.721	1.00	15.00	A
ATOM	198	N	GLY	23	26.376	15.524	44.782	1.00	15.00	A
ATOM	200	CA	GLY	23	27.576	14.743	45.106	1.00	15.00	A
ATOM	201	C	GLY	23	27.495	14.007	46.445	1.00	15.00	A
ATOM	202	O	GLY	23	28.009	12.925	46.646	1.00	15.00	A
ATOM	203	N	ALA	24	26.820	14.679	47.367	1.00	15.00	A
ATOM	205	CA	ALA	24	26.664	14.035	48.691	1.00	15.00	A
ATOM	206	CB	ALA	24	25.993	15.003	49.704	1.00	15.00	A
ATOM	207	C	ALA	24	25.782	12.806	48.556	1.00	15.00	A
ATOM	208	O	ALA	24	26.000	11.758	49.122	1.00	15.00	A
ATOM	209	N	ALA	25	24.772	12.987	47.721	1.00	15.00	A
ATOM	211	CA	ALA	25	23.909	11.846	47.530	1.00	15.00	A
ATOM	212	CB	ALA	25	22.666	12.274	46.806	1.00	15.00	A
ATOM	213	C	ALA	25	24.554	10.658	46.830	1.00	15.00	A
ATOM	214	O	ALA	25	24.409	9.513	47.220	1.00	15.00	A
ATOM	215	N	VAL	26	25.311	11.019	45.804	1.00	15.00	A
ATOM	217	CA	VAL	26	26.089	9.990	45.131	1.00	15.00	A
ATOM	218	CB	VAL	26	26.827	10.635	43.930	1.00	15.00	A
ATOM	219	CG1	VAL	26	27.902	9.710	43.365	1.00	15.00	A
ATOM	220	CG2	VAL	26	25.803	11.086	42.866	1.00	15.00	A
ATOM	221	C	VAL	26	27.065	9.267	46.055	1.00	15.00	A
ATOM	222	O	VAL	26	27.205	8.059	46.053	1.00	15.00	A
ATOM	223	N	LEU	27	27.749	10.079	46.869	1.00	15.00	A

ATOM	225	CA	LEU	27	28.719	9.532	47.785	1.00	15.00	A
ATOM	226	CB	LEU	27	29.331	10.722	48.563	1.00	15.00	A
ATOM	227	CG	LEU	27	30.337	10.389	49.663	1.00	15.00	A
ATOM	228	CD1	LEU	27	31.551	9.652	49.144	1.00	15.00	A
ATOM	229	CD2	LEU	27	30.607	11.743	50.322	1.00	15.00	A
ATOM	230	C	LEU	27	28.077	8.516	48.742	1.00	15.00	A
ATOM	231	O	LEU	27	28.535	7.403	48.883	1.00	15.00	A
ATOM	232	N	ALA	28	26.959	8.928	49.327	1.00	15.00	A
ATOM	234	CA	ALA	28	26.368	7.931	50.201	1.00	15.00	A
ATOM	235	CB	ALA	28	25.280	8.597	51.068	1.00	15.00	A
ATOM	236	C	ALA	28	25.913	6.659	49.467	1.00	15.00	A
ATOM	237	O	ALA	28	26.029	5.531	49.935	1.00	15.00	A
ATOM	238	N	GLY	29	25.390	6.871	48.232	1.00	15.00	A
ATOM	240	CA	GLY	29	24.783	5.657	47.708	1.00	15.00	A
ATOM	241	C	GLY	29	25.806	4.704	47.194	1.00	15.00	A
ATOM	242	O	GLY	29	25.668	3.501	47.227	1.00	15.00	A
ATOM	243	N	LEU	30	26.909	5.317	46.792	1.00	15.00	A
ATOM	245	CA	LEU	30	28.091	4.529	46.523	1.00	15.00	A
ATOM	246	CB	LEU	30	29.215	5.411	45.965	1.00	15.00	A
ATOM	247	CG	LEU	30	29.032	5.781	44.471	1.00	15.00	A
ATOM	248	CD1	LEU	30	30.121	6.742	44.025	1.00	15.00	A
ATOM	249	CD2	LEU	30	28.967	4.523	43.568	1.00	15.00	A
ATOM	250	C	LEU	30	28.608	3.728	47.683	1.00	15.00	A
ATOM	251	O	LEU	30	28.852	2.539	47.558	1.00	15.00	A
ATOM	252	N	ARG	31	28.766	4.408	48.845	1.00	15.00	A
ATOM	254	CA	ARG	31	29.268	3.529	49.924	1.00	15.00	A
ATOM	255	CB	ARG	31	29.899	4.288	51.048	1.00	15.00	A
ATOM	256	CG	ARG	31	29.234	5.572	51.357	1.00	15.00	A
ATOM	257	CD	ARG	31	30.350	6.634	51.484	1.00	15.00	A
ATOM	258	NE	ARG	31	31.507	6.019	52.129	1.00	15.00	A
ATOM	260	CZ	ARG	31	32.748	6.485	51.960	1.00	15.00	A
ATOM	261	NH1	ARG	31	33.844	5.648	52.074	1.00	15.00	A
ATOM	264	NH2	ARG	31	32.845	7.798	51.710	1.00	15.00	A
ATOM	267	C	ARG	31	28.299	2.583	50.593	1.00	15.00	A
ATOM	268	O	ARG	31	28.705	1.543	51.074	1.00	15.00	A
ATOM	269	N	GLU	32	27.012	2.931	50.556	1.00	15.00	A
ATOM	271	CA	GLU	32	26.010	1.892	50.774	1.00	15.00	A
ATOM	272	CB	GLU	32	24.587	2.459	50.566	1.00	15.00	A
ATOM	273	CG	GLU	32	24.291	3.459	51.670	1.00	15.00	A
ATOM	274	CD	GLU	32	23.181	4.384	51.375	1.00	15.00	A
ATOM	275	OE1	GLU	32	22.486	4.194	50.395	1.00	15.00	A
ATOM	276	OE2	GLU	32	22.972	5.331	52.120	1.00	15.00	A
ATOM	277	C	GLU	32	26.124	0.718	49.852	1.00	15.00	A
ATOM	278	O	GLU	32	25.812	-0.406	50.200	1.00	15.00	A
ATOM	279	N	GLY	33	26.558	1.026	48.656	1.00	15.00	A
ATOM	281	CA	GLY	33	26.707	-0.048	47.670	1.00	15.00	A
ATOM	282	C	GLY	33	28.023	-0.867	47.779	1.00	15.00	A
ATOM	283	O	GLY	33	28.267	-1.694	46.936	1.00	15.00	A
ATOM	284	N	GLY	34	28.844	-0.622	48.818	1.00	15.00	A
ATOM	286	CA	GLY	34	30.163	-1.298	48.939	1.00	15.00	A
ATOM	287	C	GLY	34	31.374	-0.543	48.341	1.00	15.00	A
ATOM	288	O	GLY	34	32.505	-1.011	48.357	1.00	15.00	A
ATOM	289	N	ILE	35	31.121	0.683	47.850	1.00	15.00	A
ATOM	291	CA	ILE	35	32.208	1.305	47.078	1.00	15.00	A
ATOM	292	CB	ILE	35	31.612	2.061	45.867	1.00	15.00	A
ATOM	293	CG2	ILE	35	32.594	2.844	44.971	1.00	15.00	A
ATOM	294	CG1	ILE	35	30.771	1.109	45.001	1.00	15.00	A
ATOM	295	CD1	ILE	35	31.535	-0.052	44.390	1.00	15.00	A
ATOM	296	C	ILE	35	32.997	2.256	47.879	1.00	15.00	A
ATOM	297	O	ILE	35	32.411	3.066	48.595	1.00	15.00	A
ATOM	298	N	ASP	36	34.349	2.118	47.737	1.00	15.00	A

ATOM	300	CA	ASP	36	35.176	2.909	48.638	1.00	15.00	A
ATOM	301	CB	ASP	36	36.436	2.093	49.017	1.00	15.00	A
ATOM	302	CG	ASP	36	37.240	2.825	50.063	1.00	15.00	A
ATOM	303	OD1	ASP	36	36.697	3.657	50.790	1.00	15.00	A
ATOM	304	OD2	ASP	36	38.419	2.581	50.148	1.00	15.00	A
ATOM	305	C	ASP	36	35.513	4.233	48.020	1.00	15.00	A
ATOM	306	O	ASP	36	36.572	4.401	47.442	1.00	15.00	A
ATOM	307	N	ALA	37	34.552	5.134	48.191	1.00	15.00	A
ATOM	309	CA	ALA	37	34.471	6.415	47.494	1.00	15.00	A
ATOM	310	CB	ALA	37	33.099	6.536	46.801	1.00	15.00	A
ATOM	311	C	ALA	37	34.621	7.630	48.401	1.00	15.00	A
ATOM	312	O	ALA	37	34.209	7.625	49.529	1.00	15.00	A
ATOM	313	N	TYR	38	35.212	8.675	47.891	1.00	15.00	A
ATOM	315	CA	TYR	38	35.482	9.849	48.721	1.00	15.00	A
ATOM	316	CB	TYR	38	36.974	9.877	49.178	1.00	15.00	A
ATOM	317	CG	TYR	38	37.360	8.641	49.980	1.00	15.00	A
ATOM	318	CD1	TYR	38	37.844	7.501	49.324	1.00	15.00	A
ATOM	319	CE1	TYR	38	38.233	6.356	50.047	1.00	15.00	A
ATOM	320	CD2	TYR	38	37.254	8.665	51.391	1.00	15.00	A
ATOM	321	CE2	TYR	38	37.654	7.529	52.126	1.00	15.00	A
ATOM	322	CZ	TYR	38	38.140	6.373	51.458	1.00	15.00	A
ATOM	323	OH	TYR	38	38.521	5.266	52.189	1.00	15.00	A
ATOM	325	C	TYR	38	35.161	11.095	47.974	1.00	15.00	A
ATOM	326	O	TYR	38	35.381	11.148	46.775	1.00	15.00	A
ATOM	327	N	PRO	39	34.714	12.123	48.718	1.00	15.00	A
ATOM	328	CD	PRO	39	34.557	12.200	50.191	1.00	15.00	A
ATOM	329	CA	PRO	39	34.416	13.368	48.047	1.00	15.00	A
ATOM	330	CB	PRO	39	33.553	14.049	49.106	1.00	15.00	A
ATOM	331	CG	PRO	39	34.086	13.621	50.465	1.00	15.00	A
ATOM	332	C	PRO	39	35.729	14.104	47.805	1.00	15.00	A
ATOM	333	O	PRO	39	36.600	14.105	48.656	1.00	15.00	A
ATOM	334	N	VAL	40	35.838	14.666	46.582	1.00	15.00	A
ATOM	336	CA	VAL	40	36.864	15.657	46.289	1.00	15.00	A
ATOM	337	CB	VAL	40	38.230	15.094	45.817	1.00	15.00	A
ATOM	338	CG1	VAL	40	38.419	13.594	46.016	1.00	15.00	A
ATOM	339	CG2	VAL	40	38.795	15.521	44.469	1.00	15.00	A
ATOM	340	C	VAL	40	36.314	16.849	45.512	1.00	15.00	A
ATOM	341	O	VAL	40	35.590	16.804	44.544	1.00	15.00	A
ATOM	342	N	ASP	41	36.624	17.991	46.103	1.00	15.00	A
ATOM	344	CA	ASP	41	36.065	19.215	45.567	1.00	15.00	A
ATOM	345	CB	ASP	41	35.574	19.974	46.802	1.00	15.00	A
ATOM	346	CG	ASP	41	34.835	21.235	46.444	1.00	15.00	A
ATOM	347	OD1	ASP	41	34.166	21.799	47.343	1.00	15.00	A
ATOM	348	OD2	ASP	41	34.948	21.672	45.283	1.00	15.00	A
ATOM	349	C	ASP	41	37.151	19.948	44.893	1.00	15.00	A
ATOM	350	O	ASP	41	38.125	20.264	45.562	1.00	15.00	A
ATOM	351	N	PRO	42	37.022	20.216	43.583	1.00	15.00	A
ATOM	352	CD	PRO	42	35.954	19.935	42.632	1.00	15.00	A
ATOM	353	CA	PRO	42	38.165	20.832	42.963	1.00	15.00	A
ATOM	354	CB	PRO	42	38.007	20.457	41.500	1.00	15.00	A
ATOM	355	CG	PRO	42	36.499	20.449	41.293	1.00	15.00	A
ATOM	356	C	PRO	42	38.268	22.336	43.175	1.00	15.00	A
ATOM	357	O	PRO	42	39.162	22.969	42.625	1.00	15.00	A
ATOM	358	N	LYS	43	37.395	22.870	44.022	1.00	15.00	A
ATOM	360	CA	LYS	43	37.626	24.204	44.500	1.00	15.00	A
ATOM	361	CB	LYS	43	36.344	24.781	45.142	1.00	15.00	A
ATOM	362	CG	LYS	43	36.623	26.219	45.614	1.00	15.00	A
ATOM	363	CD	LYS	43	35.601	26.758	46.621	1.00	15.00	A
ATOM	364	CE	LYS	43	34.352	27.224	45.841	1.00	15.00	A
ATOM	365	NZ	LYS	43	33.513	28.184	46.599	1.00	15.00	A
ATOM	369	C	LYS	43	38.803	24.211	45.499	1.00	15.00	A

ATOM	370	O	LYS	43	39.471	25.231	45.582	1.00	15.00	A
ATOM	371	N	GLU	44	39.037	23.063	46.161	1.00	15.00	A
ATOM	373	CA	GLU	44	40.133	22.897	47.147	1.00	15.00	A
ATOM	374	CB	GLU	44	39.519	22.571	48.535	1.00	15.00	A
ATOM	375	CG	GLU	44	39.188	21.092	48.802	1.00	15.00	A
ATOM	376	CD	GLU	44	38.524	20.950	50.141	1.00	15.00	A
ATOM	377	OE1	GLU	44	38.750	21.804	51.031	1.00	15.00	A
ATOM	378	OE2	GLU	44	37.719	20.009	50.267	1.00	15.00	A
ATOM	379	C	GLU	44	41.217	21.897	46.828	1.00	15.00	A
ATOM	380	O	GLU	44	42.222	21.814	47.506	1.00	15.00	A
ATOM	381	N	VAL	45	41.011	21.106	45.778	1.00	15.00	A
ATOM	383	CA	VAL	45	41.942	20.050	45.366	1.00	15.00	A
ATOM	384	CB	VAL	45	41.358	18.642	45.674	1.00	15.00	A
ATOM	385	CG1	VAL	45	42.124	17.442	45.065	1.00	15.00	A
ATOM	386	CG2	VAL	45	41.343	18.478	47.198	1.00	15.00	A
ATOM	387	C	VAL	45	42.226	20.123	43.888	1.00	15.00	A
ATOM	388	O	VAL	45	41.360	20.130	43.023	1.00	15.00	A
ATOM	389	N	ASP	46	43.499	20.197	43.642	1.00	15.00	A
ATOM	391	CA	ASP	46	43.795	20.235	42.236	1.00	15.00	A
ATOM	392	CB	ASP	46	45.004	21.166	42.040	1.00	15.00	A
ATOM	393	CG	ASP	46	46.314	20.723	42.663	1.00	15.00	A
ATOM	394	OD1	ASP	46	46.964	21.517	43.389	1.00	15.00	A
ATOM	395	OD2	ASP	46	46.702	19.572	42.397	1.00	15.00	A
ATOM	396	C	ASP	46	43.702	18.844	41.644	1.00	15.00	A
ATOM	397	O	ASP	46	44.413	17.902	41.997	1.00	15.00	A
ATOM	398	N	VAL	47	42.679	18.719	40.747	1.00	15.00	A
ATOM	400	CA	VAL	47	42.490	17.386	40.144	1.00	15.00	A
ATOM	401	CB	VAL	47	41.297	17.392	39.156	1.00	15.00	A
ATOM	402	CG1	VAL	47	40.140	18.231	39.612	1.00	15.00	A
ATOM	403	CG2	VAL	47	41.712	17.819	37.771	1.00	15.00	A
ATOM	404	C	VAL	47	43.687	16.689	39.424	1.00	15.00	A
ATOM	405	O	VAL	47	43.670	15.487	39.189	1.00	15.00	A
ATOM	406	N	THR	48	44.762	17.455	39.084	1.00	15.00	A
ATOM	408	CA	THR	48	45.884	16.651	38.580	1.00	15.00	A
ATOM	409	CB	THR	48	46.944	17.552	37.986	1.00	15.00	A
ATOM	410	OG1	THR	48	47.787	18.049	39.019	1.00	15.00	A
ATOM	412	CG2	THR	48	46.332	18.729	37.258	1.00	15.00	A
ATOM	413	C	THR	48	46.482	15.664	39.599	1.00	15.00	A
ATOM	414	O	THR	48	47.122	14.674	39.285	1.00	15.00	A
ATOM	415	N	GLN	49	46.228	16.007	40.866	1.00	15.00	A
ATOM	417	CA	GLN	49	46.837	15.186	41.915	1.00	15.00	A
ATOM	418	CB	GLN	49	47.230	16.152	43.068	1.00	15.00	A
ATOM	419	CG	GLN	49	46.147	16.414	44.162	1.00	15.00	A
ATOM	420	CD	GLN	49	46.606	17.095	45.463	1.00	15.00	A
ATOM	421	OE1	GLN	49	45.842	17.854	46.068	1.00	15.00	A
ATOM	422	NE2	GLN	49	47.826	16.790	45.942	1.00	15.00	A
ATOM	425	C	GLN	49	46.036	13.937	42.307	1.00	15.00	A
ATOM	426	O	GLN	49	46.443	13.075	43.076	1.00	15.00	A
ATOM	427	N	LEU	50	44.837	13.819	41.680	1.00	15.00	A
ATOM	429	CA	LEU	50	44.207	12.518	41.759	1.00	15.00	A
ATOM	430	CB	LEU	50	42.948	12.472	40.894	1.00	15.00	A
ATOM	431	CG	LEU	50	41.575	12.873	41.437	1.00	15.00	A
ATOM	432	CD1	LEU	50	41.603	13.965	42.477	1.00	15.00	A
ATOM	433	CD2	LEU	50	40.692	13.180	40.204	1.00	15.00	A
ATOM	434	C	LEU	50	45.110	11.631	40.984	1.00	15.00	A
ATOM	435	O	LEU	50	45.326	11.829	39.804	1.00	15.00	A
ATOM	436	N	LYS	51	45.615	10.647	41.677	1.00	15.00	A
ATOM	438	CA	LYS	51	46.391	9.458	41.327	1.00	15.00	A
ATOM	439	CB	LYS	51	46.956	9.201	39.922	1.00	15.00	A
ATOM	440	CG	LYS	51	47.468	7.734	39.761	1.00	15.00	A
ATOM	441	CD	LYS	51	46.532	6.472	40.009	1.00	15.00	A

ATOM	442	CE	LYS	51	46.725	5.662	41.341	1.00	15.00	A
ATOM	443	NZ	LYS	51	48.002	4.919	41.454	1.00	15.00	A
ATOM	447	C	LYS	51	47.417	9.332	42.381	1.00	15.00	A
ATOM	448	O	LYS	51	47.452	8.332	43.027	1.00	15.00	A
ATOM	449	N	SER	52	48.184	10.388	42.620	1.00	15.00	A
ATOM	451	CA	SER	52	49.000	10.380	43.811	1.00	15.00	A
ATOM	452	CB	SER	52	49.965	11.548	43.696	1.00	15.00	A
ATOM	453	OG	SER	52	49.303	12.765	44.066	1.00	15.00	A
ATOM	455	C	SER	52	48.258	10.289	45.161	1.00	15.00	A
ATOM	456	O	SER	52	48.742	9.761	46.154	1.00	15.00	A
ATOM	457	N	MET	53	47.021	10.797	45.163	1.00	15.00	A
ATOM	459	CA	MET	53	46.081	10.557	46.296	1.00	15.00	A
ATOM	460	CB	MET	53	44.947	11.583	46.144	1.00	15.00	A
ATOM	461	CG	MET	53	45.352	13.072	46.234	1.00	15.00	A
ATOM	462	SD	MET	53	44.120	14.307	45.802	1.00	15.00	A
ATOM	463	CE	MET	53	43.923	14.891	47.494	1.00	15.00	A
ATOM	464	C	MET	53	45.436	9.156	46.246	1.00	15.00	A
ATOM	465	O	MET	53	44.408	8.870	46.893	1.00	15.00	A
ATOM	466	N	GLY	54	46.011	8.340	45.340	1.00	15.00	A
ATOM	468	CA	GLY	54	45.641	6.936	45.085	1.00	15.00	A
ATOM	469	C	GLY	54	44.283	6.514	44.448	1.00	15.00	A
ATOM	470	O	GLY	54	43.872	5.350	44.530	1.00	15.00	A
ATOM	471	N	PHE	55	43.650	7.506	43.784	1.00	15.00	A
ATOM	473	CA	PHE	55	42.358	7.225	43.138	1.00	15.00	A
ATOM	474	CB	PHE	55	41.625	8.583	42.915	1.00	15.00	A
ATOM	475	CG	PHE	55	41.113	9.196	44.179	1.00	15.00	A
ATOM	476	CD1	PHE	55	40.052	8.577	44.881	1.00	15.00	A
ATOM	477	CD2	PHE	55	41.668	10.426	44.617	1.00	15.00	A
ATOM	478	CE1	PHE	55	39.545	9.212	46.032	1.00	15.00	A
ATOM	479	CE2	PHE	55	41.154	11.042	45.763	1.00	15.00	A
ATOM	480	CZ	PHE	55	40.091	10.446	46.473	1.00	15.00	A
ATOM	481	C	PHE	55	42.441	6.457	41.824	1.00	15.00	A
ATOM	482	O	PHE	55	43.367	6.551	41.021	1.00	15.00	A
ATOM	483	N	GLN	56	41.437	5.629	41.649	1.00	15.00	A
ATOM	485	CA	GLN	56	41.437	4.768	40.473	1.00	15.00	A
ATOM	486	CB	GLN	56	41.209	3.327	40.901	1.00	15.00	A
ATOM	487	CG	GLN	56	42.240	2.686	41.854	1.00	15.00	A
ATOM	488	CD	GLN	56	43.589	2.650	41.134	1.00	15.00	A
ATOM	489	OE1	GLN	56	43.932	1.851	40.249	1.00	15.00	A
ATOM	490	NE2	GLN	56	44.334	3.681	41.510	1.00	15.00	A
ATOM	493	C	GLN	56	40.369	5.071	39.422	1.00	15.00	A
ATOM	494	O	GLN	56	40.592	4.836	38.270	1.00	15.00	A
ATOM	495	N	LYS	57	39.199	5.547	39.836	1.00	15.00	A
ATOM	497	CA	LYS	57	38.108	5.949	38.926	1.00	15.00	A
ATOM	498	CB	LYS	57	37.016	4.890	38.931	1.00	15.00	A
ATOM	499	CG	LYS	57	37.513	3.463	38.754	1.00	15.00	A
ATOM	500	CD	LYS	57	37.237	2.910	37.374	1.00	15.00	A
ATOM	501	CE	LYS	57	38.288	1.888	36.949	1.00	15.00	A
ATOM	502	NZ	LYS	57	39.588	2.453	37.339	1.00	15.00	A
ATOM	506	C	LYS	57	37.503	7.192	39.496	1.00	15.00	A
ATOM	507	O	LYS	57	37.653	7.463	40.678	1.00	15.00	A
ATOM	508	N	VAL	58	36.830	7.955	38.642	1.00	15.00	A
ATOM	510	CA	VAL	58	36.155	9.149	39.094	1.00	15.00	A
ATOM	511	CB	VAL	58	36.847	10.352	38.446	1.00	15.00	A
ATOM	512	CG1	VAL	58	36.156	11.652	38.759	1.00	15.00	A
ATOM	513	CG2	VAL	58	38.311	10.398	38.858	1.00	15.00	A
ATOM	514	C	VAL	58	34.698	9.122	38.663	1.00	15.00	A
ATOM	515	O	VAL	58	34.348	8.887	37.521	1.00	15.00	A
ATOM	516	N	PHE	59	33.882	9.506	39.627	1.00	15.00	A
ATOM	518	CA	PHE	59	32.463	9.790	39.419	1.00	15.00	A
ATOM	519	CB	PHE	59	31.655	9.233	40.622	1.00	15.00	A

ATOM	520	CG	PHE	59	30.137	9.186	40.368	1.00	15.00	A
ATOM	521	CD1	PHE	59	29.415	10.383	40.132	1.00	15.00	A
ATOM	522	CD2	PHE	59	29.475	7.947	40.301	1.00	15.00	A
ATOM	523	CE1	PHE	59	28.027	10.357	39.812	1.00	15.00	A
ATOM	524	CE2	PHE	59	28.075	7.892	39.989	1.00	15.00	A
ATOM	525	CZ	PHE	59	27.386	9.110	39.748	1.00	15.00	A
ATOM	526	C	PHE	59	32.353	11.275	39.403	1.00	15.00	A
ATOM	527	O	PHE	59	32.674	11.957	40.361	1.00	15.00	A
ATOM	528	N	ILE	60	31.881	11.744	38.251	1.00	15.00	A
ATOM	530	CA	ILE	60	31.676	13.154	38.134	1.00	15.00	A
ATOM	531	CB	ILE	60	31.994	13.607	36.732	1.00	15.00	A
ATOM	532	CG2	ILE	60	31.840	15.123	36.618	1.00	15.00	A
ATOM	533	CG1	ILE	60	33.364	13.127	36.273	1.00	15.00	A
ATOM	534	CD1	ILE	60	33.459	13.311	34.778	1.00	15.00	A
ATOM	535	C	ILE	60	30.243	13.539	38.480	1.00	15.00	A
ATOM	536	O	ILE	60	29.265	13.164	37.850	1.00	15.00	A
ATOM	537	N	ALA	61	30.231	14.364	39.521	1.00	15.00	A
ATOM	539	CA	ALA	61	28.979	15.010	39.966	1.00	15.00	A
ATOM	540	CB	ALA	61	28.670	14.613	41.413	1.00	15.00	A
ATOM	541	C	ALA	61	29.016	16.547	39.947	1.00	15.00	A
ATOM	542	O	ALA	61	28.270	17.213	40.662	1.00	15.00	A
ATOM	543	N	LEU	62	29.924	17.062	39.098	1.00	15.00	A
ATOM	545	CA	LEU	62	30.101	18.498	38.841	1.00	15.00	A
ATOM	546	CB	LEU	62	31.547	18.798	38.342	1.00	15.00	A
ATOM	547	CG	LEU	62	32.602	18.604	39.423	1.00	15.00	A
ATOM	548	CD1	LEU	62	34.036	18.724	38.879	1.00	15.00	A
ATOM	549	CD2	LEU	62	32.407	19.621	40.566	1.00	15.00	A
ATOM	550	C	LEU	62	29.105	18.951	37.803	1.00	15.00	A
ATOM	551	O	LEU	62	28.698	18.156	36.989	1.00	15.00	A
ATOM	552	N	HIS	63	28.672	20.207	37.857	1.00	15.00	A
ATOM	554	CA	HIS	63	27.614	20.692	36.915	1.00	15.00	A
ATOM	555	CB	HIS	63	26.292	20.865	37.606	1.00	15.00	A
ATOM	556	CG	HIS	63	25.619	19.619	38.113	1.00	15.00	A
ATOM	557	ND1	HIS	63	26.043	18.912	39.171	1.00	15.00	A
ATOM	559	CD2	HIS	63	24.479	19.010	37.607	1.00	15.00	A
ATOM	560	NE2	HIS	63	24.249	17.920	38.388	1.00	15.00	A
ATOM	561	CE1	HIS	63	25.201	17.866	39.341	1.00	15.00	A
ATOM	562	C	HIS	63	27.774	22.042	36.179	1.00	15.00	A
ATOM	563	O	HIS	63	27.633	23.125	36.769	1.00	15.00	A
ATOM	564	N	GLY	64	27.933	22.020	34.824	1.00	15.00	A
ATOM	566	CA	GLY	64	28.328	23.324	34.228	1.00	15.00	A
ATOM	567	C	GLY	64	29.806	23.362	33.881	1.00	15.00	A
ATOM	568	O	GLY	64	30.419	22.311	33.666	1.00	15.00	A
ATOM	569	N	ARG	65	30.421	24.588	33.885	1.00	15.00	A
ATOM	571	CA	ARG	65	31.844	24.674	33.460	1.00	15.00	A
ATOM	572	CB	ARG	65	31.993	26.162	33.305	1.00	15.00	A
ATOM	573	CG	ARG	65	33.145	26.815	32.570	1.00	15.00	A
ATOM	574	CD	ARG	65	32.367	27.852	31.689	1.00	15.00	A
ATOM	575	NE	ARG	65	31.607	28.322	32.524	1.00	15.00	A
ATOM	577	CZ	ARG	65	30.280	29.118	32.301	1.00	15.00	A
ATOM	578	NH1	ARG	65	29.584	28.465	31.328	1.00	15.00	A
ATOM	581	NH2	ARG	65	29.692	30.007	33.122	1.00	15.00	A
ATOM	584	C	ARG	65	32.902	24.034	34.369	1.00	15.00	A
ATOM	585	O	ARG	65	32.744	24.034	35.568	1.00	15.00	A
ATOM	586	N	GLY	66	33.977	23.492	33.790	1.00	15.00	A
ATOM	588	CA	GLY	66	34.939	22.611	34.492	1.00	15.00	A
ATOM	589	C	GLY	66	34.423	21.250	34.956	1.00	15.00	A
ATOM	590	O	GLY	66	35.069	20.472	35.651	1.00	15.00	A
ATOM	591	N	GLY	67	33.184	21.007	34.572	1.00	15.00	A
ATOM	593	CA	GLY	67	32.500	19.799	34.967	1.00	15.00	A
ATOM	594	C	GLY	67	31.763	19.031	33.888	1.00	15.00	A

ATOM	595	O	GLY	67	31.831	17.808	33.814	1.00	15.00	A
ATOM	596	N	GLU	68	31.036	19.805	33.071	1.00	15.00	A
ATOM	598	CA	GLU	68	30.053	19.112	32.214	1.00	15.00	A
ATOM	599	CB	GLU	68	28.720	19.755	32.493	1.00	15.00	A
ATOM	600	CG	GLU	68	27.584	18.890	32.084	1.00	15.00	A
ATOM	601	CD	GLU	68	26.289	19.518	32.525	1.00	15.00	A
ATOM	602	OE1	GLU	68	26.271	20.371	33.439	1.00	15.00	A
ATOM	603	OE2	GLU	68	25.293	19.131	31.935	1.00	15.00	A
ATOM	604	C	GLU	68	30.350	19.328	30.742	1.00	15.00	A
ATOM	605	O	GLU	68	29.631	19.014	29.806	1.00	15.00	A
ATOM	606	N	ASP	69	31.478	20.007	30.603	1.00	15.00	A
ATOM	608	CA	ASP	69	31.800	20.592	29.319	1.00	15.00	A
ATOM	609	CB	ASP	69	32.150	22.087	29.538	1.00	15.00	A
ATOM	610	CG	ASP	69	33.311	22.335	30.515	1.00	15.00	A
ATOM	611	OD1	ASP	69	33.956	21.388	30.895	1.00	15.00	A
ATOM	612	OD2	ASP	69	33.545	23.490	30.913	1.00	15.00	A
ATOM	613	C	ASP	69	32.946	19.673	28.928	1.00	15.00	A
ATOM	614	O	ASP	69	33.233	18.788	29.721	1.00	15.00	A
ATOM	615	N	GLY	70	33.615	19.843	27.791	1.00	15.00	A
ATOM	617	CA	GLY	70	34.537	18.633	27.771	1.00	15.00	A
ATOM	618	C	GLY	70	35.865	18.711	28.581	1.00	15.00	A
ATOM	619	O	GLY	70	36.826	17.988	28.336	1.00	15.00	A
ATOM	620	N	THR	71	35.934	19.702	29.487	1.00	15.00	A
ATOM	622	CA	THR	71	37.281	20.066	29.948	1.00	15.00	A
ATOM	623	CB	THR	71	37.317	21.556	30.378	1.00	15.00	A
ATOM	624	OG1	THR	71	36.495	21.796	31.563	1.00	15.00	A
ATOM	626	CG2	THR	71	36.885	22.493	29.257	1.00	15.00	A
ATOM	627	C	THR	71	37.948	19.171	30.996	1.00	15.00	A
ATOM	628	O	THR	71	39.042	18.629	30.846	1.00	15.00	A
ATOM	629	N	LEU	72	37.189	18.987	32.076	1.00	15.00	A
ATOM	631	CA	LEU	72	37.497	17.941	33.022	1.00	15.00	A
ATOM	632	CB	LEU	72	36.322	17.706	33.959	1.00	15.00	A
ATOM	633	CG	LEU	72	36.581	17.408	35.417	1.00	15.00	A
ATOM	634	CD1	LEU	72	35.258	17.001	36.056	1.00	15.00	A
ATOM	635	CD2	LEU	72	37.719	16.526	35.781	1.00	15.00	A
ATOM	636	C	LEU	72	37.705	16.603	32.422	1.00	15.00	A
ATOM	637	O	LEU	72	38.648	15.928	32.752	1.00	15.00	A
ATOM	638	N	GLN	73	36.794	16.249	31.556	1.00	15.00	A
ATOM	640	CA	GLN	73	36.784	14.979	30.860	1.00	15.00	A
ATOM	641	CB	GLN	73	35.509	15.057	29.949	1.00	15.00	A
ATOM	642	CG	GLN	73	34.410	16.006	30.641	1.00	15.00	A
ATOM	643	CD	GLN	73	33.652	15.273	31.724	1.00	15.00	A
ATOM	644	OE1	GLN	73	32.528	15.573	32.085	1.00	15.00	A
ATOM	645	NE2	GLN	73	34.328	14.240	32.226	1.00	15.00	A
ATOM	648	C	GLN	73	38.107	14.737	30.152	1.00	15.00	A
ATOM	649	O	GLN	73	38.734	13.689	30.224	1.00	15.00	A
ATOM	650	N	GLY	74	38.534	15.837	29.472	1.00	15.00	A
ATOM	652	CA	GLY	74	39.875	15.818	28.836	1.00	15.00	A
ATOM	653	C	GLY	74	41.083	15.639	29.749	1.00	15.00	A
ATOM	654	O	GLY	74	41.977	14.865	29.462	1.00	15.00	A
ATOM	655	N	MET	75	41.077	16.351	30.880	1.00	15.00	A
ATOM	657	CA	MET	75	42.138	16.161	31.900	1.00	15.00	A
ATOM	658	CB	MET	75	41.821	17.057	33.126	1.00	15.00	A
ATOM	659	CG	MET	75	42.748	16.900	34.340	1.00	15.00	A
ATOM	660	SD	MET	75	44.460	17.478	34.098	1.00	15.00	A
ATOM	661	CE	MET	75	45.671	16.396	34.708	1.00	15.00	A
ATOM	662	C	MET	75	42.169	14.711	32.383	1.00	15.00	A
ATOM	663	O	MET	75	43.216	14.101	32.516	1.00	15.00	A
ATOM	664	N	LEU	76	40.951	14.141	32.607	1.00	15.00	A
ATOM	666	CA	LEU	76	40.992	12.749	33.083	1.00	15.00	A
ATOM	667	CB	LEU	76	39.654	12.306	33.753	1.00	15.00	A

ATOM	668	CG	LEU	76	39.143	13.217	34.885	1.00	15.00	A
ATOM	669	CD1	LEU	76	37.670	12.947	35.197	1.00	15.00	A
ATOM	670	CD2	LEU	76	39.894	13.013	36.212	1.00	15.00	A
ATOM	671	C	LEU	76	41.417	11.758	32.005	1.00	15.00	A
ATOM	672	O	LEU	76	42.102	10.793	32.269	1.00	15.00	A
ATOM	673	N	GLU	77	41.054	12.056	30.760	1.00	15.00	A
ATOM	675	CA	GLU	77	41.640	11.210	29.710	1.00	15.00	A
ATOM	676	CB	GLU	77	41.046	11.514	28.316	1.00	15.00	A
ATOM	677	CG	GLU	77	39.549	11.473	28.372	1.00	15.00	A
ATOM	678	CD	GLU	77	38.935	10.544	27.416	1.00	15.00	A
ATOM	679	OE1	GLU	77	37.860	10.898	26.904	1.00	15.00	A
ATOM	680	OE2	GLU	77	39.526	9.490	27.207	1.00	15.00	A
ATOM	681	C	GLU	77	43.173	11.186	29.640	1.00	15.00	A
ATOM	682	O	GLU	77	43.796	10.138	29.537	1.00	15.00	A
ATOM	683	N	LEU	78	43.758	12.379	29.734	1.00	15.00	A
ATOM	685	CA	LEU	78	45.230	12.412	29.729	1.00	15.00	A
ATOM	686	CB	LEU	78	45.699	13.791	29.409	1.00	15.00	A
ATOM	687	CG	LEU	78	46.707	13.644	28.250	1.00	15.00	A
ATOM	688	CD1	LEU	78	46.961	14.993	27.615	1.00	15.00	A
ATOM	689	CD2	LEU	78	48.034	13.018	28.740	1.00	15.00	A
ATOM	690	C	LEU	78	45.896	11.894	30.992	1.00	15.00	A
ATOM	691	O	LEU	78	47.001	11.412	31.030	1.00	15.00	A
ATOM	692	N	MET	79	45.143	11.949	32.028	1.00	15.00	A
ATOM	694	CA	MET	79	45.524	11.152	33.129	1.00	15.00	A
ATOM	695	CB	MET	79	44.850	11.664	34.374	1.00	15.00	A
ATOM	696	CG	MET	79	45.184	13.131	34.550	1.00	15.00	A
ATOM	697	SD	MET	79	44.578	13.895	36.066	1.00	15.00	A
ATOM	698	CE	MET	79	45.370	12.783	37.211	1.00	15.00	A
ATOM	699	C	MET	79	45.240	9.687	33.036	1.00	15.00	A
ATOM	700	O	MET	79	45.628	9.032	33.971	1.00	15.00	A
ATOM	701	N	GLY	80	44.558	9.180	31.996	1.00	15.00	A
ATOM	703	CA	GLY	80	44.250	7.749	31.954	1.00	15.00	A
ATOM	704	C	GLY	80	43.341	7.181	33.086	1.00	15.00	A
ATOM	705	O	GLY	80	43.297	5.982	33.269	1.00	15.00	A
ATOM	706	N	LEU	81	42.628	8.048	33.817	1.00	15.00	A
ATOM	708	CA	LEU	81	41.618	7.717	34.846	1.00	15.00	A
ATOM	709	CB	LEU	81	41.491	8.922	35.778	1.00	15.00	A
ATOM	710	CG	LEU	81	42.571	9.149	36.860	1.00	15.00	A
ATOM	711	CD1	LEU	81	42.386	10.458	37.621	1.00	15.00	A
ATOM	712	CD2	LEU	81	42.454	8.032	37.880	1.00	15.00	A
ATOM	713	C	LEU	81	40.200	7.573	34.216	1.00	15.00	A
ATOM	714	O	LEU	81	39.646	8.521	33.691	1.00	15.00	A
ATOM	715	N	PRO	82	39.633	6.359	34.343	1.00	15.00	A
ATOM	716	CD	PRO	82	40.263	5.166	34.942	1.00	15.00	A
ATOM	717	CA	PRO	82	38.237	6.177	33.951	1.00	15.00	A
ATOM	718	CB	PRO	82	37.980	4.723	34.377	1.00	15.00	A
ATOM	719	CG	PRO	82	39.357	4.034	34.524	1.00	15.00	A
ATOM	720	C	PRO	82	37.329	7.093	34.775	1.00	15.00	A
ATOM	721	O	PRO	82	37.588	7.388	35.926	1.00	15.00	A
ATOM	722	N	TYR	83	36.255	7.510	34.118	1.00	15.00	A
ATOM	724	CA	TYR	83	35.366	8.512	34.667	1.00	15.00	A
ATOM	725	CB	TYR	83	35.954	9.921	34.333	1.00	15.00	A
ATOM	726	CG	TYR	83	35.929	10.308	32.841	1.00	15.00	A
ATOM	727	CD1	TYR	83	34.739	10.782	32.233	1.00	15.00	A
ATOM	728	CE1	TYR	83	34.750	11.137	30.876	1.00	15.00	A
ATOM	729	CD2	TYR	83	37.125	10.186	32.100	1.00	15.00	A
ATOM	730	CE2	TYR	83	37.120	10.516	30.726	1.00	15.00	A
ATOM	731	CZ	TYR	83	35.950	10.993	30.125	1.00	15.00	A
ATOM	732	OH	TYR	83	35.960	11.386	28.834	1.00	15.00	A
ATOM	734	C	TYR	83	33.957	8.356	34.172	1.00	15.00	A
ATOM	735	O	TYR	83	33.745	7.795	33.131	1.00	15.00	A

ATOM	736	N	THR	84	33.001	8.817	34.958	1.00	15.00	A
ATOM	738	CA	THR	84	31.648	8.479	34.604	1.00	15.00	A
ATOM	739	CB	THR	84	30.762	8.519	35.880	1.00	15.00	A
ATOM	740	OG1	THR	84	30.824	9.838	36.428	1.00	15.00	A
ATOM	742	CG2	THR	84	31.130	7.469	36.943	1.00	15.00	A
ATOM	743	C	THR	84	30.975	9.298	33.516	1.00	15.00	A
ATOM	744	O	THR	84	29.957	8.921	32.958	1.00	15.00	A
ATOM	745	N	GLY	85	31.503	10.448	33.204	1.00	15.00	A
ATOM	747	CA	GLY	85	30.615	11.033	32.153	1.00	15.00	A
ATOM	748	C	GLY	85	30.310	10.337	30.778	1.00	15.00	A
ATOM	749	O	GLY	85	30.772	9.288	30.378	1.00	15.00	A
ATOM	750	N	SER	86	29.533	11.091	30.014	1.00	15.00	A
ATOM	752	CA	SER	86	29.945	11.292	28.616	1.00	15.00	A
ATOM	753	CB	SER	86	28.991	12.325	27.972	1.00	15.00	A
ATOM	754	OG	SER	86	27.674	11.763	27.775	1.00	15.00	A
ATOM	756	C	SER	86	31.400	11.752	28.484	1.00	15.00	A
ATOM	757	O	SER	86	32.021	12.372	29.344	1.00	15.00	A
ATOM	758	N	GLY	87	31.940	11.387	27.317	1.00	15.00	A
ATOM	760	CA	GLY	87	33.313	11.713	26.959	1.00	15.00	A
ATOM	761	C	GLY	87	33.471	13.174	26.557	1.00	15.00	A
ATOM	762	O	GLY	87	32.590	13.977	26.721	1.00	15.00	A
ATOM	763	N	VAL	88	34.614	13.493	25.977	1.00	15.00	A
ATOM	765	CA	VAL	88	34.930	14.919	25.792	1.00	15.00	A
ATOM	766	CB	VAL	88	36.408	15.016	25.382	1.00	15.00	A
ATOM	767	CG1	VAL	88	36.847	16.472	25.032	1.00	15.00	A
ATOM	768	CG2	VAL	88	37.255	14.460	26.499	1.00	15.00	A
ATOM	769	C	VAL	88	34.042	15.598	24.741	1.00	15.00	A
ATOM	770	O	VAL	88	33.375	16.592	24.981	1.00	15.00	A
ATOM	771	N	MET	89	34.062	14.962	23.544	1.00	15.00	A
ATOM	773	CA	MET	89	33.253	15.492	22.449	1.00	15.00	A
ATOM	774	CB	MET	89	33.371	14.591	21.206	1.00	15.00	A
ATOM	775	CG	MET	89	32.644	15.204	20.010	1.00	15.00	A
ATOM	776	SD	MET	89	30.906	14.729	19.896	1.00	15.00	A
ATOM	777	CE	MET	89	30.975	12.896	19.925	1.00	15.00	A
ATOM	778	C	MET	89	31.801	15.663	22.840	1.00	15.00	A
ATOM	779	O	MET	89	31.228	16.697	22.618	1.00	15.00	A
ATOM	780	N	ALA	90	31.241	14.596	23.450	1.00	15.00	A
ATOM	782	CA	ALA	90	29.790	14.623	23.650	1.00	15.00	A
ATOM	783	CB	ALA	90	29.297	13.166	23.883	1.00	15.00	A
ATOM	784	C	ALA	90	29.329	15.557	24.777	1.00	15.00	A
ATOM	785	O	ALA	90	28.267	16.138	24.741	1.00	15.00	A
ATOM	786	N	SER	91	30.203	15.641	25.808	1.00	15.00	A
ATOM	788	CA	SER	91	29.963	16.573	26.906	1.00	15.00	A
ATOM	789	CB	SER	91	31.007	16.345	28.032	1.00	15.00	A
ATOM	790	OG	SER	91	30.911	15.051	28.626	1.00	15.00	A
ATOM	792	C	SER	91	30.049	17.985	26.387	1.00	15.00	A
ATOM	793	O	SER	91	29.238	18.833	26.674	1.00	15.00	A
ATOM	794	N	ALA	92	31.023	18.208	25.524	1.00	15.00	A
ATOM	796	CA	ALA	92	31.077	19.580	25.008	1.00	15.00	A
ATOM	797	CB	ALA	92	32.396	19.810	24.272	1.00	15.00	A
ATOM	798	C	ALA	92	29.878	19.968	24.088	1.00	15.00	A
ATOM	799	O	ALA	92	29.246	21.005	24.199	1.00	15.00	A
ATOM	800	N	LEU	93	29.565	19.044	23.200	1.00	15.00	A
ATOM	802	CA	LEU	93	28.525	19.283	22.202	1.00	15.00	A
ATOM	803	CB	LEU	93	28.554	18.069	21.214	1.00	15.00	A
ATOM	804	CG	LEU	93	28.335	18.070	19.693	1.00	15.00	A
ATOM	805	CD1	LEU	93	27.735	16.758	19.237	1.00	15.00	A
ATOM	806	CD2	LEU	93	27.527	19.228	19.125	1.00	15.00	A
ATOM	807	C	LEU	93	27.188	19.394	22.918	1.00	15.00	A
ATOM	808	O	LEU	93	26.342	20.163	22.553	1.00	15.00	A
ATOM	809	N	SER	94	27.000	18.653	24.018	1.00	15.00	A

ATOM	811	CA	SER	94	25.731	18.745	24.761	1.00	15.00	A
ATOM	812	CB	SER	94	25.585	17.692	25.887	1.00	15.00	A
ATOM	813	OG	SER	94	26.521	17.833	26.984	1.00	15.00	A
ATOM	815	C	SER	94	25.386	20.082	25.320	1.00	15.00	A
ATOM	816	O	SER	94	24.244	20.434	25.451	1.00	15.00	A
ATOM	817	N	MET	95	26.448	20.792	25.675	1.00	15.00	A
ATOM	819	CA	MET	95	26.251	22.113	26.216	1.00	15.00	A
ATOM	820	CB	MET	95	27.478	22.516	26.997	1.00	15.00	A
ATOM	821	CG	MET	95	27.302	21.534	28.098	1.00	15.00	A
ATOM	822	SD	MET	95	27.948	22.059	29.630	1.00	15.00	A
ATOM	823	CE	MET	95	28.233	23.813	29.428	1.00	15.00	A
ATOM	824	C	MET	95	25.831	23.169	25.210	1.00	15.00	A
ATOM	825	O	MET	95	25.246	24.172	25.585	1.00	15.00	A
ATOM	826	N	ASP	96	26.040	22.853	23.938	1.00	15.00	A
ATOM	828	CA	ASP	96	25.758	23.767	22.812	1.00	15.00	A
ATOM	829	CB	ASP	96	26.867	23.558	21.780	1.00	15.00	A
ATOM	830	CG	ASP	96	26.917	24.650	20.758	1.00	15.00	A
ATOM	831	OD1	ASP	96	25.857	25.103	20.381	1.00	15.00	A
ATOM	832	OD2	ASP	96	28.012	25.053	20.379	1.00	15.00	A
ATOM	833	C	ASP	96	24.448	23.386	22.155	1.00	15.00	A
ATOM	834	O	ASP	96	24.424	22.487	21.348	1.00	15.00	A
ATOM	835	N	LYS	97	23.345	24.034	22.570	1.00	15.00	A
ATOM	837	CA	LYS	97	22.088	23.512	22.030	1.00	15.00	A
ATOM	838	CB	LYS	97	20.891	23.813	23.004	1.00	15.00	A
ATOM	839	CG	LYS	97	20.459	25.219	23.263	1.00	15.00	A
ATOM	840	CD	LYS	97	19.540	25.325	24.495	1.00	15.00	A
ATOM	841	CE	LYS	97	20.282	25.074	25.794	1.00	15.00	A
ATOM	842	NZ	LYS	97	19.361	25.358	26.909	1.00	15.00	A
ATOM	846	C	LYS	97	21.901	23.805	20.533	1.00	15.00	A
ATOM	847	O	LYS	97	21.252	23.059	19.851	1.00	15.00	A
ATOM	848	N	LEU	98	22.561	24.846	20.039	1.00	15.00	A
ATOM	850	CA	LEU	98	22.524	24.970	18.571	1.00	15.00	A
ATOM	851	CB	LEU	98	23.170	26.282	18.187	1.00	15.00	A
ATOM	852	CG	LEU	98	23.514	26.630	16.731	1.00	15.00	A
ATOM	853	CD1	LEU	98	22.397	26.426	15.721	1.00	15.00	A
ATOM	854	CD2	LEU	98	24.029	28.059	16.775	1.00	15.00	A
ATOM	855	C	LEU	98	23.272	23.840	17.862	1.00	15.00	A
ATOM	856	O	LEU	98	22.831	23.335	16.856	1.00	15.00	A
ATOM	857	N	ARG	99	24.447	23.483	18.362	1.00	15.00	A
ATOM	859	CA	ARG	99	25.143	22.480	17.554	1.00	15.00	A
ATOM	860	CB	ARG	99	26.666	22.428	17.797	1.00	15.00	A
ATOM	861	CG	ARG	99	27.242	23.767	17.314	1.00	15.00	A
ATOM	862	CD	ARG	99	28.765	23.842	17.187	1.00	15.00	A
ATOM	863	NE	ARG	99	29.185	25.059	16.491	1.00	15.00	A
ATOM	865	CZ	ARG	99	29.149	26.294	16.942	1.00	15.00	A
ATOM	866	NH1	ARG	99	28.719	26.592	18.168	1.00	15.00	A
ATOM	869	NH2	ARG	99	29.585	27.251	16.131	1.00	15.00	A
ATOM	872	C	ARG	99	24.499	21.114	17.803	1.00	15.00	A
ATOM	873	O	ARG	99	24.482	20.286	16.944	1.00	15.00	A
ATOM	874	N	SER	100	23.895	20.954	18.991	1.00	15.00	A
ATOM	876	CA	SER	100	23.105	19.721	19.183	1.00	15.00	A
ATOM	877	CB	SER	100	22.557	19.722	20.598	1.00	15.00	A
ATOM	878	OG	SER	100	23.652	19.434	21.517	1.00	15.00	A
ATOM	880	C	SER	100	21.963	19.612	18.135	1.00	15.00	A
ATOM	881	O	SER	100	21.802	18.640	17.448	1.00	15.00	A
ATOM	882	N	LYS	101	21.236	20.707	18.012	1.00	15.00	A
ATOM	884	CA	LYS	101	20.205	20.785	16.968	1.00	15.00	A
ATOM	885	CB	LYS	101	19.569	22.179	16.944	1.00	15.00	A
ATOM	886	CG	LYS	101	18.637	22.459	18.156	1.00	15.00	A
ATOM	887	CD	LYS	101	17.670	23.676	17.938	1.00	15.00	A
ATOM	888	CE	LYS	101	16.650	23.821	19.063	1.00	15.00	A

ATOM	889	NZ	LYS	101	17.271	24.023	20.399	1.00	15.00	A
ATOM	893	C	LYS	101	20.722	20.490	15.561	1.00	15.00	A
ATOM	894	O	LYS	101	20.118	19.761	14.776	1.00	15.00	A
ATOM	895	N	LEU	102	21.893	21.071	15.262	1.00	15.00	A
ATOM	897	CA	LEU	102	22.442	20.768	13.901	1.00	15.00	A
ATOM	898	CB	LEU	102	23.677	21.639	13.636	1.00	15.00	A
ATOM	899	CG	LEU	102	23.405	23.114	13.512	1.00	15.00	A
ATOM	900	CD1	LEU	102	24.730	23.870	13.278	1.00	15.00	A
ATOM	901	CD2	LEU	102	22.481	23.245	12.285	1.00	15.00	A
ATOM	902	C	LEU	102	22.794	19.297	13.600	1.00	15.00	A
ATOM	903	O	LEU	102	22.510	18.768	12.546	1.00	15.00	A
ATOM	904	N	LEU	103	23.444	18.636	14.579	1.00	15.00	A
ATOM	906	CA	LEU	103	23.698	17.234	14.471	1.00	15.00	A
ATOM	907	CB	LEU	103	24.506	16.777	15.689	1.00	15.00	A
ATOM	908	CG	LEU	103	25.385	15.581	15.430	1.00	15.00	A
ATOM	909	CD1	LEU	103	26.608	16.019	14.750	1.00	15.00	A
ATOM	910	CD2	LEU	103	26.273	15.118	16.551	1.00	15.00	A
ATOM	911	C	LEU	103	22.422	16.416	14.306	1.00	15.00	A
ATOM	912	O	LEU	103	22.334	15.521	13.514	1.00	15.00	A
ATOM	913	N	TRP	104	21.424	16.756	15.113	1.00	15.00	A
ATOM	915	CA	TRP	104	20.173	16.026	15.102	1.00	15.00	A
ATOM	916	CB	TRP	104	19.303	16.476	16.273	1.00	15.00	A
ATOM	917	CG	TRP	104	19.812	15.914	17.585	1.00	15.00	A
ATOM	918	CD2	TRP	104	19.555	16.428	18.868	1.00	15.00	A
ATOM	919	CE2	TRP	104	20.165	15.473	19.825	1.00	15.00	A
ATOM	920	CE3	TRP	104	18.882	17.560	19.347	1.00	15.00	A
ATOM	921	CD1	TRP	104	20.557	14.747	17.785	1.00	15.00	A
ATOM	922	NE1	TRP	104	20.754	14.487	19.103	1.00	15.00	A
ATOM	924	CZ2	TRP	104	20.042	15.701	21.214	1.00	15.00	A
ATOM	925	CZ3	TRP	104	18.799	17.771	20.738	1.00	15.00	A
ATOM	926	CH2	TRP	104	19.351	16.853	21.661	1.00	15.00	A
ATOM	927	C	TRP	104	19.472	16.255	13.785	1.00	15.00	A
ATOM	928	O	TRP	104	19.003	15.317	13.199	1.00	15.00	A
ATOM	929	N	GLN	105	19.492	17.488	13.298	1.00	15.00	A
ATOM	931	CA	GLN	105	19.004	17.659	11.903	1.00	15.00	A
ATOM	932	CB	GLN	105	19.075	19.098	11.433	1.00	15.00	A
ATOM	933	CG	GLN	105	18.115	19.823	12.289	1.00	15.00	A
ATOM	934	CD	GLN	105	17.957	21.257	11.889	1.00	15.00	A
ATOM	935	OE1	GLN	105	17.105	21.862	12.460	1.00	15.00	A
ATOM	936	NE2	GLN	105	18.715	21.811	10.954	1.00	15.00	A
ATOM	939	C	GLN	105	19.743	16.871	10.867	1.00	15.00	A
ATOM	940	O	GLN	105	19.154	16.296	9.978	1.00	15.00	A
ATOM	941	N	GLY	106	21.060	16.839	10.998	1.00	15.00	A
ATOM	943	CA	GLY	106	21.790	15.987	10.019	1.00	15.00	A
ATOM	944	C	GLY	106	21.512	14.502	10.104	1.00	15.00	A
ATOM	945	O	GLY	106	21.645	13.753	9.150	1.00	15.00	A
ATOM	946	N	ALA	107	21.028	14.109	11.286	1.00	15.00	A
ATOM	948	CA	ALA	107	20.566	12.738	11.451	1.00	15.00	A
ATOM	949	CB	ALA	107	20.812	12.262	12.893	1.00	15.00	A
ATOM	950	C	ALA	107	19.094	12.511	11.143	1.00	15.00	A
ATOM	951	O	ALA	107	18.597	11.419	11.295	1.00	15.00	A
ATOM	952	N	GLY	108	18.415	13.582	10.716	1.00	15.00	A
ATOM	954	CA	GLY	108	17.010	13.436	10.291	1.00	15.00	A
ATOM	955	C	GLY	108	16.026	13.323	11.434	1.00	15.00	A
ATOM	956	O	GLY	108	14.882	12.950	11.232	1.00	15.00	A
ATOM	957	N	LEU	109	16.512	13.634	12.643	1.00	15.00	A
ATOM	959	CA	LEU	109	15.626	13.666	13.800	1.00	15.00	A
ATOM	960	CB	LEU	109	16.505	13.515	15.014	1.00	15.00	A
ATOM	961	CG	LEU	109	16.870	12.088	15.407	1.00	15.00	A
ATOM	962	CD1	LEU	109	16.179	11.004	14.587	1.00	15.00	A
ATOM	963	CD2	LEU	109	18.329	11.951	15.870	1.00	15.00	A

58/90

ATOM	964	C	LEU	109	14.801	14.944	13.896	1.00	15.00	A
ATOM	965	O	LEU	109	15.201	15.985	13.379	1.00	15.00	A
ATOM	966	N	PRO	110	13.625	14.823	14.559	1.00	15.00	A
ATOM	967	CD	PRO	110	13.004	13.575	15.075	1.00	15.00	A
ATOM	968	CA	PRO	110	12.750	15.987	14.738	1.00	15.00	A
ATOM	969	CB	PRO	110	11.468	15.367	15.297	1.00	15.00	A
ATOM	970	CG	PRO	110	11.844	14.030	15.958	1.00	15.00	A
ATOM	971	C	PRO	110	13.251	17.056	15.672	1.00	15.00	A
ATOM	972	O	PRO	110	13.527	16.834	16.848	1.00	15.00	A
ATOM	973	N	VAL	111	13.318	18.259	15.110	1.00	15.00	A
ATOM	975	CA	VAL	111	13.606	19.434	15.958	1.00	15.00	A
ATOM	976	CB	VAL	111	15.100	19.851	15.773	1.00	15.00	A
ATOM	977	CG1	VAL	111	16.112	18.734	16.114	1.00	15.00	A
ATOM	978	CG2	VAL	111	15.310	20.310	14.321	1.00	15.00	A
ATOM	979	C	VAL	111	12.666	20.576	15.635	1.00	15.00	A
ATOM	980	O	VAL	111	12.263	20.707	14.502	1.00	15.00	A
ATOM	981	N	ALA	112	12.320	21.397	16.637	1.00	15.00	A
ATOM	983	CA	ALA	112	11.524	22.624	16.426	1.00	15.00	A
ATOM	984	CB	ALA	112	11.579	23.423	17.739	1.00	15.00	A
ATOM	985	C	ALA	112	12.148	23.534	15.372	1.00	15.00	A
ATOM	986	O	ALA	112	13.380	23.686	15.373	1.00	15.00	A
ATOM	987	N	PRO	113	11.287	24.176	14.560	1.00	15.00	A
ATOM	988	CD	PRO	113	9.826	24.010	14.468	1.00	15.00	A
ATOM	989	CA	PRO	113	11.814	25.275	13.725	1.00	15.00	A
ATOM	990	CB	PRO	113	10.538	25.825	13.037	1.00	15.00	A
ATOM	991	CG	PRO	113	9.410	24.816	13.184	1.00	15.00	A
ATOM	992	C	PRO	113	12.528	26.316	14.581	1.00	15.00	A
ATOM	993	O	PRO	113	12.169	26.582	15.713	1.00	15.00	A
ATOM	994	N	TRP	114	13.606	26.867	14.008	1.00	15.00	A
ATOM	996	CA	TRP	114	14.349	27.895	14.736	1.00	15.00	A
ATOM	997	CB	TRP	114	15.080	27.306	16.014	1.00	15.00	A
ATOM	998	CG	TRP	114	16.458	26.918	15.686	1.00	15.00	A
ATOM	999	CD2	TRP	114	16.788	25.950	14.773	1.00	15.00	A
ATOM	1000	CE2	TRP	114	18.218	26.220	14.403	1.00	15.00	A
ATOM	1001	CE3	TRP	114	16.038	24.942	14.168	1.00	15.00	A
ATOM	1002	CD1	TRP	114	17.626	27.665	15.899	1.00	15.00	A
ATOM	1003	NE1	TRP	114	18.680	27.281	15.127	1.00	15.00	A
ATOM	1005	CZ2	TRP	114	18.836	25.461	13.409	1.00	15.00	A
ATOM	1006	CZ3	TRP	114	16.699	24.245	13.178	1.00	15.00	A
ATOM	1007	CH2	TRP	114	18.044	24.492	12.793	1.00	15.00	A
ATOM	1008	C	TRP	114	15.231	28.740	13.832	1.00	15.00	A
ATOM	1009	O	TRP	114	15.495	28.439	12.694	1.00	15.00	A
ATOM	1010	N	VAL	115	15.696	29.832	14.401	1.00	15.00	A
ATOM	1012	CA	VAL	115	16.775	30.582	13.751	1.00	15.00	A
ATOM	1013	CB	VAL	115	16.195	31.892	13.112	1.00	15.00	A
ATOM	1014	CG1	VAL	115	15.236	31.675	11.932	1.00	15.00	A
ATOM	1015	CG2	VAL	115	15.387	32.687	14.135	1.00	15.00	A
ATOM	1016	C	VAL	115	17.781	30.904	14.854	1.00	15.00	A
ATOM	1017	O	VAL	115	17.477	30.836	16.036	1.00	15.00	A
ATOM	1018	N	ALA	116	19.020	31.212	14.446	1.00	15.00	A
ATOM	1020	CA	ALA	116	19.965	31.705	15.464	1.00	15.00	A
ATOM	1021	CB	ALA	116	21.111	30.730	15.766	1.00	15.00	A
ATOM	1022	C	ALA	116	20.568	33.029	15.091	1.00	15.00	A
ATOM	1023	O	ALA	116	20.702	33.415	13.949	1.00	15.00	A
ATOM	1024	N	LEU	117	20.975	33.734	16.135	1.00	15.00	A
ATOM	1026	CA	LEU	117	21.385	35.140	15.978	1.00	15.00	A
ATOM	1027	CB	LEU	117	20.434	36.012	16.819	1.00	15.00	A
ATOM	1028	CG	LEU	117	19.251	36.634	16.084	1.00	15.00	A
ATOM	1029	CD1	LEU	117	18.171	35.620	15.718	1.00	15.00	A
ATOM	1030	CD2	LEU	117	18.697	37.856	16.816	1.00	15.00	A
ATOM	1031	C	LEU	117	22.726	35.289	16.656	1.00	15.00	A

ATOM	1032	O	LEU	117	22.787	34.884	17.803	1.00	15.00	A
ATOM	1033	N	THR	118	23.786	35.901	16.029	1.00	15.00	A
ATOM	1035	CA	THR	118	24.890	36.337	16.933	1.00	15.00	A
ATOM	1036	CB	THR	118	26.277	36.409	16.310	1.00	15.00	A
ATOM	1037	OG1	THR	118	26.303	37.302	15.160	1.00	15.00	A
ATOM	1039	CG2	THR	118	26.712	35.000	15.967	1.00	15.00	A
ATOM	1040	C	THR	118	24.737	37.675	17.586	1.00	15.00	A
ATOM	1041	O	THR	118	23.932	38.472	17.180	1.00	15.00	A
ATOM	1042	N	ARG	119	25.591	37.911	18.628	1.00	15.00	A
ATOM	1044	CA	ARG	119	25.553	39.243	19.238	1.00	15.00	A
ATOM	1045	CB	ARG	119	26.452	39.107	20.513	1.00	15.00	A
ATOM	1046	CG	ARG	119	26.676	40.406	21.321	1.00	15.00	A
ATOM	1047	CD	ARG	119	27.306	40.297	22.741	1.00	15.00	A
ATOM	1048	NE	ARG	119	27.601	38.959	23.256	1.00	15.00	A
ATOM	1050	CZ	ARG	119	28.912	38.573	23.373	1.00	15.00	A
ATOM	1051	NH1	ARG	119	29.334	37.730	24.318	1.00	15.00	A
ATOM	1054	NH2	ARG	119	29.840	39.091	22.579	1.00	15.00	A
ATOM	1057	C	ARG	119	25.922	40.363	18.237	1.00	15.00	A
ATOM	1058	O	ARG	119	25.311	41.414	18.181	1.00	15.00	A
ATOM	1059	N	ALA	120	26.873	40.090	17.368	1.00	15.00	A
ATOM	1061	CA	ALA	120	27.219	41.028	16.262	1.00	15.00	A
ATOM	1062	CB	ALA	120	28.305	40.407	15.338	1.00	15.00	A
ATOM	1063	C	ALA	120	26.071	41.375	15.367	1.00	15.00	A
ATOM	1064	O	ALA	120	25.692	42.524	15.161	1.00	15.00	A
ATOM	1065	N	GLU	121	25.458	40.326	14.872	1.00	15.00	A
ATOM	1067	CA	GLU	121	24.277	40.542	14.064	1.00	15.00	A
ATOM	1068	CB	GLU	121	23.623	39.191	13.676	1.00	15.00	A
ATOM	1069	CG	GLU	121	24.429	38.586	12.544	1.00	15.00	A
ATOM	1070	CD	GLU	121	24.343	37.109	12.422	1.00	15.00	A
ATOM	1071	OE1	GLU	121	23.802	36.452	13.298	1.00	15.00	A
ATOM	1072	OE2	GLU	121	24.867	36.613	11.413	1.00	15.00	A
ATOM	1073	C	GLU	121	23.273	41.374	14.726	1.00	15.00	A
ATOM	1074	O	GLU	121	22.671	42.226	14.109	1.00	15.00	A
ATOM	1075	N	PHE	122	23.104	41.165	16.069	1.00	15.00	A
ATOM	1077	CA	PHE	122	21.934	41.913	16.599	1.00	15.00	A
ATOM	1078	CB	PHE	122	21.600	41.268	17.910	1.00	15.00	A
ATOM	1079	CG	PHE	122	20.447	41.872	18.661	1.00	15.00	A
ATOM	1080	CD1	PHE	122	19.137	41.787	18.143	1.00	15.00	A
ATOM	1081	CD2	PHE	122	20.705	42.500	19.906	1.00	15.00	A
ATOM	1082	CE1	PHE	122	18.082	42.373	18.874	1.00	15.00	A
ATOM	1083	CE2	PHE	122	19.626	43.096	20.645	1.00	15.00	A
ATOM	1084	CZ	PHE	122	18.305	43.015	20.116	1.00	15.00	A
ATOM	1085	C	PHE	122	22.129	43.386	16.739	1.00	15.00	A
ATOM	1086	O	PHE	122	21.230	44.210	16.659	1.00	15.00	A
ATOM	1087	N	GLU	123	23.366	43.714	16.995	1.00	15.00	A
ATOM	1089	CA	GLU	123	23.542	45.145	17.239	1.00	15.00	A
ATOM	1090	CB	GLU	123	24.765	45.264	18.087	1.00	15.00	A
ATOM	1091	CG	GLU	123	24.538	44.859	19.564	1.00	15.00	A
ATOM	1092	CD	GLU	123	25.904	44.594	20.123	1.00	15.00	A
ATOM	1093	OE1	GLU	123	26.066	44.540	21.331	1.00	15.00	A
ATOM	1094	OE2	GLU	123	26.855	44.424	19.357	1.00	15.00	A
ATOM	1095	C	GLU	123	23.665	45.982	15.977	1.00	15.00	A
ATOM	1096	O	GLU	123	23.608	47.195	16.034	1.00	15.00	A
ATOM	1097	N	LYS	124	23.860	45.322	14.852	1.00	15.00	A
ATOM	1099	CA	LYS	124	23.832	46.146	13.667	1.00	15.00	A
ATOM	1100	CB	LYS	124	24.928	45.667	12.703	1.00	15.00	A
ATOM	1101	CG	LYS	124	24.970	44.187	12.368	1.00	15.00	A
ATOM	1102	CD	LYS	124	26.235	43.753	11.588	1.00	15.00	A
ATOM	1103	CE	LYS	124	27.197	42.835	12.402	1.00	15.00	A
ATOM	1104	NZ	LYS	124	28.597	43.218	12.182	1.00	15.00	A
ATOM	1108	C	LYS	124	22.516	46.142	12.988	1.00	15.00	A

60/90

ATOM	1109	O	LYS	124	22.333	46.779	11.949	1.00	15.00	A
ATOM	1110	N	GLY	125	21.594	45.287	13.521	1.00	15.00	A
ATOM	1112	CA	GLY	125	21.325	44.155	12.585	1.00	15.00	A
ATOM	1113	C	GLY	125	19.898	43.620	12.402	1.00	15.00	A
ATOM	1114	O	GLY	125	18.927	44.358	12.457	1.00	15.00	A
ATOM	1115	N	LEU	126	19.814	42.297	12.146	1.00	15.00	A
ATOM	1117	CA	LEU	126	18.583	41.713	11.534	1.00	15.00	A
ATOM	1118	CB	LEU	126	17.368	41.855	12.529	1.00	15.00	A
ATOM	1119	CG	LEU	126	17.107	41.147	13.914	1.00	15.00	A
ATOM	1120	CD1	LEU	126	18.241	40.606	14.750	1.00	15.00	A
ATOM	1121	CD2	LEU	126	16.255	42.016	14.838	1.00	15.00	A
ATOM	1122	C	LEU	126	18.344	42.388	10.167	1.00	15.00	A
ATOM	1123	O	LEU	126	17.982	43.573	10.132	1.00	15.00	A
ATOM	1124	N	SER	127	18.573	41.620	9.041	1.00	15.00	A
ATOM	1126	CA	SER	127	18.332	41.960	7.603	1.00	15.00	A
ATOM	1127	CB	SER	127	18.859	40.748	6.756	1.00	15.00	A
ATOM	1128	OG	SER	127	18.166	40.492	5.478	1.00	15.00	A
ATOM	1130	C	SER	127	16.838	42.359	7.302	1.00	15.00	A
ATOM	1131	O	SER	127	16.350	43.398	7.719	1.00	15.00	A
ATOM	1132	N	ASP	128	16.072	41.494	6.636	1.00	15.00	A
ATOM	1134	CA	ASP	128	14.774	42.015	6.226	1.00	15.00	A
ATOM	1135	CB	ASP	128	14.934	43.100	5.103	1.00	15.00	A
ATOM	1136	CG	ASP	128	15.500	42.722	3.722	1.00	15.00	A
ATOM	1137	OD1	ASP	128	16.016	41.607	3.565	1.00	15.00	A
ATOM	1138	OD2	ASP	128	15.401	43.534	2.763	1.00	15.00	A
ATOM	1139	C	ASP	128	13.898	40.867	5.910	1.00	15.00	A
ATOM	1140	O	ASP	128	12.768	40.762	6.372	1.00	15.00	A
ATOM	1141	N	LYS	129	14.567	39.972	5.197	1.00	15.00	A
ATOM	1143	CA	LYS	129	14.524	38.529	5.278	1.00	15.00	A
ATOM	1144	CB	LYS	129	14.969	37.935	3.967	1.00	15.00	A
ATOM	1145	CG	LYS	129	14.034	38.441	2.902	1.00	15.00	A
ATOM	1146	CD	LYS	129	14.269	37.691	1.628	1.00	15.00	A
ATOM	1147	CE	LYS	129	13.627	36.301	1.614	1.00	15.00	A
ATOM	1148	NZ	LYS	129	13.963	35.849	0.249	1.00	15.00	A
ATOM	1152	C	LYS	129	15.564	38.079	6.257	1.00	15.00	A
ATOM	1153	O	LYS	129	16.700	37.685	5.965	1.00	15.00	A
ATOM	1154	N	GLN	130	15.121	38.210	7.481	1.00	15.00	A
ATOM	1156	CA	GLN	130	15.884	37.822	8.639	1.00	15.00	A
ATOM	1157	CB	GLN	130	17.105	38.745	8.957	1.00	15.00	A
ATOM	1158	CG	GLN	130	18.051	38.003	9.954	1.00	15.00	A
ATOM	1159	CD	GLN	130	19.448	38.567	9.896	1.00	15.00	A
ATOM	1160	OE1	GLN	130	20.003	39.068	10.871	1.00	15.00	A
ATOM	1161	NE2	GLN	130	20.030	38.471	8.705	1.00	15.00	A
ATOM	1164	C	GLN	130	14.912	37.797	9.776	1.00	15.00	A
ATOM	1165	O	GLN	130	14.628	36.759	10.332	1.00	15.00	A
ATOM	1166	N	LEU	131	14.356	39.007	10.036	1.00	15.00	A
ATOM	1168	CA	LEU	131	13.120	39.145	10.765	1.00	15.00	A
ATOM	1169	CB	LEU	131	12.755	40.579	10.938	1.00	15.00	A
ATOM	1170	CG	LEU	131	13.871	41.461	11.357	1.00	15.00	A
ATOM	1171	CD1	LEU	131	14.138	42.330	10.096	1.00	15.00	A
ATOM	1172	CD2	LEU	131	13.510	42.177	12.677	1.00	15.00	A
ATOM	1173	C	LEU	131	11.917	38.598	10.068	1.00	15.00	A
ATOM	1174	O	LEU	131	10.927	38.329	10.740	1.00	15.00	A
ATOM	1175	N	ALA	132	11.986	38.515	8.700	1.00	15.00	A
ATOM	1177	CA	ALA	132	10.892	37.824	8.028	1.00	15.00	A
ATOM	1178	CB	ALA	132	10.849	38.071	6.537	1.00	15.00	A
ATOM	1179	C	ALA	132	10.959	36.339	8.255	1.00	15.00	A
ATOM	1180	O	ALA	132	9.978	35.607	8.366	1.00	15.00	A
ATOM	1181	N	GLU	133	12.197	35.946	8.370	1.00	15.00	A
ATOM	1183	CA	GLU	133	12.533	34.552	8.577	1.00	15.00	A
ATOM	1184	CB	GLU	133	13.988	34.454	8.072	1.00	15.00	A

ATOM	1185	CG	GLU	133	14.312	34.915	6.617	1.00	15.00	A
ATOM	1186	CD	GLU	133	13.284	34.603	5.467	1.00	15.00	A
ATOM	1187	OE1	GLU	133	13.566	33.759	4.579	1.00	15.00	A
ATOM	1188	OE2	GLU	133	12.202	35.230	5.394	1.00	15.00	A
ATOM	1189	C	GLU	133	12.206	34.149	10.015	1.00	15.00	A
ATOM	1190	O	GLU	133	11.723	33.065	10.292	1.00	15.00	A
ATOM	1191	N	ILE	134	12.363	35.154	10.917	1.00	15.00	A
ATOM	1193	CA	ILE	134	11.903	35.008	12.292	1.00	15.00	A
ATOM	1194	CB	ILE	134	12.514	36.117	13.225	1.00	15.00	A
ATOM	1195	CG2	ILE	134	11.793	36.219	14.576	1.00	15.00	A
ATOM	1196	CG1	ILE	134	14.036	35.922	13.458	1.00	15.00	A
ATOM	1197	CD1	ILE	134	14.761	37.002	14.275	1.00	15.00	A
ATOM	1198	C	ILE	134	10.403	35.071	12.325	1.00	15.00	A
ATOM	1199	O	ILE	134	9.745	34.573	13.232	1.00	15.00	A
ATOM	1200	N	SER	135	9.899	35.736	11.280	1.00	15.00	A
ATOM	1202	CA	SER	135	8.453	35.867	11.268	1.00	15.00	A
ATOM	1203	CB	SER	135	7.968	37.078	10.487	1.00	15.00	A
ATOM	1204	OG	SER	135	7.930	38.163	11.440	1.00	15.00	A
ATOM	1206	C	SER	135	7.694	34.621	10.979	1.00	15.00	A
ATOM	1207	O	SER	135	6.682	34.328	11.619	1.00	15.00	A
ATOM	1208	N	ALA	136	8.307	33.880	10.089	1.00	15.00	A
ATOM	1210	CA	ALA	136	7.809	32.598	9.627	1.00	15.00	A
ATOM	1211	CB	ALA	136	8.639	32.145	8.397	1.00	15.00	A
ATOM	1212	C	ALA	136	7.812	31.536	10.671	1.00	15.00	A
ATOM	1213	O	ALA	136	7.443	30.418	10.359	1.00	15.00	A
ATOM	1214	N	LEU	137	8.231	31.894	11.929	1.00	15.00	A
ATOM	1216	CA	LEU	137	8.282	30.890	12.975	1.00	15.00	A
ATOM	1217	CB	LEU	137	9.328	31.324	14.024	1.00	15.00	A
ATOM	1218	CG	LEU	137	10.756	30.776	13.895	1.00	15.00	A
ATOM	1219	CD1	LEU	137	11.172	30.523	12.472	1.00	15.00	A
ATOM	1220	CD2	LEU	137	11.757	31.557	14.736	1.00	15.00	A
ATOM	1221	C	LEU	137	6.948	30.881	13.692	1.00	15.00	A
ATOM	1222	O	LEU	137	6.712	29.967	14.429	1.00	15.00	A
ATOM	1223	N	GLY	138	6.097	31.921	13.449	1.00	15.00	A
ATOM	1225	CA	GLY	138	4.944	32.446	14.251	1.00	15.00	A
ATOM	1226	C	GLY	138	5.113	32.757	15.730	1.00	15.00	A
ATOM	1227	O	GLY	138	6.200	32.876	16.274	1.00	15.00	A
ATOM	1228	N	LEU	139	3.983	32.880	16.423	1.00	15.00	A
ATOM	1230	CA	LEU	139	4.071	33.222	17.817	1.00	15.00	A
ATOM	1231	CB	LEU	139	3.577	34.681	18.024	1.00	15.00	A
ATOM	1232	CG	LEU	139	4.504	35.741	17.360	1.00	15.00	A
ATOM	1233	CD1	LEU	139	3.710	36.992	16.951	1.00	15.00	A
ATOM	1234	CD2	LEU	139	5.635	36.058	18.333	1.00	15.00	A
ATOM	1235	C	LEU	139	3.263	32.232	18.608	1.00	15.00	A
ATOM	1236	O	LEU	139	2.325	31.594	18.107	1.00	15.00	A
ATOM	1237	N	PRO	140	3.606	32.158	19.906	1.00	15.00	A
ATOM	1238	CD	PRO	140	2.653	31.788	20.939	1.00	15.00	A
ATOM	1239	CA	PRO	140	4.908	32.552	20.456	1.00	15.00	A
ATOM	1240	CB	PRO	140	4.757	32.399	21.959	1.00	15.00	A
ATOM	1241	CG	PRO	140	3.535	31.491	22.124	1.00	15.00	A
ATOM	1242	C	PRO	140	6.080	31.819	19.957	1.00	15.00	A
ATOM	1243	O	PRO	140	6.027	30.749	19.347	1.00	15.00	A
ATOM	1244	N	VAL	141	7.172	32.508	20.278	1.00	15.00	A
ATOM	1246	CA	VAL	141	8.514	31.880	20.199	1.00	15.00	A
ATOM	1247	CB	VAL	141	9.389	32.563	19.136	1.00	15.00	A
ATOM	1248	CG1	VAL	141	8.951	32.196	17.735	1.00	15.00	A
ATOM	1249	CG2	VAL	141	9.512	34.078	19.370	1.00	15.00	A
ATOM	1250	C	VAL	141	9.233	32.001	21.518	1.00	15.00	A
ATOM	1251	O	VAL	141	9.004	32.950	22.251	1.00	15.00	A
ATOM	1252	N	ILE	142	10.116	31.044	21.777	1.00	15.00	A
ATOM	1254	CA	ILE	142	11.098	31.203	22.837	1.00	15.00	A

62/90

ATOM	1255	CB	ILE	142	11.359	29.890	23.558	1.00	15.00	A
ATOM	1256	CG2	ILE	142	12.587	29.954	24.511	1.00	15.00	A
ATOM	1257	CG1	ILE	142	10.153	29.541	24.382	1.00	15.00	A
ATOM	1258	CD1	ILE	142	10.512	29.266	25.872	1.00	15.00	A
ATOM	1259	C	ILE	142	12.360	31.765	22.279	1.00	15.00	A
ATOM	1260	O	ILE	142	12.804	31.491	21.184	1.00	15.00	A
ATOM	1261	N	VAL	143	12.899	32.659	23.096	1.00	15.00	A
ATOM	1263	CA	VAL	143	14.223	33.119	22.756	1.00	15.00	A
ATOM	1264	CB	VAL	143	14.163	34.634	22.825	1.00	15.00	A
ATOM	1265	CG1	VAL	143	15.538	35.296	22.986	1.00	15.00	A
ATOM	1266	CG2	VAL	143	13.354	35.103	21.621	1.00	15.00	A
ATOM	1267	C	VAL	143	15.051	32.580	23.846	1.00	15.00	A
ATOM	1268	O	VAL	143	14.680	32.738	24.983	1.00	15.00	A
ATOM	1269	N	LYS	144	16.169	31.932	23.500	1.00	15.00	A
ATOM	1271	CA	LYS	144	17.099	31.510	24.581	1.00	15.00	A
ATOM	1272	CB	LYS	144	16.667	30.136	25.108	1.00	15.00	A
ATOM	1273	CG	LYS	144	16.441	29.159	23.986	1.00	15.00	A
ATOM	1274	CD	LYS	144	15.571	27.985	24.439	1.00	15.00	A
ATOM	1275	CE	LYS	144	16.036	26.780	23.646	1.00	15.00	A
ATOM	1276	NZ	LYS	144	15.174	25.597	23.917	1.00	15.00	A
ATOM	1280	C	LYS	144	18.545	31.446	24.158	1.00	15.00	A
ATOM	1281	O	LYS	144	18.906	31.286	22.996	1.00	15.00	A
ATOM	1282	N	PRO	145	19.421	31.604	25.154	1.00	15.00	A
ATOM	1283	CD	PRO	145	19.208	31.892	26.573	1.00	15.00	A
ATOM	1284	CA	PRO	145	20.815	31.476	24.769	1.00	15.00	A
ATOM	1285	CB	PRO	145	21.514	32.194	25.964	1.00	15.00	A
ATOM	1286	CG	PRO	145	20.622	32.103	27.160	1.00	15.00	A
ATOM	1287	C	PRO	145	21.151	30.015	24.356	1.00	15.00	A
ATOM	1288	O	PRO	145	20.493	29.042	24.650	1.00	15.00	A
ATOM	1289	N	SER	146	22.152	29.893	23.518	1.00	15.00	A
ATOM	1291	CA	SER	146	22.434	28.574	22.932	1.00	15.00	A
ATOM	1292	CB	SER	146	23.157	28.766	21.560	1.00	15.00	A
ATOM	1293	OG	SER	146	24.476	29.293	21.765	1.00	15.00	A
ATOM	1295	C	SER	146	23.229	27.702	23.855	1.00	15.00	A
ATOM	1296	O	SER	146	23.181	26.469	23.877	1.00	15.00	A
ATOM	1297	N	ARG	147	24.004	28.426	24.629	1.00	15.00	A
ATOM	1299	CA	ARG	147	24.873	27.692	25.492	1.00	15.00	A
ATOM	1300	CB	ARG	147	26.329	28.251	25.549	1.00	15.00	A
ATOM	1301	CG	ARG	147	27.231	28.229	24.255	1.00	15.00	A
ATOM	1302	CD	ARG	147	28.506	29.113	24.398	1.00	15.00	A
ATOM	1303	NE	ARG	147	28.200	30.505	24.838	1.00	15.00	A
ATOM	1305	CZ	ARG	147	28.854	31.580	24.393	1.00	15.00	A
ATOM	1306	NH1	ARG	147	29.617	31.515	23.291	1.00	15.00	A
ATOM	1309	NH2	ARG	147	28.702	32.731	25.054	1.00	15.00	A
ATOM	1312	C	ARG	147	24.037	27.868	26.731	1.00	15.00	A
ATOM	1313	O	ARG	147	23.637	28.957	27.198	1.00	15.00	A
ATOM	1314	N	GLU	148	23.692	26.698	27.203	1.00	15.00	A
ATOM	1316	CA	GLU	148	23.128	26.965	28.493	1.00	15.00	A
ATOM	1317	CB	GLU	148	21.604	26.978	28.356	1.00	15.00	A
ATOM	1318	CG	GLU	148	20.999	28.190	29.014	1.00	15.00	A
ATOM	1319	CD	GLU	148	19.546	27.912	29.313	1.00	15.00	A
ATOM	1320	OE1	GLU	148	19.295	26.990	30.159	1.00	15.00	A
ATOM	1321	OE2	GLU	148	18.700	28.623	28.715	1.00	15.00	A
ATOM	1322	C	GLU	148	23.439	25.696	29.135	1.00	15.00	A
ATOM	1323	O	GLU	148	23.152	24.738	28.432	1.00	15.00	A
ATOM	1324	N	GLY	149	23.963	25.679	30.377	1.00	15.00	A
ATOM	1326	CA	GLY	149	23.775	26.711	31.454	1.00	15.00	A
ATOM	1327	C	GLY	149	22.309	26.930	31.835	1.00	15.00	A
ATOM	1328	O	GLY	149	21.816	28.047	31.945	1.00	15.00	A
ATOM	1329	N	SER	150	21.609	25.785	32.048	1.00	15.00	A
ATOM	1331	CA	SER	150	20.478	25.590	32.986	1.00	15.00	A

63/90

ATOM	1332	CB	SER	150	20.937	25.932	34.448	1.00	15.00	A
ATOM	1333	OG	SER	150	22.273	25.408	34.688	1.00	15.00	A
ATOM	1335	C	SER	150	19.166	26.335	32.711	1.00	15.00	A
ATOM	1336	O	SER	150	18.200	25.785	32.155	1.00	15.00	A
ATOM	1337	N	SER	151	19.148	27.637	33.121	1.00	15.00	A
ATOM	1339	CA	SER	151	17.934	28.425	33.096	1.00	15.00	A
ATOM	1340	CB	SER	151	16.813	27.682	33.883	1.00	15.00	A
ATOM	1341	OG	SER	151	15.687	28.573	34.144	1.00	15.00	A
ATOM	1343	C	SER	151	18.248	29.754	33.765	1.00	15.00	A
ATOM	1344	O	SER	151	17.909	29.979	34.942	1.00	15.00	A
ATOM	1345	N	VAL	152	18.828	30.635	32.929	1.00	15.00	A
ATOM	1347	CA	VAL	152	18.303	32.005	32.806	1.00	15.00	A
ATOM	1348	CB	VAL	152	18.913	32.902	33.924	1.00	15.00	A
ATOM	1349	CG1	VAL	152	20.223	33.695	33.567	1.00	15.00	A
ATOM	1350	CG2	VAL	152	17.890	33.832	34.533	1.00	15.00	A
ATOM	1351	C	VAL	152	18.545	32.551	31.404	1.00	15.00	A
ATOM	1352	O	VAL	152	19.160	31.935	30.520	1.00	15.00	A
ATOM	1353	N	GLY	153	17.953	33.735	31.213	1.00	15.00	A
ATOM	1355	CA	GLY	153	18.188	34.415	29.936	1.00	15.00	A
ATOM	1356	C	GLY	153	17.073	34.229	28.932	1.00	15.00	A
ATOM	1357	O	GLY	153	17.002	34.945	27.946	1.00	15.00	A
ATOM	1358	N	MET	154	16.225	33.225	29.166	1.00	15.00	A
ATOM	1360	CA	MET	154	15.179	33.050	28.165	1.00	15.00	A
ATOM	1361	CB	MET	154	14.993	31.585	27.777	1.00	15.00	A
ATOM	1362	CG	MET	154	14.713	30.512	28.808	1.00	15.00	A
ATOM	1363	SD	MET	154	16.145	30.409	29.958	1.00	15.00	A
ATOM	1364	CE	MET	154	15.312	30.530	31.583	1.00	15.00	A
ATOM	1365	C	MET	154	13.842	33.661	28.484	1.00	15.00	A
ATOM	1366	O	MET	154	13.386	33.810	29.607	1.00	15.00	A
ATOM	1367	N	SER	155	13.197	34.005	27.376	1.00	15.00	A
ATOM	1369	CA	SER	155	11.887	34.616	27.496	1.00	15.00	A
ATOM	1370	CB	SER	155	12.068	36.097	27.038	1.00	15.00	A
ATOM	1371	OG	SER	155	13.055	36.672	27.895	1.00	15.00	A
ATOM	1373	C	SER	155	10.965	33.908	26.526	1.00	15.00	A
ATOM	1374	O	SER	155	11.368	33.562	25.422	1.00	15.00	A
ATOM	1375	N	LYS	156	9.706	33.746	26.938	1.00	15.00	A
ATOM	1377	CA	LYS	156	8.591	33.429	25.981	1.00	15.00	A
ATOM	1378	CB	LYS	156	7.402	32.765	26.703	1.00	15.00	A
ATOM	1379	CG	LYS	156	6.243	32.311	25.767	1.00	15.00	A
ATOM	1380	CD	LYS	156	5.074	31.745	26.586	1.00	15.00	A
ATOM	1381	CE	LYS	156	4.004	31.123	25.679	1.00	15.00	A
ATOM	1382	NZ	LYS	156	2.985	30.341	26.411	1.00	15.00	A
ATOM	1386	C	LYS	156	8.037	34.683	25.318	1.00	15.00	A
ATOM	1387	O	LYS	156	7.600	35.608	26.001	1.00	15.00	A
ATOM	1388	N	VAL	157	8.042	34.679	23.976	1.00	15.00	A
ATOM	1390	CA	VAL	157	7.627	35.933	23.388	1.00	15.00	A
ATOM	1391	CB	VAL	157	8.839	36.463	22.583	1.00	15.00	A
ATOM	1392	CG1	VAL	157	8.617	37.717	21.766	1.00	15.00	A
ATOM	1393	CG2	VAL	157	9.873	36.834	23.611	1.00	15.00	A
ATOM	1394	C	VAL	157	6.323	35.840	22.657	1.00	15.00	A
ATOM	1395	O	VAL	157	6.135	35.045	21.761	1.00	15.00	A
ATOM	1396	N	VAL	158	5.407	36.736	23.071	1.00	15.00	A
ATOM	1398	CA	VAL	158	4.033	36.715	22.498	1.00	15.00	A
ATOM	1399	CB	VAL	158	2.948	36.696	23.590	1.00	15.00	A
ATOM	1400	CG1	VAL	158	2.953	35.312	24.261	1.00	15.00	A
ATOM	1401	CG2	VAL	158	3.100	37.835	24.637	1.00	15.00	A
ATOM	1402	C	VAL	158	3.658	37.704	21.395	1.00	15.00	A
ATOM	1403	O	VAL	158	2.715	37.452	20.647	1.00	15.00	A
ATOM	1404	N	ALA	159	4.456	38.782	21.255	1.00	15.00	A
ATOM	1406	CA	ALA	159	4.416	39.627	20.033	1.00	15.00	A
ATOM	1407	CB	ALA	159	3.928	41.008	20.408	1.00	15.00	A

64/90

ATOM	1408	C	ALA	159	5.723	39.806	19.316	1.00	15.00	A
ATOM	1409	O	ALA	159	6.778	39.967	19.924	1.00	15.00	A
ATOM	1410	N	GLU	160	5.700	39.878	17.973	1.00	15.00	A
ATOM	1412	CA	GLU	160	6.979	40.436	17.446	1.00	15.00	A
ATOM	1413	CB	GLU	160	7.006	40.431	15.907	1.00	15.00	A
ATOM	1414	CG	GLU	160	6.306	39.239	15.269	1.00	15.00	A
ATOM	1415	CD	GLU	160	7.205	37.999	15.178	1.00	15.00	A
ATOM	1416	OE1	GLU	160	6.657	36.892	15.095	1.00	15.00	A
ATOM	1417	OE2	GLU	160	8.414	38.140	15.148	1.00	15.00	A
ATOM	1418	C	GLU	160	7.065	41.878	17.902	1.00	15.00	A
ATOM	1419	O	GLU	160	6.053	42.401	18.389	1.00	15.00	A
ATOM	1420	N	ASN	161	8.268	42.489	17.846	1.00	15.00	A
ATOM	1422	CA	ASN	161	8.416	43.792	18.541	1.00	15.00	A
ATOM	1423	CB	ASN	161	7.396	44.852	18.006	1.00	15.00	A
ATOM	1424	CG	ASN	161	6.754	45.695	19.113	1.00	15.00	A
ATOM	1425	OD1	ASN	161	6.024	45.221	19.977	1.00	15.00	A
ATOM	1426	ND2	ASN	161	7.079	47.003	19.037	1.00	15.00	A
ATOM	1429	C	ASN	161	8.452	43.690	20.061	1.00	15.00	A
ATOM	1430	O	ASN	161	8.872	44.611	20.751	1.00	15.00	A
ATOM	1431	N	ALA	162	8.066	42.533	20.596	1.00	15.00	A
ATOM	1433	CA	ALA	162	8.699	42.282	21.847	1.00	15.00	A
ATOM	1434	CB	ALA	162	7.693	41.753	22.845	1.00	15.00	A
ATOM	1435	C	ALA	162	9.917	41.354	21.680	1.00	15.00	A
ATOM	1436	O	ALA	162	10.625	41.011	22.599	1.00	15.00	A
ATOM	1437	N	LEU	163	10.211	40.939	20.455	1.00	15.00	A
ATOM	1439	CA	LEU	163	11.407	40.100	20.300	1.00	15.00	A
ATOM	1440	CB	LEU	163	11.592	39.713	18.851	1.00	15.00	A
ATOM	1441	CG	LEU	163	10.654	38.572	18.533	1.00	15.00	A
ATOM	1442	CD1	LEU	163	10.361	38.753	17.076	1.00	15.00	A
ATOM	1443	CD2	LEU	163	11.265	37.161	18.786	1.00	15.00	A
ATOM	1444	C	LEU	163	12.654	40.835	20.602	1.00	15.00	A
ATOM	1445	O	LEU	163	13.548	40.323	21.245	1.00	15.00	A
ATOM	1446	N	GLN	164	12.720	42.079	20.087	1.00	15.00	A
ATOM	1448	CA	GLN	164	13.960	42.799	20.357	1.00	15.00	A
ATOM	1449	CB	GLN	164	13.731	44.247	19.937	1.00	15.00	A
ATOM	1450	CG	GLN	164	14.804	44.784	19.027	1.00	15.00	A
ATOM	1451	CD	GLN	164	14.273	44.726	17.644	1.00	15.00	A
ATOM	1452	OE1	GLN	164	14.171	43.684	16.966	1.00	15.00	A
ATOM	1453	NE2	GLN	164	13.973	45.969	17.197	1.00	15.00	A
ATOM	1456	C	GLN	164	14.380	42.786	21.822	1.00	15.00	A
ATOM	1457	O	GLN	164	15.534	42.595	22.172	1.00	15.00	A
ATOM	1458	N	ASP	165	13.377	43.024	22.700	1.00	15.00	A
ATOM	1460	CA	ASP	165	13.674	43.007	24.139	1.00	15.00	A
ATOM	1461	CB	ASP	165	12.423	43.302	25.014	1.00	15.00	A
ATOM	1462	CG	ASP	165	11.973	44.738	25.233	1.00	15.00	A
ATOM	1463	OD1	ASP	165	10.861	44.851	25.749	1.00	15.00	A
ATOM	1464	OD2	ASP	165	12.681	45.710	24.972	1.00	15.00	A
ATOM	1465	C	ASP	165	14.209	41.655	24.631	1.00	15.00	A
ATOM	1466	O	ASP	165	15.092	41.567	25.470	1.00	15.00	A
ATOM	1467	N	ALA	166	13.670	40.577	24.033	1.00	15.00	A
ATOM	1469	CA	ALA	166	14.192	39.282	24.454	1.00	15.00	A
ATOM	1470	CB	ALA	166	13.326	38.059	24.117	1.00	15.00	A
ATOM	1471	C	ALA	166	15.601	39.024	24.041	1.00	15.00	A
ATOM	1472	O	ALA	166	16.324	38.492	24.847	1.00	15.00	A
ATOM	1473	N	LEU	167	15.960	39.484	22.842	1.00	15.00	A
ATOM	1475	CA	LEU	167	17.325	39.292	22.367	1.00	15.00	A
ATOM	1476	CB	LEU	167	17.592	39.703	20.922	1.00	15.00	A
ATOM	1477	CG	LEU	167	17.002	38.889	19.759	1.00	15.00	A
ATOM	1478	CD1	LEU	167	17.276	37.385	19.926	1.00	15.00	A
ATOM	1479	CD2	LEU	167	15.552	39.152	19.490	1.00	15.00	A
ATOM	1480	C	LEU	167	18.348	40.041	23.199	1.00	15.00	A

65/90

ATOM	1481	O	LEU	167	19.339	39.425	23.537	1.00	15.00	A
ATOM	1482	N	ARG	168	18.091	41.324	23.541	1.00	15.00	A
ATOM	1484	CA	ARG	168	19.023	42.011	24.441	1.00	15.00	A
ATOM	1485	CB	ARG	168	18.635	43.521	24.670	1.00	15.00	A
ATOM	1486	CG	ARG	168	17.124	43.893	24.588	1.00	15.00	A
ATOM	1487	CD	ARG	168	16.645	45.403	24.583	1.00	15.00	A
ATOM	1488	NE	ARG	168	16.869	46.221	23.361	1.00	15.00	A
ATOM	1490	CZ	ARG	168	15.895	46.617	22.526	1.00	15.00	A
ATOM	1491	NH1	ARG	168	16.189	47.323	21.431	1.00	15.00	A
ATOM	1494	NH2	ARG	168	14.602	46.335	22.706	1.00	15.00	A
ATOM	1497	C	ARG	168	19.241	41.232	25.718	1.00	15.00	A
ATOM	1498	O	ARG	168	20.335	41.167	26.247	1.00	15.00	A
ATOM	1499	N	LEU	169	18.214	40.559	26.202	1.00	15.00	A
ATOM	1501	CA	LEU	169	18.442	39.961	27.494	1.00	15.00	A
ATOM	1502	CB	LEU	169	17.186	40.268	28.335	1.00	15.00	A
ATOM	1503	CG	LEU	169	15.924	39.420	28.576	1.00	15.00	A
ATOM	1504	CD1	LEU	169	16.148	38.222	29.517	1.00	15.00	A
ATOM	1505	CD2	LEU	169	14.947	40.369	29.291	1.00	15.00	A
ATOM	1506	C	LEU	169	19.033	38.572	27.420	1.00	15.00	A
ATOM	1507	O	LEU	169	19.741	38.096	28.285	1.00	15.00	A
ATOM	1508	N	ALA	170	18.833	37.947	26.277	1.00	15.00	A
ATOM	1510	CA	ALA	170	19.562	36.693	26.144	1.00	15.00	A
ATOM	1511	CB	ALA	170	18.885	35.827	25.076	1.00	15.00	A
ATOM	1512	C	ALA	170	21.023	36.905	25.859	1.00	15.00	A
ATOM	1513	O	ALA	170	21.891	36.042	26.043	1.00	15.00	A
ATOM	1514	N	PHE	171	21.277	38.124	25.363	1.00	15.00	A
ATOM	1516	CA	PHE	171	22.634	38.331	24.841	1.00	15.00	A
ATOM	1517	CB	PHE	171	22.652	39.247	23.599	1.00	15.00	A
ATOM	1518	CG	PHE	171	22.512	38.563	22.259	1.00	15.00	A
ATOM	1519	CD1	PHE	171	23.403	37.534	21.831	1.00	15.00	A
ATOM	1520	CD2	PHE	171	21.463	38.984	21.428	1.00	15.00	A
ATOM	1521	CE1	PHE	171	23.183	36.942	20.546	1.00	15.00	A
ATOM	1522	CE2	PHE	171	21.285	38.396	20.173	1.00	15.00	A
ATOM	1523	CZ	PHE	171	22.124	37.379	19.730	1.00	15.00	A
ATOM	1524	C	PHE	171	23.443	39.061	25.893	1.00	15.00	A
ATOM	1525	O	PHE	171	24.221	39.993	25.639	1.00	15.00	A
ATOM	1526	N	GLN	172	23.198	38.633	27.136	1.00	15.00	A
ATOM	1528	CA	GLN	172	24.175	39.022	28.174	1.00	15.00	A
ATOM	1529	CB	GLN	172	23.562	40.158	29.023	1.00	15.00	A
ATOM	1530	CG	GLN	172	22.574	41.166	28.350	1.00	15.00	A
ATOM	1531	CD	GLN	172	22.414	42.501	29.113	1.00	15.00	A
ATOM	1532	OE1	GLN	172	23.347	43.171	29.580	1.00	15.00	A
ATOM	1533	NE2	GLN	172	21.141	42.933	29.173	1.00	15.00	A
ATOM	1536	C	GLN	172	24.482	37.750	28.986	1.00	15.00	A
ATOM	1537	O	GLN	172	24.785	37.708	30.183	1.00	15.00	A
ATOM	1538	N	HIS	173	24.382	36.606	28.232	1.00	15.00	A
ATOM	1540	CA	HIS	173	24.542	35.231	28.804	1.00	15.00	A
ATOM	1541	CB	HIS	173	23.206	34.556	29.248	1.00	15.00	A
ATOM	1542	CG	HIS	173	22.609	35.144	30.507	1.00	15.00	A
ATOM	1543	ND1	HIS	173	21.552	35.977	30.518	1.00	15.00	A
ATOM	1545	CD2	HIS	173	23.152	35.030	31.790	1.00	15.00	A
ATOM	1546	NE2	HIS	173	22.437	35.832	32.594	1.00	15.00	A
ATOM	1547	CE1	HIS	173	21.442	36.410	31.827	1.00	15.00	A
ATOM	1548	C	HIS	173	24.989	34.272	27.746	1.00	15.00	A
ATOM	1549	O	HIS	173	25.055	33.046	27.912	1.00	15.00	A
ATOM	1550	N	ASP	174	25.269	34.884	26.596	1.00	15.00	A
ATOM	1552	CA	ASP	174	25.682	34.168	25.430	1.00	15.00	A
ATOM	1553	CB	ASP	174	24.655	33.142	25.012	1.00	15.00	A
ATOM	1554	CG	ASP	174	25.237	31.733	25.053	1.00	15.00	A
ATOM	1555	OD1	ASP	174	25.627	31.145	24.023	1.00	15.00	A
ATOM	1556	OD2	ASP	174	25.302	31.189	26.157	1.00	15.00	A

66/90

ATOM	1557	C	ASP	174	25.874	35.122	24.330	1.00	15.00	A
ATOM	1558	O	ASP	174	25.157	36.070	24.015	1.00	15.00	A
ATOM	1559	N	GLU	175	26.893	34.705	23.689	1.00	15.00	A
ATOM	1561	CA	GLU	175	27.236	35.072	22.357	1.00	15.00	A
ATOM	1562	CB	GLU	175	28.523	34.307	22.290	1.00	15.00	A
ATOM	1563	CG	GLU	175	29.713	35.029	22.923	1.00	15.00	A
ATOM	1564	CD	GLU	175	30.395	35.677	21.744	1.00	15.00	A
ATOM	1565	OE1	GLU	175	31.456	36.314	21.905	1.00	15.00	A
ATOM	1566	OE2	GLU	175	29.901	35.479	20.622	1.00	15.00	A
ATOM	1567	C	GLU	175	26.261	34.737	21.230	1.00	15.00	A
ATOM	1568	O	GLU	175	25.999	35.507	20.310	1.00	15.00	A
ATOM	1569	N	GLU	176	25.755	33.504	21.317	1.00	15.00	A
ATOM	1571	CA	GLU	176	24.858	33.043	20.288	1.00	15.00	A
ATOM	1572	CB	GLU	176	25.552	31.824	19.758	1.00	15.00	A
ATOM	1573	CG	GLU	176	24.871	31.030	18.676	1.00	15.00	A
ATOM	1574	CD	GLU	176	25.012	31.709	17.359	1.00	15.00	A
ATOM	1575	OE1	GLU	176	25.955	32.475	17.157	1.00	15.00	A
ATOM	1576	OE2	GLU	176	24.152	31.499	16.510	1.00	15.00	A
ATOM	1577	C	GLU	176	23.519	32.773	20.935	1.00	15.00	A
ATOM	1578	O	GLU	176	23.462	32.399	22.088	1.00	15.00	A
ATOM	1579	N	VAL	177	22.433	32.996	20.179	1.00	15.00	A
ATOM	1581	CA	VAL	177	21.117	32.834	20.813	1.00	15.00	A
ATOM	1582	CB	VAL	177	20.586	34.213	21.205	1.00	15.00	A
ATOM	1583	CG1	VAL	177	19.057	34.392	21.269	1.00	15.00	A
ATOM	1584	CG2	VAL	177	21.273	34.702	22.488	1.00	15.00	A
ATOM	1585	C	VAL	177	20.123	32.235	19.817	1.00	15.00	A
ATOM	1586	O	VAL	177	20.066	32.623	18.655	1.00	15.00	A
ATOM	1587	N	LEU	178	19.327	31.305	20.346	1.00	15.00	A
ATOM	1589	CA	LEU	178	18.293	30.721	19.511	1.00	15.00	A
ATOM	1590	CB	LEU	178	18.100	29.276	19.936	1.00	15.00	A
ATOM	1591	CG	LEU	178	19.326	28.416	19.845	1.00	15.00	A
ATOM	1592	CD1	LEU	178	19.024	27.044	20.414	1.00	15.00	A
ATOM	1593	CD2	LEU	178	19.593	28.274	18.363	1.00	15.00	A
ATOM	1594	C	LEU	178	16.927	31.380	19.693	1.00	15.00	A
ATOM	1595	O	LEU	178	16.513	31.819	20.740	1.00	15.00	A
ATOM	1596	N	ILE	179	16.210	31.382	18.605	1.00	15.00	A
ATOM	1598	CA	ILE	179	14.773	31.678	18.735	1.00	15.00	A
ATOM	1599	CB	ILE	179	14.492	32.897	17.843	1.00	15.00	A
ATOM	1600	CG2	ILE	179	13.018	33.319	17.833	1.00	15.00	A
ATOM	1601	CG1	ILE	179	15.351	34.082	18.339	1.00	15.00	A
ATOM	1602	CD1	ILE	179	15.221	35.256	17.378	1.00	15.00	A
ATOM	1603	C	ILE	179	14.053	30.461	18.167	1.00	15.00	A
ATOM	1604	O	ILE	179	14.261	30.121	17.013	1.00	15.00	A
ATOM	1605	N	GLU	180	13.214	29.817	18.969	1.00	15.00	A
ATOM	1607	CA	GLU	180	12.577	28.682	18.295	1.00	15.00	A
ATOM	1608	CB	GLU	180	12.846	27.311	18.963	1.00	15.00	A
ATOM	1609	CG	GLU	180	14.205	26.922	19.410	1.00	15.00	A
ATOM	1610	CD	GLU	180	13.962	25.866	20.426	1.00	15.00	A
ATOM	1611	OE1	GLU	180	13.079	25.066	20.274	1.00	15.00	A
ATOM	1612	OE2	GLU	180	14.655	25.842	21.400	1.00	15.00	A
ATOM	1613	C	GLU	180	11.069	28.762	18.346	1.00	15.00	A
ATOM	1614	O	GLU	180	10.517	29.444	19.178	1.00	15.00	A
ATOM	1615	N	LYS	181	10.407	27.976	17.480	1.00	15.00	A
ATOM	1617	CA	LYS	181	8.966	27.852	17.656	1.00	15.00	A
ATOM	1618	CB	LYS	181	8.488	26.862	16.649	1.00	15.00	A
ATOM	1619	CG	LYS	181	6.969	26.639	16.710	1.00	15.00	A
ATOM	1620	CD	LYS	181	6.574	25.315	16.045	1.00	15.00	A
ATOM	1621	CE	LYS	181	5.164	24.878	16.554	1.00	15.00	A
ATOM	1622	NZ	LYS	181	4.187	25.516	15.676	1.00	15.00	A
ATOM	1626	C	LYS	181	8.604	27.413	19.094	1.00	15.00	A
ATOM	1627	O	LYS	181	9.156	26.505	19.668	1.00	15.00	A

67/90

ATOM	1628	N	TRP	182	7.674	28.120	19.694	1.00	15.00	A
ATOM	1630	CA	TRP	182	7.113	27.607	20.919	1.00	15.00	A
ATOM	1631	CB	TRP	182	6.220	28.749	21.470	1.00	15.00	A
ATOM	1632	CG	TRP	182	5.513	28.375	22.761	1.00	15.00	A
ATOM	1633	CD2	TRP	182	6.080	28.349	24.023	1.00	15.00	A
ATOM	1634	CE2	TRP	182	5.026	27.897	24.961	1.00	15.00	A
ATOM	1635	CE3	TRP	182	7.362	28.618	24.510	1.00	15.00	A
ATOM	1636	CD1	TRP	182	4.196	27.933	22.933	1.00	15.00	A
ATOM	1637	NE1	TRP	182	3.915	27.634	24.235	1.00	15.00	A
ATOM	1639	CZ2	TRP	182	5.344	27.732	26.327	1.00	15.00	A
ATOM	1640	CZ3	TRP	182	7.630	28.412	25.895	1.00	15.00	A
ATOM	1641	CH2	TRP	182	6.651	27.994	26.789	1.00	15.00	A
ATOM	1642	C	TRP	182	6.369	26.289	20.701	1.00	15.00	A
ATOM	1643	O	TRP	182	5.534	26.164	19.828	1.00	15.00	A
ATOM	1644	N	LEU	183	6.761	25.281	21.480	1.00	15.00	A
ATOM	1646	CA	LEU	183	6.020	24.029	21.434	1.00	15.00	A
ATOM	1647	CB	LEU	183	7.016	22.878	21.519	1.00	15.00	A
ATOM	1648	CG	LEU	183	8.168	22.938	20.531	1.00	15.00	A
ATOM	1649	CD1	LEU	183	9.146	21.813	20.897	1.00	15.00	A
ATOM	1650	CD2	LEU	183	7.698	22.927	19.057	1.00	15.00	A
ATOM	1651	C	LEU	183	5.020	23.997	22.577	1.00	15.00	A
ATOM	1652	O	LEU	183	5.294	24.515	23.648	1.00	15.00	A
ATOM	1653	N	SER	184	3.867	23.392	22.348	1.00	15.00	A
ATOM	1655	CA	SER	184	2.811	23.408	23.383	1.00	15.00	A
ATOM	1656	CB	SER	184	1.435	23.011	22.858	1.00	15.00	A
ATOM	1657	OG	SER	184	1.398	23.331	21.466	1.00	15.00	A
ATOM	1659	C	SER	184	2.961	22.454	24.513	1.00	15.00	A
ATOM	1660	O	SER	184	2.228	22.537	25.497	1.00	15.00	A
ATOM	1661	N	GLY	185	3.899	21.490	24.329	1.00	15.00	A
ATOM	1663	CA	GLY	185	4.103	20.466	25.359	1.00	15.00	A
ATOM	1664	C	GLY	185	3.080	19.390	25.625	1.00	15.00	A
ATOM	1665	O	GLY	185	2.204	19.158	24.809	1.00	15.00	A
ATOM	1666	N	PRO	186	3.289	18.666	26.745	1.00	15.00	A
ATOM	1667	CD	PRO	186	2.432	17.612	27.254	1.00	15.00	A
ATOM	1668	CA	PRO	186	4.353	18.963	27.711	1.00	15.00	A
ATOM	1669	CB	PRO	186	3.871	18.323	29.029	1.00	15.00	A
ATOM	1670	CG	PRO	186	3.140	17.100	28.498	1.00	15.00	A
ATOM	1671	C	PRO	186	5.720	18.432	27.297	1.00	15.00	A
ATOM	1672	O	PRO	186	5.931	17.805	26.254	1.00	15.00	A
ATOM	1673	N	GLU	187	6.616	18.797	28.194	1.00	15.00	A
ATOM	1675	CA	GLU	187	7.947	18.278	28.189	1.00	15.00	A
ATOM	1676	CB	GLU	187	8.916	19.138	29.070	1.00	15.00	A
ATOM	1677	CG	GLU	187	10.334	18.625	28.723	1.00	15.00	A
ATOM	1678	CD	GLU	187	11.509	19.310	29.396	1.00	15.00	A
ATOM	1679	OE1	GLU	187	11.380	20.473	29.737	1.00	15.00	A
ATOM	1680	OE2	GLU	187	12.576	18.679	29.555	1.00	15.00	A
ATOM	1681	C	GLU	187	7.944	16.865	28.733	1.00	15.00	A
ATOM	1682	O	GLU	187	7.234	16.582	29.658	1.00	15.00	A
ATOM	1683	N	PHE	188	8.768	16.020	28.130	1.00	15.00	A
ATOM	1685	CA	PHE	188	9.086	14.698	28.639	1.00	15.00	A
ATOM	1686	CB	PHE	188	8.630	13.672	27.599	1.00	15.00	A
ATOM	1687	CG	PHE	188	7.119	13.618	27.480	1.00	15.00	A
ATOM	1688	CD1	PHE	188	6.412	14.610	26.781	1.00	15.00	A
ATOM	1689	CD2	PHE	188	6.436	12.595	28.162	1.00	15.00	A
ATOM	1690	CE1	PHE	188	5.003	14.599	26.778	1.00	15.00	A
ATOM	1691	CE2	PHE	188	5.031	12.556	28.187	1.00	15.00	A
ATOM	1692	CZ	PHE	188	4.324	13.585	27.484	1.00	15.00	A
ATOM	1693	C	PHE	188	10.599	14.673	28.790	1.00	15.00	A
ATOM	1694	O	PHE	188	11.309	15.316	28.032	1.00	15.00	A
ATOM	1695	N	THR	189	11.047	13.974	29.819	1.00	15.00	A
ATOM	1697	CA	THR	189	12.462	13.648	29.885	1.00	15.00	A

68/90

ATOM	1698	CB	THR	189	13.182	14.464	30.954	1.00	15.00	A
ATOM	1699	OG1	THR	189	14.604	14.466	30.645	1.00	15.00	A
ATOM	1701	CG2	THR	189	12.857	13.992	32.375	1.00	15.00	A
ATOM	1702	C	THR	189	12.626	12.154	30.119	1.00	15.00	A
ATOM	1703	O	THR	189	11.871	11.525	30.827	1.00	15.00	A
ATOM	1704	N	VAL	190	13.675	11.652	29.478	1.00	15.00	A
ATOM	1706	CA	VAL	190	14.003	10.224	29.410	1.00	15.00	A
ATOM	1707	CB	VAL	190	13.854	9.682	27.974	1.00	15.00	A
ATOM	1708	CG1	VAL	190	14.067	8.176	27.902	1.00	15.00	A
ATOM	1709	CG2	VAL	190	12.504	10.089	27.380	1.00	15.00	A
ATOM	1710	C	VAL	190	15.439	10.019	29.784	1.00	15.00	A
ATOM	1711	O	VAL	190	16.331	10.464	29.101	1.00	15.00	A
ATOM	1712	N	ALA	191	15.617	9.280	30.860	1.00	15.00	A
ATOM	1714	CA	ALA	191	16.923	8.956	31.349	1.00	15.00	A
ATOM	1715	CB	ALA	191	16.825	8.747	32.896	1.00	15.00	A
ATOM	1716	C	ALA	191	17.442	7.712	30.669	1.00	15.00	A
ATOM	1717	O	ALA	191	16.697	6.783	30.415	1.00	15.00	A
ATOM	1718	N	ILE	192	18.731	7.781	30.392	1.00	15.00	A
ATOM	1720	CA	ILE	192	19.496	6.673	29.820	1.00	15.00	A
ATOM	1721	CB	ILE	192	20.144	7.095	28.463	1.00	15.00	A
ATOM	1722	CG2	ILE	192	21.004	5.976	27.837	1.00	15.00	A
ATOM	1723	CG1	ILE	192	18.953	7.388	27.507	1.00	15.00	A
ATOM	1724	CD1	ILE	192	19.179	7.725	26.025	1.00	15.00	A
ATOM	1725	C	ILE	192	20.576	6.221	30.839	1.00	15.00	A
ATOM	1726	O	ILE	192	21.237	7.045	31.422	1.00	15.00	A
ATOM	1727	N	LEU	193	20.714	4.906	30.995	1.00	15.00	A
ATOM	1729	CA	LEU	193	21.710	4.303	31.860	1.00	15.00	A
ATOM	1730	CB	LEU	193	20.977	3.786	33.088	1.00	15.00	A
ATOM	1731	CG	LEU	193	21.895	3.072	34.086	1.00	15.00	A
ATOM	1732	CD1	LEU	193	22.955	3.969	34.711	1.00	15.00	A
ATOM	1733	CD2	LEU	193	21.056	2.466	35.195	1.00	15.00	A
ATOM	1734	C	LEU	193	22.350	3.153	31.074	1.00	15.00	A
ATOM	1735	O	LEU	193	21.754	2.121	30.875	1.00	15.00	A
ATOM	1736	N	GLY	194	23.535	3.418	30.539	1.00	15.00	A
ATOM	1738	CA	GLY	194	24.106	2.449	29.612	1.00	15.00	A
ATOM	1739	C	GLY	194	23.334	2.461	28.294	1.00	15.00	A
ATOM	1740	O	GLY	194	23.177	3.496	27.685	1.00	15.00	A
ATOM	1741	N	GLU	195	22.823	1.292	27.940	1.00	15.00	A
ATOM	1743	CA	GLU	195	21.888	1.195	26.799	1.00	15.00	A
ATOM	1744	CB	GLU	195	22.188	-0.057	25.923	1.00	15.00	A
ATOM	1745	CG	GLU	195	23.485	-0.100	25.149	1.00	15.00	A
ATOM	1746	CD	GLU	195	23.732	-1.561	24.776	1.00	15.00	A
ATOM	1747	OE1	GLU	195	22.793	-2.308	24.429	1.00	15.00	A
ATOM	1748	OE2	GLU	195	24.890	-1.973	24.906	1.00	15.00	A
ATOM	1749	C	GLU	195	20.453	1.090	27.254	1.00	15.00	A
ATOM	1750	O	GLU	195	19.525	1.010	26.476	1.00	15.00	A
ATOM	1751	N	GLU	196	20.256	1.105	28.561	1.00	15.00	A
ATOM	1753	CA	GLU	196	18.887	1.021	29.056	1.00	15.00	A
ATOM	1754	CB	GLU	196	18.897	0.563	30.539	1.00	15.00	A
ATOM	1755	CG	GLU	196	17.464	0.326	31.056	1.00	15.00	A
ATOM	1756	CD	GLU	196	17.443	-0.391	32.432	1.00	15.00	A
ATOM	1757	OE1	GLU	196	16.351	-0.748	32.898	1.00	15.00	A
ATOM	1758	OE2	GLU	196	18.501	-0.620	33.014	1.00	15.00	A
ATOM	1759	C	GLU	196	18.179	2.358	28.961	1.00	15.00	A
ATOM	1760	O	GLU	196	18.660	3.387	29.422	1.00	15.00	A
ATOM	1761	N	ILE	197	17.009	2.303	28.353	1.00	15.00	A
ATOM	1763	CA	ILE	197	16.242	3.546	28.295	1.00	15.00	A
ATOM	1764	CB	ILE	197	15.587	3.677	26.883	1.00	15.00	A
ATOM	1765	CG2	ILE	197	14.874	4.997	26.745	1.00	15.00	A
ATOM	1766	CG1	ILE	197	16.590	3.500	25.721	1.00	15.00	A
ATOM	1767	CD1	ILE	197	17.695	4.549	25.843	1.00	15.00	A

69/90

ATOM	1768	C	ILE	197	15.170	3.450	29.388	1.00	15.00	A
ATOM	1769	O	ILE	197	14.317	2.605	29.301	1.00	15.00	A
ATOM	1770	N	LEU	198	15.282	4.278	30.425	1.00	15.00	A
ATOM	1772	CA	LEU	198	14.437	4.156	31.619	1.00	15.00	A
ATOM	1773	CB	LEU	198	15.127	4.893	32.782	1.00	15.00	A
ATOM	1774	CG	LEU	198	16.585	4.521	33.084	1.00	15.00	A
ATOM	1775	CD1	LEU	198	17.125	5.269	34.343	1.00	15.00	A
ATOM	1776	CD2	LEU	198	16.756	3.018	33.194	1.00	15.00	A
ATOM	1777	C	LEU	198	13.061	4.830	31.369	1.00	15.00	A
ATOM	1778	O	LEU	198	12.948	5.658	30.483	1.00	15.00	A
ATOM	1779	N	PRO	199	12.074	4.494	32.191	1.00	15.00	A
ATOM	1780	CD	PRO	199	12.163	3.594	33.323	1.00	15.00	A
ATOM	1781	CA	PRO	199	10.724	5.082	32.062	1.00	15.00	A
ATOM	1782	CB	PRO	199	10.043	4.646	33.346	1.00	15.00	A
ATOM	1783	CG	PRO	199	10.694	3.322	33.689	1.00	15.00	A
ATOM	1784	C	PRO	199	10.649	6.598	31.919	1.00	15.00	A
ATOM	1785	O	PRO	199	11.305	7.326	32.645	1.00	15.00	A
ATOM	1786	N	SER	200	9.873	7.063	30.924	1.00	15.00	A
ATOM	1788	CA	SER	200	9.936	8.530	30.786	1.00	15.00	A
ATOM	1789	CB	SER	200	9.349	8.987	29.443	1.00	15.00	A
ATOM	1790	OG	SER	200	8.034	8.495	29.363	1.00	15.00	A
ATOM	1792	C	SER	200	9.231	9.252	31.907	1.00	15.00	A
ATOM	1793	O	SER	200	8.401	8.707	32.612	1.00	15.00	A
ATOM	1794	N	ILE	201	9.583	10.510	32.069	1.00	15.00	A
ATOM	1796	CA	ILE	201	8.847	11.378	32.976	1.00	15.00	A
ATOM	1797	CB	ILE	201	9.814	11.868	34.027	1.00	15.00	A
ATOM	1798	CG2	ILE	201	9.291	13.025	34.877	1.00	15.00	A
ATOM	1799	CG1	ILE	201	10.285	10.722	34.897	1.00	15.00	A
ATOM	1800	CD1	ILE	201	11.554	11.051	35.694	1.00	15.00	A
ATOM	1801	C	ILE	201	8.278	12.554	32.182	1.00	15.00	A
ATOM	1802	O	ILE	201	8.930	13.186	31.384	1.00	15.00	A
ATOM	1803	N	ARG	202	7.005	12.766	32.448	1.00	15.00	A
ATOM	1805	CA	ARG	202	6.308	13.969	32.000	1.00	15.00	A
ATOM	1806	CB	ARG	202	4.823	13.659	31.813	1.00	15.00	A
ATOM	1807	CG	ARG	202	4.092	14.902	31.343	1.00	15.00	A
ATOM	1808	CD	ARG	202	2.619	14.636	31.062	1.00	15.00	A
ATOM	1809	NE	ARG	202	2.066	13.915	32.188	1.00	15.00	A
ATOM	1811	CZ	ARG	202	0.817	13.611	32.126	1.00	15.00	A
ATOM	1812	NH1	ARG	202	-0.046	14.318	31.325	1.00	15.00	A
ATOM	1815	NH2	ARG	202	0.471	12.542	32.816	1.00	15.00	A
ATOM	1818	C	ARG	202	6.485	15.087	32.982	1.00	15.00	A
ATOM	1819	O	ARG	202	6.311	14.880	34.169	1.00	15.00	A
ATOM	1820	N	ILE	203	6.639	15.689	32.968	1.00	15.00	A
ATOM	1822	CA	ILE	203	6.717	16.777	33.953	1.00	15.00	A
ATOM	1823	CB	ILE	203	8.101	17.497	33.877	1.00	15.00	A
ATOM	1824	CG2	ILE	203	8.398	18.246	35.187	1.00	15.00	A
ATOM	1825	CG1	ILE	203	9.189	16.498	33.447	1.00	15.00	A
ATOM	1826	CD1	ILE	203	9.483	15.373	34.454	1.00	15.00	A
ATOM	1827	C	ILE	203	5.574	17.764	33.721	1.00	15.00	A
ATOM	1828	O	ILE	203	5.179	18.079	32.592	1.00	15.00	A
ATOM	1829	N	GLN	204	5.070	18.243	34.833	1.00	15.00	A
ATOM	1831	CA	GLN	204	3.968	19.217	34.827	1.00	15.00	A
ATOM	1832	CB	GLN	204	2.591	18.615	35.006	1.00	15.00	A
ATOM	1833	CG	GLN	204	1.511	19.438	34.300	1.00	15.00	A
ATOM	1834	CD	GLN	204	1.549	19.221	32.810	1.00	15.00	A
ATOM	1835	OE1	GLN	204	2.169	18.291	32.256	1.00	15.00	A
ATOM	1836	NE2	GLN	204	0.842	20.103	32.112	1.00	15.00	A
ATOM	1839	C	GLN	204	4.297	20.310	35.846	1.00	15.00	A
ATOM	1840	O	GLN	204	3.940	20.211	37.026	1.00	15.00	A
ATOM	1841	N	PRO	205	4.992	21.305	35.316	1.00	15.00	A
ATOM	1842	CD	PRO	205	5.437	21.439	33.918	1.00	15.00	A

70/90

ATOM	1843	CA	PRO	205	5.422	22.465	36.129	1.00	15.00	A
ATOM	1844	CB	PRO	205	6.420	23.197	35.282	1.00	15.00	A
ATOM	1845	CG	PRO	205	6.410	22.589	33.928	1.00	15.00	A
ATOM	1846	C	PRO	205	4.170	23.233	36.490	1.00	15.00	A
ATOM	1847	O	PRO	205	3.193	23.149	35.734	1.00	15.00	A
ATOM	1848	N	SER	206	4.200	23.924	37.615	1.00	15.00	A
ATOM	1850	CA	SER	206	3.009	24.687	38.049	1.00	15.00	A
ATOM	1851	CB	SER	206	2.854	24.700	39.564	1.00	15.00	A
ATOM	1852	OG	SER	206	3.861	25.524	40.149	1.00	15.00	A
ATOM	1854	C	SER	206	3.108	26.118	37.539	1.00	15.00	A
ATOM	1855	O	SER	206	2.485	26.979	38.196	1.00	15.00	A
ATOM	1856	N	GLY	207	3.838	26.315	36.460	1.00	15.00	A
ATOM	1858	CA	GLY	207	4.035	27.631	35.866	1.00	15.00	A
ATOM	1859	C	GLY	207	4.066	27.611	34.349	1.00	15.00	A
ATOM	1860	O	GLY	207	3.423	26.781	33.685	1.00	15.00	A
ATOM	1861	N	THR	208	4.842	28.553	33.813	1.00	15.00	A
ATOM	1863	CA	THR	208	4.989	28.740	32.368	1.00	15.00	A
ATOM	1864	CB	THR	208	5.437	30.221	32.004	1.00	15.00	A
ATOM	1865	OG1	THR	208	4.917	31.089	33.067	1.00	15.00	A
ATOM	1867	CG2	THR	208	4.974	30.613	30.607	1.00	15.00	A
ATOM	1868	C	THR	208	5.902	27.755	31.649	1.00	15.00	A
ATOM	1869	O	THR	208	5.551	27.302	30.530	1.00	15.00	A
ATOM	1870	N	PHE	209	7.045	27.494	32.258	1.00	15.00	A
ATOM	1872	CA	PHE	209	8.019	26.538	31.660	1.00	15.00	A
ATOM	1873	CB	PHE	209	8.968	27.147	30.675	1.00	15.00	A
ATOM	1874	CG	PHE	209	9.999	28.126	31.152	1.00	15.00	A
ATOM	1875	CD1	PHE	209	9.646	29.457	31.417	1.00	15.00	A
ATOM	1876	CD2	PHE	209	11.338	27.738	31.296	1.00	15.00	A
ATOM	1877	CE1	PHE	209	10.581	30.364	31.846	1.00	15.00	A
ATOM	1878	CE2	PHE	209	12.301	28.665	31.727	1.00	15.00	A
ATOM	1879	CZ	PHE	209	11.915	29.976	32.006	1.00	15.00	A
ATOM	1880	C	PHE	209	8.674	25.861	32.869	1.00	15.00	A
ATOM	1881	O	PHE	209	8.423	26.348	33.979	1.00	15.00	A
ATOM	1882	N	TYR	210	9.413	24.822	32.603	1.00	15.00	A
ATOM	1884	CA	TYR	210	10.088	24.090	33.737	1.00	15.00	A
ATOM	1885	CB	TYR	210	10.292	22.661	33.281	1.00	15.00	A
ATOM	1886	CG	TYR	210	10.687	21.620	34.286	1.00	15.00	A
ATOM	1887	CD1	TYR	210	10.234	21.576	35.600	1.00	15.00	A
ATOM	1888	CE1	TYR	210	10.657	20.578	36.488	1.00	15.00	A
ATOM	1889	CD2	TYR	210	11.599	20.643	33.870	1.00	15.00	A
ATOM	1890	CE2	TYR	210	12.040	19.647	34.722	1.00	15.00	A
ATOM	1891	CZ	TYR	210	11.563	19.623	36.028	1.00	15.00	A
ATOM	1892	OH	TYR	210	12.045	18.599	36.800	1.00	15.00	A
ATOM	1894	C	TYR	210	11.326	24.917	34.070	1.00	15.00	A
ATOM	1895	O	TYR	210	12.418	24.712	33.528	1.00	15.00	A
ATOM	1896	N	ASP	211	11.116	25.891	34.950	1.00	15.00	A
ATOM	1898	CA	ASP	211	12.151	26.845	35.343	1.00	15.00	A
ATOM	1899	CB	ASP	211	11.561	28.266	35.460	1.00	15.00	A
ATOM	1900	CG	ASP	211	10.403	28.282	36.433	1.00	15.00	A
ATOM	1901	OD1	ASP	211	10.216	27.231	37.073	1.00	15.00	A
ATOM	1902	OD2	ASP	211	9.670	29.269	36.582	1.00	15.00	A
ATOM	1903	C	ASP	211	12.903	26.431	36.600	1.00	15.00	A
ATOM	1904	O	ASP	211	12.439	25.630	37.423	1.00	15.00	A
ATOM	1905	N	TYR	212	14.080	26.993	36.721	1.00	15.00	A
ATOM	1907	CA	TYR	212	14.972	26.736	37.833	1.00	15.00	A
ATOM	1908	CB	TYR	212	15.897	27.990	37.988	1.00	15.00	A
ATOM	1909	CG	TYR	212	16.992	27.620	38.971	1.00	15.00	A
ATOM	1910	CD1	TYR	212	16.764	27.768	40.332	1.00	15.00	A
ATOM	1911	CE1	TYR	212	17.740	27.382	41.248	1.00	15.00	A
ATOM	1912	CD2	TYR	212	18.200	27.079	38.517	1.00	15.00	A
ATOM	1913	CE2	TYR	212	19.179	26.710	39.428	1.00	15.00	A

71/90

ATOM	1914	CZ	TYR	212	18.938	26.861	40.787	1.00	15.00	A
ATOM	1915	OH	TYR	212	19.861	26.523	41.727	1.00	15.00	A
ATOM	1917	C	TYR	212	14.245	26.482	39.147	1.00	15.00	A
ATOM	1918	O	TYR	212	14.630	25.610	39.958	1.00	15.00	A
ATOM	1919	N	GLU	213	13.213	27.270	39.385	1.00	15.00	A
ATOM	1921	CA	GLU	213	12.401	27.205	40.602	1.00	15.00	A
ATOM	1922	CB	GLU	213	11.606	28.465	40.929	1.00	15.00	A
ATOM	1923	CG	GLU	213	10.932	28.500	42.301	1.00	15.00	A
ATOM	1924	CD	GLU	213	10.135	29.737	42.585	1.00	15.00	A
ATOM	1925	OE1	GLU	213	10.242	30.826	42.015	1.00	15.00	A
ATOM	1926	OE2	GLU	213	9.304	29.539	43.505	1.00	15.00	A
ATOM	1927	C	GLU	213	11.419	26.040	40.594	1.00	15.00	A
ATOM	1928	O	GLU	213	11.103	25.479	41.658	1.00	15.00	A
ATOM	1929	N	ALA	214	10.931	25.721	39.431	1.00	15.00	A
ATOM	1931	CA	ALA	214	9.990	24.620	39.241	1.00	15.00	A
ATOM	1932	CB	ALA	214	9.392	24.655	37.860	1.00	15.00	A
ATOM	1933	C	ALA	214	10.835	23.350	39.447	1.00	15.00	A
ATOM	1934	O	ALA	214	10.410	22.408	40.130	1.00	15.00	A
ATOM	1935	N	LYS	215	12.016	23.406	38.839	1.00	15.00	A
ATOM	1937	CA	LYS	215	12.959	22.299	38.857	1.00	15.00	A
ATOM	1938	CB	LYS	215	14.191	22.491	37.966	1.00	15.00	A
ATOM	1939	CG	LYS	215	13.875	22.588	36.500	1.00	15.00	A
ATOM	1940	CD	LYS	215	15.014	22.303	35.554	1.00	15.00	A
ATOM	1941	CE	LYS	215	14.541	22.245	34.106	1.00	15.00	A
ATOM	1942	NZ	LYS	215	15.675	22.341	33.158	1.00	15.00	A
ATOM	1946	C	LYS	215	13.419	21.868	40.233	1.00	15.00	A
ATOM	1947	O	LYS	215	13.371	20.650	40.454	1.00	15.00	A
ATOM	1948	N	TYR	216	13.865	22.800	41.048	1.00	15.00	A
ATOM	1950	CA	TYR	216	14.394	22.547	42.369	1.00	15.00	A
ATOM	1951	CB	TYR	216	15.885	23.027	42.503	1.00	15.00	A
ATOM	1952	CG	TYR	216	16.737	22.674	41.312	1.00	15.00	A
ATOM	1953	CD1	TYR	216	17.227	21.389	41.126	1.00	15.00	A
ATOM	1954	CE1	TYR	216	18.012	21.072	40.023	1.00	15.00	A
ATOM	1955	CD2	TYR	216	17.037	23.625	40.346	1.00	15.00	A
ATOM	1956	CE2	TYR	216	17.805	23.326	39.229	1.00	15.00	A
ATOM	1957	CZ	TYR	216	18.300	22.047	39.067	1.00	15.00	A
ATOM	1958	OH	TYR	216	19.047	21.755	37.963	1.00	15.00	A
ATOM	1960	C	TYR	216	13.705	23.138	43.572	1.00	15.00	A
ATOM	1961	O	TYR	216	13.900	22.513	44.646	1.00	15.00	A
ATOM	1962	N	LEU	217	13.038	24.260	43.518	1.00	15.00	A
ATOM	1964	CA	LEU	217	12.434	24.810	44.744	1.00	15.00	A
ATOM	1965	CB	LEU	217	13.271	26.002	45.191	1.00	15.00	A
ATOM	1966	CG	LEU	217	14.769	25.983	45.063	1.00	15.00	A
ATOM	1967	CD1	LEU	217	15.187	26.361	43.647	1.00	15.00	A
ATOM	1968	CD2	LEU	217	15.321	27.033	46.039	1.00	15.00	A
ATOM	1969	C	LEU	217	10.963	25.118	44.596	1.00	15.00	A
ATOM	1970	O	LEU	217	10.563	26.302	44.677	1.00	15.00	A
ATOM	1971	N	SER	218	10.180	24.089	44.397	1.00	15.00	A
ATOM	1973	CA	SER	218	8.708	24.177	44.231	1.00	15.00	A
ATOM	1974	CB	SER	218	8.361	24.809	42.914	1.00	15.00	A
ATOM	1975	OG	SER	218	6.969	24.848	42.663	1.00	15.00	A
ATOM	1977	C	SER	218	8.213	22.734	44.368	1.00	15.00	A
ATOM	1978	O	SER	218	8.770	21.865	43.678	1.00	15.00	A
ATOM	1979	N	ASP	219	7.255	22.533	45.252	1.00	15.00	A
ATOM	1981	CA	ASP	219	6.698	21.186	45.499	1.00	15.00	A
ATOM	1982	CB	ASP	219	6.679	20.853	46.980	1.00	15.00	A
ATOM	1983	CG	ASP	219	7.811	21.309	47.859	1.00	15.00	A
ATOM	1984	OD1	ASP	219	8.842	20.594	47.995	1.00	15.00	A
ATOM	1985	OD2	ASP	219	7.717	22.390	48.491	1.00	15.00	A
ATOM	1986	C	ASP	219	5.351	21.009	44.785	1.00	15.00	A
ATOM	1987	O	ASP	219	4.563	20.091	45.095	1.00	15.00	A

ATOM	1988	N	GLU	220	5.090	21.863	43.812	1.00	15.00	A
ATOM	1990	CA	GLU	220	3.897	21.854	42.999	1.00	15.00	A
ATOM	1991	CB	GLU	220	3.287	23.198	42.695	1.00	15.00	A
ATOM	1992	CG	GLU	220	4.089	24.498	42.728	1.00	15.00	A
ATOM	1993	CD	GLU	220	3.158	25.692	42.697	1.00	15.00	A
ATOM	1994	OE1	GLU	220	1.958	25.508	42.512	1.00	15.00	A
ATOM	1995	OE2	GLU	220	3.717	26.790	42.864	1.00	15.00	A
ATOM	1996	C	GLU	220	4.121	21.175	41.653	1.00	15.00	A
ATOM	1997	O	GLU	220	3.120	20.589	41.150	1.00	15.00	A
ATOM	1998	N	THR	221	5.327	21.281	41.117	1.00	15.00	A
ATOM	2000	CA	THR	221	5.439	20.631	39.814	1.00	15.00	A
ATOM	2001	CB	THR	221	6.857	20.856	39.288	1.00	15.00	A
ATOM	2002	OG1	THR	221	7.295	19.674	38.615	1.00	15.00	A
ATOM	2004	CG2	THR	221	7.810	21.144	40.453	1.00	15.00	A
ATOM	2005	C	THR	221	5.149	19.131	39.913	1.00	15.00	A
ATOM	2006	O	THR	221	5.659	18.425	40.774	1.00	15.00	A
ATOM	2007	N	GLN	222	4.269	18.654	39.011	1.00	15.00	A
ATOM	2009	CA	GLN	222	3.842	17.259	39.086	1.00	15.00	A
ATOM	2010	CB	GLN	222	2.394	17.174	38.599	1.00	15.00	A
ATOM	2011	CG	GLN	222	1.404	17.756	39.608	1.00	15.00	A
ATOM	2012	CD	GLN	222	0.428	16.683	40.028	1.00	15.00	A
ATOM	2013	OE1	GLN	222	-0.659	16.528	39.495	1.00	15.00	A
ATOM	2014	NE2	GLN	222	0.883	15.893	41.021	1.00	15.00	A
ATOM	2017	C	GLN	222	4.725	16.334	38.245	1.00	15.00	A
ATOM	2018	O	GLN	222	4.906	16.511	37.047	1.00	15.00	A
ATOM	2019	N	TYR	223	5.315	15.334	38.928	1.00	15.00	A
ATOM	2021	CA	TYR	223	6.093	14.334	38.207	1.00	15.00	A
ATOM	2022	CB	TYR	223	7.291	13.942	39.073	1.00	15.00	A
ATOM	2023	CG	TYR	223	8.130	15.140	39.338	1.00	15.00	A
ATOM	2024	CD1	TYR	223	8.988	15.615	38.352	1.00	15.00	A
ATOM	2025	CE1	TYR	223	9.699	16.788	38.554	1.00	15.00	A
ATOM	2026	CD2	TYR	223	8.000	15.841	40.538	1.00	15.00	A
ATOM	2027	CE2	TYR	223	8.715	17.012	40.741	1.00	15.00	A
ATOM	2028	CZ	TYR	223	9.553	17.490	39.751	1.00	15.00	A
ATOM	2029	OH	TYR	223	10.185	18.709	39.902	1.00	15.00	A
ATOM	2031	C	TYR	223	5.247	13.099	37.902	1.00	15.00	A
ATOM	2032	O	TYR	223	4.679	12.465	38.781	1.00	15.00	A
ATOM	2033	N	PHE	224	5.701	13.395	36.743	1.00	15.00	A
ATOM	2035	CA	PHE	224	4.816	12.259	36.460	1.00	15.00	A
ATOM	2036	CB	PHE	224	3.746	12.688	35.439	1.00	15.00	A
ATOM	2037	CG	PHE	224	2.784	13.686	36.044	1.00	15.00	A
ATOM	2038	CD1	PHE	224	2.755	15.018	35.628	1.00	15.00	A
ATOM	2039	CD2	PHE	224	1.898	13.217	37.038	1.00	15.00	A
ATOM	2040	CE1	PHE	224	1.796	15.901	36.183	1.00	15.00	A
ATOM	2041	CE2	PHE	224	0.949	14.091	37.599	1.00	15.00	A
ATOM	2042	CZ	PHE	224	0.897	15.423	37.175	1.00	15.00	A
ATOM	2043	C	PHE	224	5.492	11.062	35.829	1.00	15.00	A
ATOM	2044	O	PHE	224	5.807	11.132	34.630	1.00	15.00	A
ATOM	2045	N	CYS	225	5.658	9.971	36.649	1.00	15.00	A
ATOM	2047	CA	CYS	225	6.283	8.742	36.163	1.00	15.00	A
ATOM	2048	CB	CYS	225	7.722	8.755	36.704	1.00	15.00	A
ATOM	2049	SG	CYS	225	8.739	7.520	35.905	1.00	15.00	A
ATOM	2050	C	CYS	225	5.574	7.491	36.690	1.00	15.00	A
ATOM	2051	O	CYS	225	5.679	7.258	37.887	1.00	15.00	A
ATOM	2052	N	PRO	226	4.908	6.673	35.866	1.00	15.00	A
ATOM	2053	CD	PRO	226	4.278	5.463	36.371	1.00	15.00	A
ATOM	2054	CA	PRO	226	4.903	6.674	34.398	1.00	15.00	A
ATOM	2055	CB	PRO	226	4.171	5.361	34.078	1.00	15.00	A
ATOM	2056	CG	PRO	226	4.566	4.493	35.260	1.00	15.00	A
ATOM	2057	C	PRO	226	4.244	7.859	33.767	1.00	15.00	A
ATOM	2058	O	PRO	226	3.465	8.522	34.419	1.00	15.00	A

ATOM	2059	N	ALA	227	4.625	8.137	32.482	1.00	15.00	A
ATOM	2061	CA	ALA	227	4.231	9.470	31.978	1.00	15.00	A
ATOM	2062	CB	ALA	227	5.256	10.029	31.009	1.00	15.00	A
ATOM	2063	C	ALA	227	2.838	9.603	31.354	1.00	15.00	A
ATOM	2064	O	ALA	227	2.328	10.660	30.956	1.00	15.00	A
ATOM	2065	N	GLY	228	2.216	8.463	31.284	1.00	15.00	A
ATOM	2067	CA	GLY	228	0.880	8.449	30.699	1.00	15.00	A
ATOM	2068	C	GLY	228	0.736	8.369	29.160	1.00	15.00	A
ATOM	2069	O	GLY	228	-0.340	8.609	28.628	1.00	15.00	A
ATOM	2070	N	LEU	229	1.804	7.995	28.399	1.00	15.00	A
ATOM	2072	CA	LEU	229	1.534	7.847	26.980	1.00	15.00	A
ATOM	2073	CB	LEU	229	2.852	8.126	26.313	1.00	15.00	A
ATOM	2074	CG	LEU	229	3.517	9.469	26.657	1.00	15.00	A
ATOM	2075	CD1	LEU	229	5.045	9.323	26.470	1.00	15.00	A
ATOM	2076	CD2	LEU	229	2.900	10.519	25.721	1.00	15.00	A
ATOM	2077	C	LEU	229	1.037	6.451	26.590	1.00	15.00	A
ATOM	2078	O	LEU	229	1.280	5.553	27.373	1.00	15.00	A
ATOM	2079	N	GLU	230	0.404	6.292	25.384	1.00	15.00	A
ATOM	2081	CA	GLU	230	-0.078	5.077	24.647	1.00	15.00	A
ATOM	2082	CB	GLU	230	-0.480	5.444	23.169	1.00	15.00	A
ATOM	2083	CG	GLU	230	-1.748	4.797	22.513	1.00	15.00	A
ATOM	2084	CD	GLU	230	-2.031	5.063	21.023	1.00	15.00	A
ATOM	2085	OE1	GLU	230	-2.585	4.129	20.396	1.00	15.00	A
ATOM	2086	OE2	GLU	230	-1.775	6.167	20.493	1.00	15.00	A
ATOM	2087	C	GLU	230	0.557	3.650	24.552	1.00	15.00	A
ATOM	2088	O	GLU	230	0.113	2.820	23.738	1.00	15.00	A
ATOM	2089	N	ALA	231	1.592	3.307	25.318	1.00	15.00	A
ATOM	2091	CA	ALA	231	2.640	2.381	24.803	1.00	15.00	A
ATOM	2092	CB	ALA	231	2.176	0.918	24.865	1.00	15.00	A
ATOM	2093	C	ALA	231	3.387	2.605	23.475	1.00	15.00	A
ATOM	2094	O	ALA	231	4.615	2.511	23.420	1.00	15.00	A
ATOM	2095	N	SER	232	2.641	2.852	22.377	1.00	15.00	A
ATOM	2097	CA	SER	232	3.253	3.079	21.087	1.00	15.00	A
ATOM	2098	CB	SER	232	2.168	3.044	19.975	1.00	15.00	A
ATOM	2099	OG	SER	232	1.427	4.309	19.963	1.00	15.00	A
ATOM	2101	C	SER	232	4.029	4.413	20.941	1.00	15.00	A
ATOM	2102	O	SER	232	4.968	4.481	20.167	1.00	15.00	A
ATOM	2103	N	GLN	233	3.521	5.445	21.637	1.00	15.00	A
ATOM	2105	CA	GLN	233	4.244	6.617	22.125	1.00	15.00	A
ATOM	2106	CB	GLN	233	3.265	7.819	22.319	1.00	15.00	A
ATOM	2107	CG	GLN	233	2.423	8.305	21.073	1.00	15.00	A
ATOM	2108	CD	GLN	233	3.105	9.383	20.175	1.00	15.00	A
ATOM	2109	OE1	GLN	233	3.483	9.197	19.014	1.00	15.00	A
ATOM	2110	NE2	GLN	233	3.206	10.588	20.718	1.00	15.00	A
ATOM	2113	C	GLN	233	4.973	6.194	23.421	1.00	15.00	A
ATOM	2114	O	GLN	233	4.582	6.189	24.567	1.00	15.00	A
ATOM	2115	N	GLU	234	6.133	5.750	23.218	1.00	15.00	A
ATOM	2117	CA	GLU	234	6.876	5.264	24.387	1.00	15.00	A
ATOM	2118	CB	GLU	234	6.312	4.198	25.392	1.00	15.00	A
ATOM	2119	CG	GLU	234	6.062	4.673	26.794	1.00	15.00	A
ATOM	2120	CD	GLU	234	7.198	5.414	27.483	1.00	15.00	A
ATOM	2121	OE1	GLU	234	7.038	6.653	27.662	1.00	15.00	A
ATOM	2122	OE2	GLU	234	8.190	4.788	27.947	1.00	15.00	A
ATOM	2123	C	GLU	234	7.835	4.516	23.665	1.00	15.00	A
ATOM	2124	O	GLU	234	8.984	4.882	23.594	1.00	15.00	A
ATOM	2125	N	ALA	235	7.273	3.503	22.981	1.00	15.00	A
ATOM	2127	CA	ALA	235	8.085	2.926	21.931	1.00	15.00	A
ATOM	2128	CB	ALA	235	7.415	1.751	21.262	1.00	15.00	A
ATOM	2129	C	ALA	235	8.616	3.935	20.940	1.00	15.00	A
ATOM	2130	O	ALA	235	9.809	3.938	20.710	1.00	15.00	A
ATOM	2131	N	ASN	236	7.775	4.836	20.432	1.00	15.00	A

74/90

ATOM	2133	CA	ASN	236	8.336	5.913	19.613	1.00	15.00	A
ATOM	2134	CB	ASN	236	7.266	6.723	18.855	1.00	15.00	A
ATOM	2135	CG	ASN	236	6.832	5.971	17.595	1.00	15.00	A
ATOM	2136	OD1	ASN	236	7.231	6.205	16.456	1.00	15.00	A
ATOM	2137	ND2	ASN	236	6.053	4.945	17.876	1.00	15.00	A
ATOM	2140	C	ASN	236	9.259	6.881	20.352	1.00	15.00	A
ATOM	2141	O	ASN	236	10.251	7.290	19.794	1.00	15.00	A
ATOM	2142	N	LEU	237	8.939	7.261	21.570	1.00	15.00	A
ATOM	2144	CA	LEU	237	9.828	8.181	22.322	1.00	15.00	A
ATOM	2145	CB	LEU	237	9.064	8.525	23.622	1.00	15.00	A
ATOM	2146	CG	LEU	237	9.852	9.414	24.618	1.00	15.00	A
ATOM	2147	CD1	LEU	237	10.424	10.653	23.950	1.00	15.00	A
ATOM	2148	CD2	LEU	237	8.926	9.883	25.745	1.00	15.00	A
ATOM	2149	C	LEU	237	11.203	7.566	22.618	1.00	15.00	A
ATOM	2150	O	LEU	237	12.283	8.119	22.423	1.00	15.00	A
ATOM	2151	N	GLN	238	11.118	6.344	23.104	1.00	15.00	A
ATOM	2153	CA	GLN	238	12.350	5.643	23.472	1.00	15.00	A
ATOM	2154	CB	GLN	238	12.017	4.330	24.156	1.00	15.00	A
ATOM	2155	CG	GLN	238	11.396	4.681	25.485	1.00	15.00	A
ATOM	2156	CD	GLN	238	11.011	3.398	26.117	1.00	15.00	A
ATOM	2157	OE1	GLN	238	11.760	2.750	26.821	1.00	15.00	A
ATOM	2158	NE2	GLN	238	9.778	3.042	25.786	1.00	15.00	A
ATOM	2161	C	GLN	238	13.245	5.389	22.309	1.00	15.00	A
ATOM	2162	O	GLN	238	14.438	5.603	22.419	1.00	15.00	A
ATOM	2163	N	ALA	239	12.608	5.006	21.163	1.00	15.00	A
ATOM	2165	CA	ALA	239	13.322	5.060	19.877	1.00	15.00	A
ATOM	2166	CB	ALA	239	12.451	4.786	18.646	1.00	15.00	A
ATOM	2167	C	ALA	239	14.019	6.357	19.558	1.00	15.00	A
ATOM	2168	O	ALA	239	15.208	6.402	19.252	1.00	15.00	A
ATOM	2169	N	LEU	240	13.210	7.409	19.635	1.00	15.00	A
ATOM	2171	CA	LEU	240	13.747	8.768	19.373	1.00	15.00	A
ATOM	2172	CB	LEU	240	12.617	9.787	19.600	1.00	15.00	A
ATOM	2173	CG	LEU	240	13.047	11.263	19.405	1.00	15.00	A
ATOM	2174	CD1	LEU	240	13.729	11.419	18.059	1.00	15.00	A
ATOM	2175	CD2	LEU	240	11.852	12.218	19.523	1.00	15.00	A
ATOM	2176	C	LEU	240	14.969	9.178	20.201	1.00	15.00	A
ATOM	2177	O	LEU	240	15.955	9.713	19.721	1.00	15.00	A
ATOM	2178	N	VAL	241	14.822	8.916	21.497	1.00	15.00	A
ATOM	2180	CA	VAL	241	15.817	9.270	22.497	1.00	15.00	A
ATOM	2181	CB	VAL	241	15.195	9.117	23.898	1.00	15.00	A
ATOM	2182	CG1	VAL	241	16.222	9.251	25.037	1.00	15.00	A
ATOM	2183	CG2	VAL	241	14.142	10.248	24.125	1.00	15.00	A
ATOM	2184	C	VAL	241	17.100	8.472	22.380	1.00	15.00	A
ATOM	2185	O	VAL	241	18.207	8.995	22.418	1.00	15.00	A
ATOM	2186	N	LEU	242	16.924	7.197	22.159	1.00	15.00	A
ATOM	2188	CA	LEU	242	18.088	6.388	21.805	1.00	15.00	A
ATOM	2189	CB	LEU	242	17.739	4.934	21.523	1.00	15.00	A
ATOM	2190	CG	LEU	242	18.961	4.053	21.355	1.00	15.00	A
ATOM	2191	CD1	LEU	242	19.880	4.229	22.573	1.00	15.00	A
ATOM	2192	CD2	LEU	242	18.597	2.584	21.092	1.00	15.00	A
ATOM	2193	C	LEU	242	18.861	6.937	20.652	1.00	15.00	A
ATOM	2194	O	LEU	242	20.046	7.133	20.769	1.00	15.00	A
ATOM	2195	N	LYS	243	18.171	7.231	19.571	1.00	15.00	A
ATOM	2197	CA	LYS	243	18.943	7.827	18.466	1.00	15.00	A
ATOM	2198	CB	LYS	243	18.205	8.039	17.157	1.00	15.00	A
ATOM	2199	CG	LYS	243	17.863	6.869	16.248	1.00	15.00	A
ATOM	2200	CD	LYS	243	16.724	6.100	16.891	1.00	15.00	A
ATOM	2201	CE	LYS	243	16.800	4.581	16.720	1.00	15.00	A
ATOM	2202	NZ	LYS	243	16.233	3.889	17.894	1.00	15.00	A
ATOM	2206	C	LYS	243	19.519	9.214	18.706	1.00	15.00	A
ATOM	2207	O	LYS	243	20.631	9.513	18.288	1.00	15.00	A

75/90

ATOM	2208	N	ALA	244	18.770	10.026	19.406	1.00	15.00	A
ATOM	2210	CA	ALA	244	19.359	11.310	19.745	1.00	15.00	A
ATOM	2211	CB	ALA	244	18.343	12.140	20.504	1.00	15.00	A
ATOM	2212	C	ALA	244	20.622	11.185	20.623	1.00	15.00	A
ATOM	2213	O	ALA	244	21.608	11.885	20.434	1.00	15.00	A
ATOM	2214	N	TRP	245	20.559	10.228	21.548	1.00	15.00	A
ATOM	2216	CA	TRP	245	21.713	10.068	22.433	1.00	15.00	A
ATOM	2217	CB	TRP	245	21.411	9.027	23.496	1.00	15.00	A
ATOM	2218	CG	TRP	245	21.982	9.499	24.792	1.00	15.00	A
ATOM	2219	CD2	TRP	245	22.800	8.794	25.630	1.00	15.00	A
ATOM	2220	CE2	TRP	245	22.966	9.641	26.852	1.00	15.00	A
ATOM	2221	CE3	TRP	245	23.428	7.570	25.491	1.00	15.00	A
ATOM	2222	CD1	TRP	245	21.720	10.702	25.472	1.00	15.00	A
ATOM	2223	NE1	TRP	245	22.293	10.788	26.696	1.00	15.00	A
ATOM	2225	CZ2	TRP	245	23.817	9.194	27.866	1.00	15.00	A
ATOM	2226	CZ3	TRP	245	24.250	7.174	26.512	1.00	15.00	A
ATOM	2227	CH2	TRP	245	24.444	7.958	27.681	1.00	15.00	A
ATOM	2228	C	TRP	245	22.996	9.608	21.750	1.00	15.00	A
ATOM	2229	O	TRP	245	24.075	10.149	21.897	1.00	15.00	A
ATOM	2230	N	THR	246	22.774	8.584	20.939	1.00	15.00	A
ATOM	2232	CA	THR	246	23.786	7.962	20.097	1.00	15.00	A
ATOM	2233	CB	THR	246	23.108	6.741	19.444	1.00	15.00	A
ATOM	2234	OG1	THR	246	22.833	5.826	20.493	1.00	15.00	A
ATOM	2236	CG2	THR	246	23.921	6.002	18.381	1.00	15.00	A
ATOM	2237	C	THR	246	24.426	8.908	19.074	1.00	15.00	A
ATOM	2238	O	THR	246	25.623	8.935	18.889	1.00	15.00	A
ATOM	2239	N	THR	247	23.575	9.689	18.433	1.00	15.00	A
ATOM	2241	CA	THR	247	23.945	10.588	17.361	1.00	15.00	A
ATOM	2242	CB	THR	247	22.670	11.299	16.923	1.00	15.00	A
ATOM	2243	OG1	THR	247	21.969	10.417	16.070	1.00	15.00	A
ATOM	2245	CG2	THR	247	22.925	12.654	16.306	1.00	15.00	A
ATOM	2246	C	THR	247	24.931	11.581	17.897	1.00	15.00	A
ATOM	2247	O	THR	247	25.943	11.851	17.299	1.00	15.00	A
ATOM	2248	N	LEU	248	24.631	12.057	19.092	1.00	15.00	A
ATOM	2250	CA	LEU	248	25.509	12.973	19.822	1.00	15.00	A
ATOM	2251	CB	LEU	248	24.676	13.545	20.980	1.00	15.00	A
ATOM	2252	CG	LEU	248	24.741	15.013	21.040	1.00	15.00	A
ATOM	2253	CD1	LEU	248	24.183	15.617	19.748	1.00	15.00	A
ATOM	2254	CD2	LEU	248	24.084	15.494	22.319	1.00	15.00	A
ATOM	2255	C	LEU	248	26.770	12.378	20.395	1.00	15.00	A
ATOM	2256	O	LEU	248	27.769	13.010	20.625	1.00	15.00	A
ATOM	2257	N	GLY	249	26.690	11.073	20.592	1.00	15.00	A
ATOM	2259	CA	GLY	249	27.846	10.326	21.049	1.00	15.00	A
ATOM	2260	C	GLY	249	27.967	10.248	22.533	1.00	15.00	A
ATOM	2261	O	GLY	249	28.998	9.861	23.046	1.00	15.00	A
ATOM	2262	N	CYS	250	26.871	10.612	23.212	1.00	15.00	A
ATOM	2264	CA	CYS	250	26.807	10.471	24.671	1.00	15.00	A
ATOM	2265	CB	CYS	250	25.435	10.924	25.126	1.00	15.00	A
ATOM	2266	SG	CYS	250	25.190	12.672	24.757	1.00	15.00	A
ATOM	2267	C	CYS	250	27.019	9.045	25.129	1.00	15.00	A
ATOM	2268	O	CYS	250	26.807	8.118	24.391	1.00	15.00	A
ATOM	2269	N	LYS	251	27.502	8.918	26.366	1.00	15.00	A
ATOM	2271	CA	LYS	251	27.840	7.630	26.975	1.00	15.00	A
ATOM	2272	CB	LYS	251	29.333	7.252	26.797	1.00	15.00	A
ATOM	2273	CG	LYS	251	29.783	7.540	25.391	1.00	15.00	A
ATOM	2274	CD	LYS	251	31.251	8.027	25.304	1.00	15.00	A
ATOM	2275	CE	LYS	251	31.507	9.340	24.510	1.00	15.00	A
ATOM	2276	NZ	LYS	251	30.788	10.453	24.987	1.00	15.00	A
ATOM	2280	C	LYS	251	27.573	7.697	28.455	1.00	15.00	A
ATOM	2281	O	LYS	251	27.533	8.748	29.111	1.00	15.00	A
ATOM	2282	N	GLY	252	27.462	6.485	28.950	1.00	15.00	A

76/90

ATOM	2284	CA	GLY	252	27.333	6.256	30.388	1.00	15.00	A
ATOM	2285	C	GLY	252	25.913	6.425	30.940	1.00	15.00	A
ATOM	2286	O	GLY	252	25.217	5.482	31.293	1.00	15.00	A
ATOM	2287	N	TRP	253	25.523	7.697	31.021	1.00	15.00	A
ATOM	2289	CA	TRP	253	24.210	7.975	31.609	1.00	15.00	A
ATOM	2290	CB	TRP	253	24.100	7.682	33.150	1.00	15.00	A
ATOM	2291	CG	TRP	253	24.836	8.714	33.988	1.00	15.00	A
ATOM	2292	CD2	TRP	253	24.310	9.642	34.911	1.00	15.00	A
ATOM	2293	CE2	TRP	253	25.463	10.436	35.401	1.00	15.00	A
ATOM	2294	CE3	TRP	253	23.033	9.922	35.399	1.00	15.00	A
ATOM	2295	CD1	TRP	253	26.226	8.959	33.979	1.00	15.00	A
ATOM	2296	NE1	TRP	253	26.584	9.971	34.802	1.00	15.00	A
ATOM	2298	CZ2	TRP	253	25.271	11.429	36.371	1.00	15.00	A
ATOM	2299	CZ3	TRP	253	22.881	10.918	36.387	1.00	15.00	A
ATOM	2300	CH2	TRP	253	23.968	11.659	36.848	1.00	15.00	A
ATOM	2301	C	TRP	253	23.914	9.437	31.377	1.00	15.00	A
ATOM	2302	O	TRP	253	24.825	10.254	31.330	1.00	15.00	A
ATOM	2303	N	GLY	254	22.623	9.710	31.301	1.00	15.00	A
ATOM	2305	CA	GLY	254	22.194	11.103	31.114	1.00	15.00	A
ATOM	2306	C	GLY	254	20.697	11.200	30.895	1.00	15.00	A
ATOM	2307	O	GLY	254	20.013	10.222	31.120	1.00	15.00	A
ATOM	2308	N	ARG	255	20.209	12.387	30.432	1.00	15.00	A
ATOM	2310	CA	ARG	255	18.849	12.528	29.946	1.00	15.00	A
ATOM	2311	CB	ARG	255	18.032	13.471	30.841	1.00	15.00	A
ATOM	2312	CG	ARG	255	17.912	12.896	32.254	1.00	15.00	A
ATOM	2313	CD	ARG	255	16.659	13.390	32.951	1.00	15.00	A
ATOM	2314	NE	ARG	255	16.516	14.838	32.710	1.00	15.00	A
ATOM	2316	CZ	ARG	255	16.947	15.717	33.564	1.00	15.00	A
ATOM	2317	NH1	ARG	255	17.574	15.347	34.684	1.00	15.00	A
ATOM	2320	NH2	ARG	255	16.793	16.982	33.257	1.00	15.00	A
ATOM	2323	C	ARG	255	18.754	13.160	28.547	1.00	15.00	A
ATOM	2324	O	ARG	255	19.628	13.916	28.219	1.00	15.00	A
ATOM	2325	N	ILE	256	17.682	12.809	27.801	1.00	15.00	A
ATOM	2327	CA	ILE	256	17.259	13.596	26.662	1.00	15.00	A
ATOM	2328	CB	ILE	256	17.113	12.693	25.467	1.00	15.00	A
ATOM	2329	CG2	ILE	256	16.540	13.431	24.244	1.00	15.00	A
ATOM	2330	CG1	ILE	256	18.409	11.976	25.088	1.00	15.00	A
ATOM	2331	CD1	ILE	256	19.420	12.911	24.533	1.00	15.00	A
ATOM	2332	C	ILE	256	15.939	14.247	26.991	1.00	15.00	A
ATOM	2333	O	ILE	256	15.021	13.575	27.434	1.00	15.00	A
ATOM	2334	N	ASP	257	15.903	15.587	26.769	1.00	15.00	A
ATOM	2336	CA	ASP	257	14.634	16.312	26.951	1.00	15.00	A
ATOM	2337	CB	ASP	257	14.929	17.721	27.420	1.00	15.00	A
ATOM	2338	CG	ASP	257	15.504	17.750	28.800	1.00	15.00	A
ATOM	2339	OD1	ASP	257	15.398	16.738	29.514	1.00	15.00	A
ATOM	2340	OD2	ASP	257	16.078	18.800	29.148	1.00	15.00	A
ATOM	2341	C	ASP	257	13.851	16.476	25.648	1.00	15.00	A
ATOM	2342	O	ASP	257	14.469	16.724	24.622	1.00	15.00	A
ATOM	2343	N	VAL	258	12.497	16.331	25.722	1.00	15.00	A
ATOM	2345	CA	VAL	258	11.762	16.479	24.450	1.00	15.00	A
ATOM	2346	CB	VAL	258	11.446	15.142	23.696	1.00	15.00	A
ATOM	2347	CG1	VAL	258	12.605	14.131	23.524	1.00	15.00	A
ATOM	2348	CG2	VAL	258	10.260	14.448	24.368	1.00	15.00	A
ATOM	2349	C	VAL	258	10.479	17.199	24.770	1.00	15.00	A
ATOM	2350	O	VAL	258	10.063	17.240	25.913	1.00	15.00	A
ATOM	2351	N	MET	259	9.881	17.726	23.724	1.00	15.00	A
ATOM	2353	CA	MET	259	8.513	18.165	23.928	1.00	15.00	A
ATOM	2354	CB	MET	259	8.407	19.701	23.884	1.00	15.00	A
ATOM	2355	CG	MET	259	9.098	20.320	25.090	1.00	15.00	A
ATOM	2356	SD	MET	259	8.877	22.095	25.207	1.00	15.00	A
ATOM	2357	CE	MET	259	7.405	22.024	26.140	1.00	15.00	A

77/90

ATOM	2358	C	MET	259	7.609	17.640	22.855	1.00	15.00	A
ATOM	2359	O	MET	259	7.968	17.537	21.695	1.00	15.00	A
ATOM	2360	N	LEU	260	6.384	17.357	23.307	1.00	15.00	A
ATOM	2362	CA	LEU	260	5.293	17.201	22.335	1.00	15.00	A
ATOM	2363	CB	LEU	260	4.058	16.598	23.072	1.00	15.00	A
ATOM	2364	CG	LEU	260	3.396	15.322	22.544	1.00	15.00	A
ATOM	2365	CD1	LEU	260	4.322	14.412	21.806	1.00	15.00	A
ATOM	2366	CD2	LEU	260	2.635	14.636	23.712	1.00	15.00	A
ATOM	2367	C	LEU	260	4.870	18.526	21.774	1.00	15.00	A
ATOM	2368	O	LEU	260	4.940	19.504	22.465	1.00	15.00	A
ATOM	2369	N	ASP	261	4.357	18.562	20.533	1.00	15.00	A
ATOM	2371	CA	ASP	261	3.725	19.817	20.146	1.00	15.00	A
ATOM	2372	CB	ASP	261	4.594	20.462	19.059	1.00	15.00	A
ATOM	2373	CG	ASP	261	4.088	21.813	18.605	1.00	15.00	A
ATOM	2374	OD1	ASP	261	3.539	22.608	19.361	1.00	15.00	A
ATOM	2375	OD2	ASP	261	4.263	22.102	17.445	1.00	15.00	A
ATOM	2376	C	ASP	261	2.287	19.505	19.770	1.00	15.00	A
ATOM	2377	O	ASP	261	1.897	18.353	19.884	1.00	15.00	A
ATOM	2378	N	SER	262	1.542	20.532	19.336	1.00	15.00	A
ATOM	2380	CA	SER	262	0.114	20.317	19.151	1.00	15.00	A
ATOM	2381	CB	SER	262	-0.696	21.632	19.209	1.00	15.00	A
ATOM	2382	OG	SER	262	-0.257	22.801	18.480	1.00	15.00	A
ATOM	2384	C	SER	262	-0.304	19.321	18.072	1.00	15.00	A
ATOM	2385	O	SER	262	-1.374	18.710	18.102	1.00	15.00	A
ATOM	2386	N	ASP	263	0.650	19.064	17.161	1.00	15.00	A
ATOM	2388	CA	ASP	263	0.505	17.947	16.227	1.00	15.00	A
ATOM	2389	CB	ASP	263	1.480	18.213	15.081	1.00	15.00	A
ATOM	2390	CG	ASP	263	2.983	18.152	15.413	1.00	15.00	A
ATOM	2391	OD1	ASP	263	3.766	18.127	14.455	1.00	15.00	A
ATOM	2392	OD2	ASP	263	3.369	18.136	16.590	1.00	15.00	A
ATOM	2393	C	ASP	263	0.641	16.519	16.783	1.00	15.00	A
ATOM	2394	O	ASP	263	0.452	15.483	16.144	1.00	15.00	A
ATOM	2395	N	GLY	264	0.976	16.453	18.049	1.00	15.00	A
ATOM	2397	CA	GLY	264	1.060	15.083	18.502	1.00	15.00	A
ATOM	2398	C	GLY	264	2.396	14.403	18.361	1.00	15.00	A
ATOM	2399	O	GLY	264	2.451	13.253	18.707	1.00	15.00	A
ATOM	2400	N	GLN	265	3.404	15.142	17.813	1.00	15.00	A
ATOM	2402	CA	GLN	265	4.772	14.710	17.510	1.00	15.00	A
ATOM	2403	CB	GLN	265	5.227	15.417	16.238	1.00	15.00	A
ATOM	2404	CG	GLN	265	5.929	14.373	15.374	1.00	15.00	A
ATOM	2405	CD	GLN	265	7.258	14.818	14.766	1.00	15.00	A
ATOM	2406	OE1	GLN	265	7.398	15.646	13.813	1.00	15.00	A
ATOM	2407	NE2	GLN	265	8.231	13.983	15.276	1.00	15.00	A
ATOM	2410	C	GLN	265	5.742	15.158	18.582	1.00	15.00	A
ATOM	2411	O	GLN	265	5.503	16.186	19.202	1.00	15.00	A
ATOM	2412	N	PHE	266	6.830	14.395	18.769	1.00	15.00	A
ATOM	2414	CA	PHE	266	7.909	14.815	19.725	1.00	15.00	A
ATOM	2415	CB	PHE	266	8.600	13.576	20.343	1.00	15.00	A
ATOM	2416	CG	PHE	266	7.740	12.846	21.354	1.00	15.00	A
ATOM	2417	CD1	PHE	266	7.516	13.461	22.610	1.00	15.00	A
ATOM	2418	CD2	PHE	266	7.149	11.587	21.042	1.00	15.00	A
ATOM	2419	CE1	PHE	266	6.702	12.807	23.551	1.00	15.00	A
ATOM	2420	CE2	PHE	266	6.340	10.953	21.978	1.00	15.00	A
ATOM	2421	CZ	PHE	266	6.107	11.566	23.225	1.00	15.00	A
ATOM	2422	C	PHE	266	8.997	15.591	18.999	1.00	15.00	A
ATOM	2423	O	PHE	266	9.306	15.278	17.861	1.00	15.00	A
ATOM	2424	N	TYR	267	9.579	16.563	19.690	1.00	15.00	A
ATOM	2426	CA	TYR	267	10.670	17.365	19.159	1.00	15.00	A
ATOM	2427	CB	TYR	267	10.190	18.784	18.828	1.00	15.00	A
ATOM	2428	CG	TYR	267	9.145	18.768	17.693	1.00	15.00	A
ATOM	2429	CD1	TYR	267	9.603	18.856	16.369	1.00	15.00	A

78/90

ATOM	2430	CE1	TYR	267	8.710	18.685	15.300	1.00	15.00	A
ATOM	2431	CD2	TYR	267	7.794	18.533	17.947	1.00	15.00	A
ATOM	2432	CE2	TYR	267	6.885	18.345	16.885	1.00	15.00	A
ATOM	2433	CZ	TYR	267	7.361	18.425	15.558	1.00	15.00	A
ATOM	2434	OH	TYR	267	6.474	18.243	14.499	1.00	15.00	A
ATOM	2436	C	TYR	267	11.769	17.386	20.191	1.00	15.00	A
ATOM	2437	O	TYR	267	11.533	17.611	21.369	1.00	15.00	A
ATOM	2438	N	LEU	268	12.990	17.145	19.710	1.00	15.00	A
ATOM	2440	CA	LEU	268	14.154	17.171	20.622	1.00	15.00	A
ATOM	2441	CB	LEU	268	15.342	16.678	19.796	1.00	15.00	A
ATOM	2442	CG	LEU	268	15.234	15.185	19.536	1.00	15.00	A
ATOM	2443	CD1	LEU	268	16.307	14.747	18.569	1.00	15.00	A
ATOM	2444	CD2	LEU	268	15.329	14.349	20.818	1.00	15.00	A
ATOM	2445	C	LEU	268	14.487	18.558	21.182	1.00	15.00	A
ATOM	2446	O	LEU	268	14.603	19.524	20.451	1.00	15.00	A
ATOM	2447	N	LEU	269	14.694	18.601	22.510	1.00	15.00	A
ATOM	2449	CA	LEU	269	15.218	19.858	23.054	1.00	15.00	A
ATOM	2450	CB	LEU	269	14.528	20.185	24.383	1.00	15.00	A
ATOM	2451	CG	LEU	269	13.015	20.406	24.274	1.00	15.00	A
ATOM	2452	CD1	LEU	269	12.467	21.012	25.591	1.00	15.00	A
ATOM	2453	CD2	LEU	269	12.729	21.419	23.192	1.00	15.00	A
ATOM	2454	C	LEU	269	16.720	19.962	23.273	1.00	15.00	A
ATOM	2455	O	LEU	269	17.398	20.817	22.716	1.00	15.00	A
ATOM	2456	N	GLU	270	17.211	19.041	24.102	1.00	15.00	A
ATOM	2458	CA	GLU	270	18.656	18.980	24.350	1.00	15.00	A
ATOM	2459	CB	GLU	270	19.057	20.169	25.237	1.00	15.00	A
ATOM	2460	CG	GLU	270	18.364	20.077	26.606	1.00	15.00	A
ATOM	2461	CD	GLU	270	17.239	21.064	26.772	1.00	15.00	A
ATOM	2462	OE1	GLU	270	17.224	22.166	26.207	1.00	15.00	A
ATOM	2463	OE2	GLU	270	16.389	20.733	27.609	1.00	15.00	A
ATOM	2464	C	GLU	270	19.042	17.685	25.063	1.00	15.00	A
ATOM	2465	O	GLU	270	18.221	16.906	25.499	1.00	15.00	A
ATOM	2466	N	ALA	271	20.337	17.518	25.251	1.00	15.00	A
ATOM	2468	CA	ALA	271	20.758	16.379	26.053	1.00	15.00	A
ATOM	2469	CB	ALA	271	21.742	15.559	25.203	1.00	15.00	A
ATOM	2470	C	ALA	271	21.415	16.941	27.301	1.00	15.00	A
ATOM	2471	O	ALA	271	22.000	18.016	27.263	1.00	15.00	A
ATOM	2472	N	ASN	272	21.241	16.224	28.399	1.00	15.00	A
ATOM	2474	CA	ASN	272	21.824	16.640	29.669	1.00	15.00	A
ATOM	2475	CB	ASN	272	20.671	16.789	30.659	1.00	15.00	A
ATOM	2476	CG	ASN	272	21.074	17.160	32.099	1.00	15.00	A
ATOM	2477	OD1	ASN	272	20.227	17.565	32.903	1.00	15.00	A
ATOM	2478	ND2	ASN	272	22.357	17.026	32.428	1.00	15.00	A
ATOM	2481	C	ASN	272	22.769	15.528	30.065	1.00	15.00	A
ATOM	2482	O	ASN	272	22.375	14.382	30.248	1.00	15.00	A
ATOM	2483	N	THR	273	24.040	15.930	30.162	1.00	15.00	A
ATOM	2485	CA	THR	273	25.070	14.919	30.428	1.00	15.00	A
ATOM	2486	CB	THR	273	26.301	15.126	29.533	1.00	15.00	A
ATOM	2487	OG1	THR	273	26.922	16.388	29.773	1.00	15.00	A
ATOM	2489	CG2	THR	273	25.982	14.958	28.036	1.00	15.00	A
ATOM	2490	C	THR	273	25.554	14.864	31.848	1.00	15.00	A
ATOM	2491	O	THR	273	26.459	14.098	32.196	1.00	15.00	A
ATOM	2492	N	SER	274	24.956	15.717	32.674	1.00	15.00	A
ATOM	2494	CA	SER	274	25.226	15.659	34.141	1.00	15.00	A
ATOM	2495	CB	SER	274	26.372	16.632	34.532	1.00	15.00	A
ATOM	2496	OG	SER	274	27.007	16.254	35.755	1.00	15.00	A
ATOM	2498	C	SER	274	23.985	15.988	34.982	1.00	15.00	A
ATOM	2499	O	SER	274	23.899	17.034	35.586	1.00	15.00	A
ATOM	2500	N	PRO	275	23.034	15.074	34.988	1.00	15.00	A
ATOM	2501	CD	PRO	275	23.007	13.807	34.276	1.00	15.00	A
ATOM	2502	CA	PRO	275	21.776	15.354	35.721	1.00	15.00	A

79/90

ATOM	2503	CB	PRO	275	20.920	14.194	35.290	1.00	15.00	A
ATOM	2504	CG	PRO	275	21.500	13.652	33.969	1.00	15.00	A
ATOM	2505	C	PRO	275	21.964	15.394	37.237	1.00	15.00	A
ATOM	2506	O	PRO	275	22.957	14.950	37.792	1.00	15.00	A
ATOM	2507	N	GLY	276	20.940	15.976	37.903	1.00	15.00	A
ATOM	2509	CA	GLY	276	21.068	16.052	39.365	1.00	15.00	A
ATOM	2510	C	GLY	276	20.804	14.686	39.975	1.00	15.00	A
ATOM	2511	O	GLY	276	20.125	13.862	39.413	1.00	15.00	A
ATOM	2512	N	MET	277	21.364	14.464	41.125	1.00	15.00	A
ATOM	2514	CA	MET	277	21.237	13.133	41.736	1.00	15.00	A
ATOM	2515	CB	MET	277	22.543	12.359	41.558	1.00	15.00	A
ATOM	2516	CG	MET	277	22.826	11.931	40.123	1.00	15.00	A
ATOM	2517	SD	MET	277	21.623	10.709	39.598	1.00	15.00	A
ATOM	2518	CE	MET	277	22.486	9.202	40.102	1.00	15.00	A
ATOM	2519	C	MET	277	20.966	13.281	43.218	1.00	15.00	A
ATOM	2520	O	MET	277	21.522	12.560	44.048	1.00	15.00	A
ATOM	2521	N	THR	278	20.094	14.239	43.476	1.00	15.00	A
ATOM	2523	CA	THR	278	19.350	14.318	44.721	1.00	15.00	A
ATOM	2524	CB	THR	278	18.981	15.766	45.059	1.00	15.00	A
ATOM	2525	CG1	THR	278	17.756	16.194	44.426	1.00	15.00	A
ATOM	2527	CG2	THR	278	20.138	16.678	44.623	1.00	15.00	A
ATOM	2528	C	THR	278	18.129	13.394	44.756	1.00	15.00	A
ATOM	2529	O	THR	278	17.668	12.759	43.814	1.00	15.00	A
ATOM	2530	N	SER	279	17.579	13.434	45.952	1.00	15.00	A
ATOM	2532	CA	SER	279	16.427	12.609	46.214	1.00	15.00	A
ATOM	2533	CB	SER	279	16.313	12.701	47.748	1.00	15.00	A
ATOM	2534	CG	SER	279	17.596	12.167	48.243	1.00	15.00	A
ATOM	2536	C	SER	279	15.163	12.943	45.443	1.00	15.00	A
ATOM	2537	O	SER	279	14.196	12.206	45.403	1.00	15.00	A
ATOM	2538	N	HIS	280	15.176	14.117	44.860	1.00	15.00	A
ATOM	2540	CA	HIS	280	13.963	14.402	44.155	1.00	15.00	A
ATOM	2541	CB	HIS	280	13.462	15.704	44.680	1.00	15.00	A
ATOM	2542	CG	HIS	280	12.322	15.384	45.555	1.00	15.00	A
ATOM	2543	ND1	HIS	280	12.308	15.690	46.883	1.00	15.00	A
ATOM	2545	CD2	HIS	280	11.080	14.891	45.143	1.00	15.00	A
ATOM	2546	NE2	HIS	280	10.288	14.938	46.237	1.00	15.00	A
ATOM	2547	CE1	HIS	280	11.024	15.429	47.300	1.00	15.00	A
ATOM	2548	C	HIS	280	14.191	14.540	42.712	1.00	15.00	A
ATOM	2549	O	HIS	280	13.320	14.997	41.981	1.00	15.00	A
ATOM	2550	N	SER	281	15.417	14.199	42.339	1.00	15.00	A
ATOM	2552	CA	SER	281	15.820	14.364	40.944	1.00	15.00	A
ATOM	2553	CB	SER	281	17.334	14.299	40.787	1.00	15.00	A
ATOM	2554	CG	SER	281	18.010	15.236	41.603	1.00	15.00	A
ATOM	2556	C	SER	281	15.222	13.315	40.044	1.00	15.00	A
ATOM	2557	O	SER	281	14.824	12.223	40.430	1.00	15.00	A
ATOM	2558	N	LEU	282	15.187	13.715	38.775	1.00	15.00	A
ATOM	2560	CA	LEU	282	14.582	12.963	37.682	1.00	15.00	A
ATOM	2561	CB	LEU	282	14.610	13.778	36.375	1.00	15.00	A
ATOM	2562	CG	LEU	282	13.753	15.052	36.294	1.00	15.00	A
ATOM	2563	CD1	LEU	282	12.313	14.818	36.734	1.00	15.00	A
ATOM	2564	CD2	LEU	282	14.344	16.196	37.120	1.00	15.00	A
ATOM	2565	C	LEU	282	15.210	11.629	37.364	1.00	15.00	A
ATOM	2566	O	LEU	282	14.507	10.660	37.219	1.00	15.00	A
ATOM	2567	N	VAL	283	16.563	11.614	37.243	1.00	15.00	A
ATOM	2569	CA	VAL	283	17.055	10.243	36.999	1.00	15.00	A
ATOM	2570	CB	VAL	283	18.550	10.206	36.585	1.00	15.00	A
ATOM	2571	CG1	VAL	283	19.073	8.785	36.371	1.00	15.00	A
ATOM	2572	CG2	VAL	283	18.754	11.030	35.336	1.00	15.00	A
ATOM	2573	C	VAL	283	16.747	9.249	38.154	1.00	15.00	A
ATOM	2574	O	VAL	283	16.263	8.172	37.874	1.00	15.00	A
ATOM	2575	N	PRO	284	16.991	9.618	39.436	1.00	15.00	A

80/90

ATOM	2576	CD	PRO	284	17.784	10.705	40.000	1.00	15.00	A
ATOM	2577	CA	PRO	284	16.545	8.692	40.478	1.00	15.00	A
ATOM	2578	CB	PRO	284	16.841	9.400	41.802	1.00	15.00	A
ATOM	2579	CG	PRO	284	18.107	10.197	41.415	1.00	15.00	A
ATOM	2580	C	PRO	284	15.115	8.240	40.379	1.00	15.00	A
ATOM	2581	O	PRO	284	14.825	7.087	40.557	1.00	15.00	A
ATOM	2582	N	MET	285	14.218	9.173	40.047	1.00	15.00	A
ATOM	2584	CA	MET	285	12.801	8.789	39.927	1.00	15.00	A
ATOM	2585	CB	MET	285	11.997	10.043	39.679	1.00	15.00	A
ATOM	2586	CG	MET	285	10.505	9.811	39.428	1.00	15.00	A
ATOM	2587	SD	MET	285	9.697	11.357	38.974	1.00	15.00	A
ATOM	2588	CE	MET	285	9.616	11.982	40.668	1.00	15.00	A
ATOM	2589	C	MET	285	12.527	7.736	38.842	1.00	15.00	A
ATOM	2590	O	MET	285	11.756	6.803	38.986	1.00	15.00	A
ATOM	2591	N	ALA	286	13.263	7.933	37.733	1.00	15.00	A
ATOM	2593	CA	ALA	286	13.147	7.010	36.616	1.00	15.00	A
ATOM	2594	CB	ALA	286	13.836	7.601	35.379	1.00	15.00	A
ATOM	2595	C	ALA	286	13.748	5.680	37.014	1.00	15.00	A
ATOM	2596	O	ALA	286	13.160	4.655	36.822	1.00	15.00	A
ATOM	2597	N	ALA	287	14.911	5.748	37.637	1.00	15.00	A
ATOM	2599	CA	ALA	287	15.586	4.513	38.046	1.00	15.00	A
ATOM	2600	CB	ALA	287	16.953	4.884	38.642	1.00	15.00	A
ATOM	2601	C	ALA	287	14.790	3.658	39.021	1.00	15.00	A
ATOM	2602	O	ALA	287	14.696	2.432	38.933	1.00	15.00	A
ATOM	2603	N	ARG	288	14.154	4.394	39.933	1.00	15.00	A
ATOM	2605	CA	ARG	288	13.257	3.763	40.914	1.00	15.00	A
ATOM	2606	CB	ARG	288	12.578	4.806	41.808	1.00	15.00	A
ATOM	2607	CG	ARG	288	13.449	5.341	42.997	1.00	15.00	A
ATOM	2608	CD	ARG	288	12.863	6.623	43.697	1.00	15.00	A
ATOM	2609	NE	ARG	288	11.474	6.441	44.130	1.00	15.00	A
ATOM	2611	CZ	ARG	288	10.941	7.065	45.188	1.00	15.00	A
ATOM	2612	NH1	ARG	288	11.460	8.190	45.700	1.00	15.00	A
ATOM	2615	NH2	ARG	288	9.901	6.509	45.826	1.00	15.00	A
ATOM	2618	C	ARG	288	12.140	2.974	40.281	1.00	15.00	A
ATOM	2619	O	ARG	288	12.000	1.770	40.469	1.00	15.00	A
ATOM	2620	N	GLN	289	11.383	3.738	39.472	1.00	15.00	A
ATOM	2622	CA	GLN	289	10.343	3.155	38.601	1.00	15.00	A
ATOM	2623	CB	GLN	289	9.681	4.251	37.752	1.00	15.00	A
ATOM	2624	CG	GLN	289	8.474	3.841	36.885	1.00	15.00	A
ATOM	2625	CD	GLN	289	7.251	3.441	37.689	1.00	15.00	A
ATOM	2626	OE1	GLN	289	6.421	2.632	37.282	1.00	15.00	A
ATOM	2627	NE2	GLN	289	7.108	4.070	38.810	1.00	15.00	A
ATOM	2630	C	GLN	289	10.797	1.981	37.765	1.00	15.00	A
ATOM	2631	O	GLN	289	10.036	1.058	37.531	1.00	15.00	A
ATOM	2632	N	ALA	290	12.057	2.005	37.353	1.00	15.00	A
ATOM	2634	CA	ALA	290	12.603	0.833	36.607	1.00	15.00	A
ATOM	2635	CB	ALA	290	13.883	1.178	35.847	1.00	15.00	A
ATOM	2636	C	ALA	290	12.975	-0.361	37.466	1.00	15.00	A
ATOM	2637	O	ALA	290	13.459	-1.365	36.967	1.00	15.00	A
ATOM	2638	N	GLY	291	12.795	-0.196	38.788	1.00	15.00	A
ATOM	2640	CA	GLY	291	13.192	-1.311	39.651	1.00	15.00	A
ATOM	2641	C	GLY	291	14.641	-1.408	40.131	1.00	15.00	A
ATOM	2642	O	GLY	291	15.165	-2.498	40.272	1.00	15.00	A
ATOM	2643	N	MET	292	15.291	-0.262	40.357	1.00	15.00	A
ATOM	2645	CA	MET	292	16.600	-0.255	41.059	1.00	15.00	A
ATOM	2646	CB	MET	292	17.850	-0.096	40.166	1.00	15.00	A
ATOM	2647	CG	MET	292	17.935	1.116	39.233	1.00	15.00	A
ATOM	2648	SD	MET	292	19.309	1.091	37.965	1.00	15.00	A
ATOM	2649	CE	MET	292	18.465	0.354	36.603	1.00	15.00	A
ATOM	2650	C	MET	292	16.707	0.847	42.076	1.00	15.00	A
ATOM	2651	O	MET	292	16.202	1.934	41.905	1.00	15.00	A

ATOM	2652	N	SER	293	17.457	0.502	43.114	1.00	15.00	A
ATOM	2654	CA	SER	293	17.684	1.504	44.133	1.00	15.00	A
ATOM	2655	CB	SER	293	18.285	0.864	45.373	1.00	15.00	A
ATOM	2656	OG	SER	293	19.590	0.378	45.118	1.00	15.00	A
ATOM	2658	C	SER	293	18.634	2.607	43.666	1.00	15.00	A
ATOM	2659	O	SER	293	19.331	2.521	42.670	1.00	15.00	A
ATOM	2660	N	PHE	294	18.639	3.629	44.494	1.00	15.00	A
ATOM	2662	CA	PHE	294	19.586	4.705	44.257	1.00	15.00	A
ATOM	2663	CB	PHE	294	19.372	5.786	45.302	1.00	15.00	A
ATOM	2664	CG	PHE	294	20.231	6.950	44.906	1.00	15.00	A
ATOM	2665	CD1	PHE	294	21.431	7.167	45.618	1.00	15.00	A
ATOM	2666	CD2	PHE	294	19.824	7.836	43.873	1.00	15.00	A
ATOM	2667	CE1	PHE	294	22.284	8.261	45.289	1.00	15.00	A
ATOM	2668	CE2	PHE	294	20.654	8.935	43.567	1.00	15.00	A
ATOM	2669	CZ	PHE	294	21.865	9.144	44.268	1.00	15.00	A
ATOM	2670	C	PHE	294	21.027	4.235	44.246	1.00	15.00	A
ATOM	2671	O	PHE	294	21.812	4.530	43.368	1.00	15.00	A
ATOM	2672	N	SER	295	21.348	3.471	45.276	1.00	15.00	A
ATOM	2674	CA	SER	295	22.677	2.885	45.361	1.00	15.00	A
ATOM	2675	CB	SER	295	22.616	2.051	46.641	1.00	15.00	A
ATOM	2676	OG	SER	295	23.869	1.504	46.890	1.00	15.00	A
ATOM	2678	C	SER	295	23.063	2.051	44.086	1.00	15.00	A
ATOM	2679	O	SER	295	24.132	2.195	43.508	1.00	15.00	A
ATOM	2680	N	GLN	296	22.100	1.232	43.652	1.00	15.00	A
ATOM	2682	CA	GLN	296	22.377	0.455	42.434	1.00	15.00	A
ATOM	2683	CB	GLN	296	21.370	-0.650	42.135	1.00	15.00	A
ATOM	2684	CG	GLN	296	22.222	-1.623	41.297	1.00	15.00	A
ATOM	2685	CD	GLN	296	23.167	-2.376	42.272	1.00	15.00	A
ATOM	2686	OE1	GLN	296	23.647	-2.058	43.410	1.00	15.00	A
ATOM	2687	NE2	GLN	296	23.208	-3.588	41.744	1.00	15.00	A
ATOM	2690	C	GLN	296	22.614	1.286	41.175	1.00	15.00	A
ATOM	2691	O	GLN	296	23.549	1.045	40.434	1.00	15.00	A
ATOM	2692	N	LEU	297	21.821	2.342	41.083	1.00	15.00	A
ATOM	2694	CA	LEU	297	22.027	3.350	40.045	1.00	15.00	A
ATOM	2695	CB	LEU	297	21.005	4.475	40.262	1.00	15.00	A
ATOM	2696	CG	LEU	297	21.178	5.673	39.325	1.00	15.00	A
ATOM	2697	CD1	LEU	297	20.910	5.290	37.852	1.00	15.00	A
ATOM	2698	CD2	LEU	297	20.151	6.697	39.771	1.00	15.00	A
ATOM	2699	C	LEU	297	23.453	3.923	39.978	1.00	15.00	A
ATOM	2700	O	LEU	297	24.076	3.874	38.930	1.00	15.00	A
ATOM	2701	N	VAL	298	23.917	4.436	41.140	1.00	15.00	A
ATOM	2703	CA	VAL	298	25.238	5.040	41.106	1.00	15.00	A
ATOM	2704	CB	VAL	298	25.491	5.970	42.337	1.00	15.00	A
ATOM	2705	CG1	VAL	298	24.512	7.144	42.197	1.00	15.00	A
ATOM	2706	CG2	VAL	298	25.198	5.330	43.676	1.00	15.00	A
ATOM	2707	C	VAL	298	26.353	4.033	40.919	1.00	15.00	A
ATOM	2708	O	VAL	298	27.329	4.318	40.263	1.00	15.00	A
ATOM	2709	N	VAL	299	26.165	2.844	41.509	1.00	15.00	A
ATOM	2711	CA	VAL	299	27.093	1.762	41.247	1.00	15.00	A
ATOM	2712	CB	VAL	299	26.673	0.571	42.100	1.00	15.00	A
ATOM	2713	CG1	VAL	299	27.360	-0.694	41.650	1.00	15.00	A
ATOM	2714	CG2	VAL	299	26.835	0.905	43.584	1.00	15.00	A
ATOM	2715	C	VAL	299	27.146	1.385	39.758	1.00	15.00	A
ATOM	2716	O	VAL	299	28.204	1.197	39.203	1.00	15.00	A
ATOM	2717	N	ARG	300	25.982	1.326	39.116	1.00	15.00	A
ATOM	2719	CA	ARG	300	25.963	1.066	37.647	1.00	15.00	A
ATOM	2720	CB	ARG	300	24.510	0.921	37.181	1.00	15.00	A
ATOM	2721	CG	ARG	300	24.310	0.620	35.691	1.00	15.00	A
ATOM	2722	CD	ARG	300	25.040	-0.642	35.177	1.00	15.00	A
ATOM	2723	NE	ARG	300	24.655	-0.982	33.800	1.00	15.00	A
ATOM	2725	CZ	ARG	300	25.445	-1.685	32.915	1.00	15.00	A

82/90

ATOM	2726	NH1	ARG	300	26.708	-2.126	33.170	1.00	15.00	A
ATOM	2729	NH2	ARG	300	24.993	-1.901	31.694	1.00	15.00	A
ATOM	2732	C	ARG	300	26.650	2.146	36.808	1.00	15.00	A
ATOM	2733	O	ARG	300	27.493	1.894	35.943	1.00	15.00	A
ATOM	2734	N	ILE	301	26.248	3.376	37.135	1.00	15.00	A
ATOM	2736	CA	ILE	301	26.961	4.508	36.508	1.00	15.00	A
ATOM	2737	CB	ILE	301	26.437	5.829	37.106	1.00	15.00	A
ATOM	2738	CG2	ILE	301	27.346	7.039	36.860	1.00	15.00	A
ATOM	2739	CG1	ILE	301	24.998	6.121	36.636	1.00	15.00	A
ATOM	2740	CD1	ILE	301	24.377	7.216	37.467	1.00	15.00	A
ATOM	2741	C	ILE	301	28.495	4.416	36.600	1.00	15.00	A
ATOM	2742	O	ILE	301	29.193	4.599	35.610	1.00	15.00	A
ATOM	2743	N	LEU	302	28.966	4.064	37.784	1.00	15.00	A
ATOM	2745	CA	LEU	302	30.407	3.890	38.020	1.00	15.00	A
ATOM	2746	CB	LEU	302	30.674	3.712	39.501	1.00	15.00	A
ATOM	2747	CG	LEU	302	32.176	3.548	39.864	1.00	15.00	A
ATOM	2748	CD1	LEU	302	33.062	4.753	39.496	1.00	15.00	A
ATOM	2749	CD2	LEU	302	32.223	3.282	41.383	1.00	15.00	A
ATOM	2750	C	LEU	302	31.055	2.747	37.262	1.00	15.00	A
ATOM	2751	O	LEU	302	32.150	2.835	36.709	1.00	15.00	A
ATOM	2752	N	GLU	303	30.257	1.665	37.221	1.00	15.00	A
ATOM	2754	CA	GLU	303	30.608	0.497	36.416	1.00	15.00	A
ATOM	2755	CB	GLU	303	29.514	-0.616	36.528	1.00	15.00	A
ATOM	2756	CG	GLU	303	29.937	-1.876	35.744	1.00	15.00	A
ATOM	2757	CD	GLU	303	28.812	-2.934	35.594	1.00	15.00	A
ATOM	2758	OE1	GLU	303	27.620	-2.594	35.701	1.00	15.00	A
ATOM	2759	OE2	GLU	303	29.127	-4.075	35.285	1.00	15.00	A
ATOM	2760	C	GLU	303	30.830	0.845	34.953	1.00	15.00	A
ATOM	2761	O	GLU	303	31.751	0.373	34.306	1.00	15.00	A
ATOM	2762	N	LEU	304	29.945	1.708	34.480	1.00	15.00	A
ATOM	2764	CA	LEU	304	29.976	2.047	33.051	1.00	15.00	A
ATOM	2765	CB	LEU	304	28.727	2.818	32.674	1.00	15.00	A
ATOM	2766	CG	LEU	304	27.500	1.931	32.447	1.00	15.00	A
ATOM	2767	CD1	LEU	304	26.265	2.803	32.449	1.00	15.00	A
ATOM	2768	CD2	LEU	304	27.633	1.106	31.145	1.00	15.00	A
ATOM	2769	C	LEU	304	31.157	2.934	32.672	1.00	15.00	A
ATOM	2770	O	LEU	304	31.424	3.149	31.500	1.00	15.00	A
ATOM	2771	N	ALA	305	31.831	3.450	33.701	1.00	15.00	A
ATOM	2773	CA	ALA	305	33.007	4.264	33.353	1.00	15.00	A
ATOM	2774	CB	ALA	305	33.688	4.917	34.531	1.00	15.00	A
ATOM	2775	C	ALA	305	34.085	3.426	32.731	1.00	15.00	A
ATOM	2776	O	ALA	305	34.182	2.231	32.913	1.00	15.00	A
ATOM	2777	N	ASP	306	34.892	4.139	31.994	1.00	15.00	A
ATOM	2779	CA	ASP	306	35.198	3.573	30.699	1.00	15.00	A
ATOM	2780	CB	ASP	306	34.571	4.439	29.641	1.00	15.00	A
ATOM	2781	CG	ASP	306	34.851	5.934	29.847	1.00	15.00	A
ATOM	2782	OD1	ASP	306	33.907	6.618	29.504	1.00	15.00	A
ATOM	2783	OD2	ASP	306	35.912	6.389	30.402	1.00	15.00	A
ATOM	2784	C	ASP	306	36.648	3.293	30.314	1.00	15.00	A
ATOM	2785	OCT1	ASP	306	37.582	3.631	31.053	1.00	15.00	A
ATOM	2786	OCT2	ASP	306	36.824	2.704	29.225	1.00	15.00	A
ATOM	5573	PG	PNP	800	19.257	23.402	29.595	1.00	15.00	C
ATOM	5574	O1G	PNP	800	20.835	23.214	29.763	1.00	15.00	C
ATOM	5575	O2G	PNP	800	18.877	22.338	28.530	1.00	15.00	C
ATOM	5576	O3G	PNP	800	18.871	24.793	29.327	1.00	15.00	C
ATOM	5577	PB	PNP	800	16.762	23.381	30.326	1.00	15.00	C
ATOM	5578	O1B	PNP	800	16.089	22.063	30.421	1.00	15.00	C
ATOM	5579	O2B	PNP	800	16.190	24.326	31.407	1.00	15.00	C
ATOM	5580	N	PNP	800	18.294	23.018	30.821	1.00	15.00	C
ATOM	5581	P1	PNP	800	16.068	25.041	27.784	1.00	15.00	C
ATOM	5582	O1	PNP	800	16.688	26.458	28.116	1.00	15.00	C

83/90

ATOM	5583	O2	PNP	800	16.199	24.810	26.349	1.00	15.00	C
ATOM	5584	O3	PNP	800	16.703	23.886	28.722	1.00	15.00	C
ATOM	5585	O4	PNP	800	14.576	25.203	28.159	1.00	15.00	C
ATOM	5586	C1	PNP	800	14.194	25.686	29.475	1.00	15.00	C
ATOM	5587	C3	PNP	800	12.758	25.252	29.592	1.00	15.00	C
ATOM	5588	O5	PNP	800	11.954	26.013	28.686	1.00	15.00	C
ATOM	5589	C7	PNP	800	12.645	23.836	29.008	1.00	15.00	C
ATOM	5590	O6	PNP	800	13.037	22.867	29.959	1.00	15.00	C
ATOM	5591	C9	PNP	800	11.185	23.780	28.565	1.00	15.00	C
ATOM	5592	O7	PNP	800	10.301	23.772	29.671	1.00	15.00	C
ATOM	5593	C10	PNP	800	11.113	25.139	27.946	1.00	15.00	C
ATOM	5594	N2	PNP	800	11.258	25.284	26.529	1.00	15.00	C
ATOM	5595	C11	PNP	800	12.489	25.304	25.911	1.00	15.00	C
ATOM	5596	N4	PNP	800	12.279	25.434	24.583	1.00	15.00	C
ATOM	5597	C12	PNP	800	10.925	25.508	24.379	1.00	15.00	C
ATOM	5598	C13	PNP	800	10.104	25.685	23.287	1.00	15.00	C
ATOM	5599	N5	PNP	800	10.642	25.799	22.096	1.00	15.00	C
ATOM	5600	N8	PNP	800	8.788	25.740	23.482	1.00	15.00	C
ATOM	5601	C14	PNP	800	8.209	25.619	24.680	1.00	15.00	C
ATOM	5602	N10	PNP	800	8.895	25.452	25.826	1.00	15.00	C
ATOM	5603	C15	PNP	800	10.260	25.395	25.649	1.00	15.00	C

END

83/90

ATOM	5583	O2	PNP	800	16.199	24.810	26.349	1.00	15.00	C
ATOM	5584	O3	PNP	800	16.703	23.886	28.722	1.00	15.00	C
ATOM	5585	O4	PNP	800	14.576	25.203	28.159	1.00	15.00	C
ATOM	5586	C1	PNP	800	14.194	25.686	29.475	1.00	15.00	C
ATOM	5587	C3	PNP	800	12.758	25.252	29.592	1.00	15.00	C
ATOM	5588	O5	PNP	800	11.954	26.013	28.686	1.00	15.00	C
ATOM	5589	C7	PNP	800	12.645	23.836	29.008	1.00	15.00	C
ATOM	5590	O6	PNP	800	13.037	22.867	29.959	1.00	15.00	C
ATOM	5591	C9	PNP	800	11.185	23.780	28.565	1.00	15.00	C
ATOM	5592	O7	PNP	800	10.301	23.772	29.671	1.00	15.00	C
ATOM	5593	C10	PNP	800	11.113	25.139	27.946	1.00	15.00	C
ATOM	5594	N2	PNP	800	11.258	25.284	26.529	1.00	15.00	C
ATOM	5595	C11	PNP	800	12.489	25.304	25.911	1.00	15.00	C
ATOM	5596	N4	PNP	800	12.279	25.434	24.583	1.00	15.00	C
ATOM	5597	C12	PNP	800	10.925	25.508	24.379	1.00	15.00	C
ATOM	5598	C13	PNP	800	10.104	25.685	23.287	1.00	15.00	C
ATOM	5599	N5	PNP	800	10.642	25.799	22.096	1.00	15.00	C
ATOM	5600	N8	PNP	800	8.788	25.740	23.482	1.00	15.00	C
ATOM	5601	C14	PNP	800	8.209	25.619	24.680	1.00	15.00	C
ATOM	5602	N10	PNP	800	8.895	25.452	25.826	1.00	15.00	C
ATOM	5603	C15	PNP	800	10.260	25.395	25.649	1.00	15.00	C

END

FIG. 10

Contact Code: a -- with ATP; i -- with phosphinate inhibitor; m -- with 1st Mg; n -- with 2nd Mg

Contacts:

E151. .V181

00 ECOLI DDLB	-----TDKIAVLLGGTSAEREVSLNSGAAVLAGLREG-----	-----GIDAYPVDPK-----
01A CHLPH DDL	-----PKKLSIGLVCGGKSCHEHDSLLSAQHVSKEYLSP-----	-----FYDVSYPFINRQG-----
01B CHLTR DDL	-----QKHLGLICGGKSCHEHDSVLSAQNIAKHLKSK-----	-----FYDVSYPFINRQG-----
02 YERPES DDL	-----EKVAVLLGGTSAEREVSLNSQAVLAGLKEA-----	-----GIDAYGVDTK-----
03 HAEM DDL	-----MNLKQEKIAVLLGGTSAEREVSLNSGKAVLEALLKQ-----	-----GINAHPIDPK-----
04 HAEDUC DDL	-----EKIAVLYGGTSAEREVSLNSGAAVTEALKSL-----	-----GYNVEGIDTK-----
05 PSEUDA E DDL	-----MNLCLDSLLNGTQDPKAFGRVAVLFGGKSAEREVSLNSGAMVLSLAA-----	-----GVDVPGIDVG-----
06 PSEUPUT DDL	-----RVAVLYGGKSAEREVSLNSGAVIDALSTA-----	-----GVDVVAIDVG-----
07 XYLFAS DDL	-----MAMSI FSLSPRYTDPVAVLGGTSAEREVSLNSGRNVLELVLR-----	-----GVDVQSDVVG-----
08 BORPER DDL	-----FVGVLYGGKSAEREVSLNSGKGVHEALLSA-----	-----GVDHLLDTQ-----
09 THIFER DDL	-----FIAVLYGGTSAEREVSLNSGHAVLQTLQGL-----	-----GMDVGVDTQ-----
10 NEISMA DDL	-----MQNFGKVAVLMGGFSSEREISLDSGTAILNALKSK-----	-----GIDAYAFDPK-----
11 NEISM E DDL	-----MQNFGKVAVLMGGFSSEREISLDSGTAILNALKSK-----	-----GIDAYAFDPK-----
12 NEISGN DDL	-----KVAVLMGGFSSEREISLDSGTAILNALKSK-----	-----GIDAYAFDPK-----
13 BUCAP DDL	-----MK-----	-----GYNVAIDTR-----
14 BACHAL DDL	-----MKIAVLYGGTSAEREVSLNSGKGIHEALKAN-----	-----GHEVIGIDFH-----
15 GEOSUL DDL	-----TTKIGVLMGGLSAEREVSLNSGAVLQALQSR-----	-----GIDAVPVDVG-----
16 RICPR DDL	MHKYQTFEVEHVVKILSSTGKCHIALVAGGMSAEREVSLNSAGVSKALIKL-----	-----GYKVPVDMGA-----
17 FMOB DDL	-----MSDKRHVVVLMGGSSEREISLDSGRHVKALKEA-----	-----GIRVLLDMR-----
18 AQUABO DDL	-----MRVVLMGGSSEREISLDSGTAKALREL-----	-----GHEVYELDLK-----
19 THEMA DDL	-----MRVALLMGGSSEREISLDSGERVKKALEKL-----	-----GHEVYVDFRE-----
20 CLOSDIP DDL	-----KIAVIMGGISSEREVSLNSGKVIYNNLDKN-----	-----KIEVVKVIIDD-----
21 ENTFCM VANA	-----MNRKVAVLLFGGKSEEHDSVLSAIEIAANINKE-----	-----KYEPLYIGITKSG-----
22 ENTFCM VAMB	-----MNRKVAVLLFGGKSEEHDSVLSAIEIAANINTE-----	-----KFDPHYIGITKSG-----
23 ENTFCM VAND	-----MNRKVAVLLFGGKSEEHDSVLSAIEIAANIDTK-----	-----KYQPHYIGITKSG-----
24 STRPROY DDL	-----MARLKI GIVFGGKSEEHDSVLSAIEIAANLDE-----	-----KYEPLYIGITKSG-----
25 AMYCOR DDL	-----MGRKIGILFGGKSEEHDSVLSAIEIAANLDE-----	-----KYEPLYIGITKSG-----
26 ENTGAL VANC	-----MKKIAVLLFGGKSEEHDSVLSAIEIAANLDE-----	-----KIEVMTIGIAPTH-----
27 ENTHR DDL	-----MKITLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----YIQVQLVFLKSG-----
28 ENTFCM DDL	-----MKITLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----YIQVQLVFLKSG-----
29 ENTFCM DDLF	-----MKITLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----YIQVQLVFLKSG-----
30 STRPN DDL	-----MKQITLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RPTVITFFISQSG-----
31 STRPY DDL	-----LVLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KFLVKTFFITQSG-----
32 STAPHCOL DDL	-----ENICTVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KIHVDIYITNDG-----
33 STAPHMRA DDL	-----ENICTVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KIHVDIYITNDG-----
34 BACSU DDL	-----MYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KFDIHPYITKSG-----
35 BACSTER DDL	-----RVGVLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KFDVPIYITKSG-----
36 DEIRAD DDL	-----MKRRILLAGGSGEHEVSLNSAIEIAANLDE-----	-----QFDVTPVVISKSG-----
37 SYNEC DDL	-----MRVGLLFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----NQKQVSPFYIQKSG-----
38 ECOLI DDLA	-----MEKLRVGVIFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFDVLLGIDKQ-----
39 SALTY DDLA	-----AKLRVGVIFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFDVLLGIDKQ-----
40 MYCTUB DDL	-----MSANDRRDRRVAVVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFDVAVGITPAG-----
41 MYCTUB DDL CLIN	-----VSANDRRDRRVAVVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFDVAVGITPAG-----
42 MYCAV DDL	-----QRVAVVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFEVVAIGITPAG-----
43 MYCSNG DDL	-----MTAPNHPPGRTRVAVVFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----RFEVVAIGITPAG-----
44 LEGPN DDL	-----LVLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KYHLPVIAKSG-----
45 LEUCMES DDL	-----MTKRVALLFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KYHLPVIAKSG-----
46 BORBURG DDL	-----MLIFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----KIMYIPYIDKCT-----
47 TREPA DDL	-----MVHVTLLYGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----BTVMVIGITRRG-----
48 VIBCHO DDL	-----ILLCGGSGEHEISLVSANLQQLLDE-----	-----PEFHVIRVEMK-----
49 HELPYR DDL	-----MERCVLFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE-----	-----PEFHVIRVEMK-----
Prim. cons.	MHKYM3333SL2SAND2MNMKQVAVLFGGKSAEHDVSVLSAIEIAANLDE	F222GYDVY3IDITKSG

Contacts:

00 ECOLE DDLB
 01A CHLPR DDL
 01B CHLPR DDL
 02 YERPES DDL
 03 HAEN DDL
 04 HAEDUC DDL
 05 PSEUDAE DDL
 06 PSEUPUT DDL
 07 XYLEPAS DDL
 08 BORFER DDL
 09 THIFER DDL
 10 NEISMNA DDL
 11 NEISMNB DDL
 12 NEISGON DDL
 13 BUCAP DDL
 14 BACHAL DDL
 15 GEOSUL DDL
 16 RICPR DDL
 17 ZYMOB DDL
 18 AQUIAEO DDL
 19 THEMA DDL
 20 CLOSDIF DDL
 21 ENTFCM VANA
 22 ENTFCM VANB
 23 ENTFCM VAND
 24 STREPOY DDL
 25 AMYCOR DDL
 26 ENTGAL VANC
 27 ENTFR DDL
 28 ENTFCM DDL
 29 ENTFCM DDLF
 30 STREN DDL
 31 STREY DDL
 32 STAPHCOL DDL
 33 STAPHMRS A DDL
 34 BACSU DDL
 35 BACSTER DDL
 36 DEIRAD DDL
 37 SYNEC DDL
 38 ECOLE DDLA
 39 SALTY DDLA
 40 MYCTUB DDL
 41 MYCTUB DDL CLIN
 42 MYCAV DDL
 43 MYCSMG DDL
 44 LEGNU DDL
 45 LEUCMES DDL
 46 BORBURG DDL
 47 TREP A DDL
 48 VIBCHO DDL
 49 HELPYR DDL

-----EVDV--TOLKSMGF-----
 -----LWRTGKDFPHLEETQGDSPISSEIASALAK-----
 -----LWESVSSLET--AEDSGKSVFDPPIAQLKLEK-----
 -----DFPV--TOLKEQGF-----
 -----EYNV--ANLKKDGF-----
 -----DIAI--EKLKEKGI-----
 -----EDLL--ORLVEEKI-----
 -----DDLL--ARLQSEKI-----
 -----PALA--QALVERRE-----
 -----ERSL--ADLAAAGF-----
 -----ALIQ--QMAESGA-----
 -----ETPL--SELKAQGF-----
 -----ETPL--SELKAQGF-----
 -----ETPL--SELKERGF-----
 -----DFPI--MQLKKQGF-----
 -----PDQV--RDLVLDLV-----
 -----RDLF--QVLVREMI-----
 -----DIAY--KLQELNP-----
 -----DIAP--KLREAKP-----
 -----ELPC--KLEIKP-----
 -----DFLK--KVDQLKSF-----
 -----KKDI--FKKIPEDI-----
 VWKMCCKPCA EWENDNCYSAVLS PDKKMG--LLVKOH--EYEINHV-----
 VWKLCCKPCTEW EAD--SLPAIFSPDRKTHG--LIVMKER--EYETRRI-----
 VWKMCCKPCLEW EQIAGDFVVPSPDRSTHG--LLIQKDX--GIYIQPV-----
 AWKLC DGPDAEWEDGDCRFVVLSPDSVHG--LLVLEQG--GCSTIRL-----
 SWMLCDGPAEDWENG D VREAVLSPDRGVHG--LLVLEQG--KYETIAL-----
 DWYNYQGNLANVRND--TWLEDHKNCHQ--LTFSSQGFILGEKRIVP-----
 -----QWVKGELLT--EKPTS KEDLHLTWDPCKVDFGFTG--RVINPGEIKEEG-----
 -----QWVKGELLT--EKPASKDVLHLSWDPSCQTEEGFTG--RVINPGEIKEEG-----
 -----QWVKGELLS--ERPONKEVHLHTWAQTPPETEGEFG--KRISPSEIYEE-----
 -----DSIKTQEPS--HAPGQEDRL--MT--N--ETIDWD--KKVAPSAIYEE-----
 -----QFIKTQEPS--EKPSERL--MT--N--ETIELT--QKIKPSDIYEE-----
 -----DWRKQNNIT--AEIKSTDELHLENG--EALET--SQLLKSSSGQP-----
 -----DWRKQNNIT--TEIKSTDELHLENG--EALET--SQLLKSSSGQP-----
 -----EVRGARLT--EYVSNVRLQFZQGGSAFSPAALNQ--EMFPQASQONE-----
 -----QWINGEQLT--GPIELIKLQFTSAATALIPVSIHQ--VPAADSAGGNEE-----
 -----RWLP--ETET--QKALETVSSQG--GDLML--HR--AAAEG-----
 -----VWLG--PDVS--QQVLDQGVVPGD--QPVTA--GORWQFPPEAR-----
 -----QWHSVDAEN--YLNADDPAHIALRPSAISLAQVPG--KHEHQLIDAQNG--QP-----
 -----QWHSVDAEN--YLNADDPAHIALRPSAISLAQVPG--KHEHQLIDAQNG--QP-----
 -----SWVLT DANP--DALITINREL PQVKS GSGTE LALPADPFRGGQLVSLPPGAGEV-----
 -----SWVLT DANP--DALITINREL PQVKS GSGTE LALPADPFRGGQLVSLPPGAGEV-----
 -----SWVLT DGRP--AALAITDGRQ LPEVTSASGTE LALPADPGRSGQLVSLPPGAGEV-----
 -----SWVLT DGRP--ETLAITDGRQ LPAVTEASGTE LALPAAPNRSQQLLALGNPGGEI-----
 -----RFRHRYN--DLLACSD--KLPVTEKS--TPLEG--LLINGR--L-----
 -----FFLDTESK--KILALEDEQPIVDAIMKT--VDTSD--FLARHAKSA-----
 GVN-----YLLDSVDF--PKPINTDVLPIVSLPPG--FGIFSNKN-----
 -----VWYQFACA--LEQLCTGTVALS IQEDEKRRVCLVPGGTA GAFVIAGMPC-----
 -----EGWFSEQGA--LVYLDTSATLNSD--K--ASTP-----
 S-----KYFAQIKKELPPELLTHNGLKNSFLG-----AK-----

Prim. cons.

VWKL C22PCA EWENDDCREAVQWKT D2LT2LLK E T GFLHLEVT2SSGTE LALPGDPKRIGQL2S22EGAGEV

Contacts:

H63i .E68i M95n .K97in All2a.

```

00 ECOLI DDLB ----QKVFIALHGR--GGEDGTIQGMLLEMLGPIYTGSGVMASALSMDKLRSKLLWQAGLFPVAP--FVAL--TRAEF
01A CHEPN DDL ----VDCLFPVHLHG--FGEDGTIQGFLEILGKPYAGPSLSAATAMDKLLTKRLASAVGVPPVYQELNLCFWKR
01B CHEPR DDL ----VDVFLPILHG--YGEDGAMQGFLEITGKPYTGPALAFSALAMNKVTKRMSDLGIPVVPYELFLAGWKQ
02 YERPEP DDL ----DKVFIALHGR--GGEDGTIQGVLEFLQLEPYTGSGVMASALMDKLRKLVQALGLPISP--YVAL--NRQOF
03 HARIN DDL ----NRAFNILHGR--GGEDGTIQGLLEQIQLPYTGCGVMASALMDKMRTKMLWAFGLPVAD--MKVV--TRET
04 HAEDUC DDL ----QRVFNILHGG--IGENGVLQGALEQNGIPIYTCGGVMASAITLDRKFRKLLNNAVGLPTAD--MVVV--QRG--
05 PSEUDA DDL ----DRAFNILHGR--GGEDGSMQGLEECAGIPIYTGSGVLASALAMDKLRKRVLSLGLPTP--YA----VLAS
06 PSEUPU DDL ----DRAFNILHGR--GGEDGSMQGLEECLEGIPIYTGSGVLASALAMDKLRKRVLSLGLPTP--HA----VLAS
07 XYLFAS DDL ----DRVFNVLHGNGGGEDGVVQGLMQAGVPIYTGSDVLASALMDKRVTKQVWALGLPTP--YASL--SVCAT
08 BORFER DDL ----ERVFNILHGR--YGEDGTIQGALELLGIPIYTGSGVLASALSMDKMRKRVLQHGGLPTP--FE----VLGG
09 THIFER DDL ----QIAFNVCCHA--VGEDGLIQACLETIMPIYTGSGVLASALAMDKRRCKLWRAAGLPTD--GILL--HRG--
10 NEISMNA DDL ----QTAFNILHGT--YGEDGAVQGALELLGIPIYTGSGVAASAIQMDKYRCKLIWQALGLPV--P--EFAV--IHDOT
11 NEISMNB DDL ----QTAFNILHGT--YGEDGAVQGALELLGIPIYTGSGVAASAIQMDKYRCKLIWQALGLPV--P--EFAV--IHDOT
12 NEISCON DDL ----QTAFNILHGT--YGEDGAVQGALELLGIPIYTGSGVAASAIQMDKYRCKLIWQALGLPV--P--EFAV--LYDDT
13 BUCAP DDL ----DSAYIALHGT--GGEDGTIQGLELLNIPIYTGSGVMSALSLDKWRKLLWKSLSLWVLP--DYL--QKDI
14 BACHAL DDL ----DLVFIHLHGR--DGEDGKVOALLDLNIPYVGTGVSALAMDKAKAFKFEKAGIRVA--EYVV--LHST
15 GEOSUL DDL ----DVAFICLHGR--YGEDGTVOGLELLNGIPIYTGSGVLASALAMDKIVAKVFAARGLTIA--YRVV--RRGET
16 RICPR DDL ----DIVNCLHGT--YGEDGCLPGLNIMRIPIYTHSGLLSALAFDKIHFRCVCLKNHIMTAD--SIVV--SKSD-
17 ZYHOE DDL ----DVVFNALHGT--FGEDGSIQGLMDLMAIRPIYTHSGTASALAIKELTKKILTPEINIPMP--GCLV--ERES-
18 AQUIAEO DDL ----DKVFIALHGR--GGEDGTVOGLELLIPIYTGSDTASAVSIDKDFTRKRVLSLGIWTPDWEFFL--SEGD-
19 THEMA DDL ----DVVFNVLHGT--FGEDGTIQALLDGLIRIYTGSDAPSSMICFDKLVYRFLK--GTVELPD--PV--EKKE-
20 CLOSDIF DDL ----DFAILALHGR--FGEDGTIQSILETMDIPIYSGCGPLCSGMDKNIITKMLRDSNLPTAFVFLV--SVEI-
21 ENTFCM VANA ----DVAFSALHGK--SGEDGTIQGLFELSGIPVGCIDISSAICMDKSLTYIIVAKNAGIATPAFFWIN----
22 ENTFCM VANA ----DVAFVPLHGK--CGEDGAIQGLFELSGIPVGCIDISSAACMDKSLAYILTKNAGIATPAFFVOMIE----
23 ENTFCM VAND ----DVVFPALHGK--FGEDGSIQGLELLSGIPVGCIDISSVICMDKALAYTVVKNAGITVPGFRILQ----
24 STREFOY DDL ----DVVFPVHLGK--LGEDGAMQGLELLSGIPVGCIDISSAVCMKSLAYAVVRNAGIATPAFFVIA----
25 AMYCOR DDL ----DVVFPVHLGK--FGEDGAMQGLELLSGIPVGCIDLPSSVMCIKSLTYSVVRGAGIATPTFFHIVT----
26 ENTGAL VANC ----DVLPVPLHGK--YGEDGTIQGLELLNMLPYVGCIVASALCMKMLLHQLADTMGLASAPTELLSR----
27 ENTHR DDL ----TIVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLETLNLPYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
28 ENTFCM DDL ----AIVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLETLNMPYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
29 ENTFCM DDLF ----AIVFPVHLGP--NSEDGTIQGFMETINMPYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAVGIPQVYVFL--RSDWK
30 STREN DDL ----AVVFPVHLGP--MGEDGSIQGFLEVLNMPYVGCILSSSLAMDKITTKRVLESAGIAPQVYVAIV--E--G
31 STREY DDL ----YDAVFPVHLGP--MGEDGSIQGFLEVLNMPYVGCILSSSLAMDKITTKRVLESAGIAPQVYVYI--D--G
32 STAPHCOL DDL ----YDAVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLEVLNMPYVGCILSSSLAMDKITTKRVLESAGIAPQVYVYI--D--G
33 STAPHMISA DDL ----YDAVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLEVLNMPYVGCILSSSLAMDKITTKRVLESAGIAPQVYVYI--D--G
34 BACSU DDL ----AIDVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLELLNIPYVGNVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
35 BACTER DDL ----TIDVFPVHLGP--NSEDGTIQGFLELLNIPYVGNVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
36 DEIRAD DDL ----YDAVFPVHLGP--MGEDGTIQGLLELAGIPIYVGSGLSASAVMDKVMTKQVLSAGIAPQVAMRVA--RREWQ
37 SYNEC DDL ----HEVFPVHLGP--NSEDGTIQGLLELAGIPIYVGSGLSASAVMDKVMTKQVLSAGIAPQVAMRVA--RREWQ
38 ECOLI DDLA LPTVDVIFPIVHGT--LGEDGSIQGLRVAFLPFGSDVLSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
39 SALTY DELA LPTVDVIFPIVHGT--LGEDGSIQGLRVAFLPFGSDVLSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
40 MYCTUB DDL LESVDVFPVHLGP--YGEDGTIQGLELAGVPIYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
41 MYCTUB DDL CLIN LESVDVFPVHLGP--YGEDGTIQGLELAGVPIYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
42 MYCAV DDL LAADVFPVHLGP--YGEDGTIQGLELAGVPIYVAGVLTSAACMDKIMTKYILQAAQVQVYVFL--KNQWK
43 MYCSW DDL AVDAKIVFPVHGT--LYEDGCIQGLELAGVAVVGCIVLSAIGMDKIMARRLACTINGLKSARYKLS--W--H
44 LEGPNU DDL --GDYDIFFPVHGN--LGEDGTIQGLFKLLDKPYVGAFLRHAVSFDKALTKLELTWNGIRNTKYIIVD--PES-
45 LEUCHE DDL --LEIDVFPVHGR--TGEDGAIQGLVKVMDIPCAGAGTIGSAISSNKYPCILLKSYDIPLVFPFGFR--QHDY-
46 BORBURG DDL --VTDVFPVHLGS--YGEDGTIQGLELLQVPIYVGCIVCASALAMDKVKALQWQAGLPPVFPVFR--KDAWR
47 TREPA DDL --IDVFPVHLGS--PGETGDIQGLELAGIPIYVGCIVCASALAMDKVKALQWQAGLPPVFPVFR--KDAWR
48 YIBCHO DDL --IIELELVINLHGG--DGEDGLASLEFYRIAFIGPRIEASVLSYKYLTKLYAKDLGVTKLHDVLLN----
49 HELPYR DDL

```

Erim.cons.

L32VDVFPVHLGPNGYGEDGTIQGLELLGIPIYVGSGLASALAMDK2RYK2LLQAAQGLPVAPVYVFLVLRDWT

87/90

Contacts:

G149a1..S150i
 E148n. ||.S151a
 K144a. | | | | .V152a
 I142a. | | | | |.M154a
 | | | | | |
 K101a..W182a
 E180a. | |.L183a
 | | | | |

00 ECOLI DDL
 01A CHLPH DDL
 01B CHLPH DDL
 02 YERPES DDL
 03 HAEIN DDL
 04 HAEDUC DDL
 05 PSEUDAE DDL
 06 PSEUPUT DDL
 07 XYLPHS DDL
 08 BORPER DDL
 09 THIFER DDL
 10 NEISMA DDL
 11 NEISMNB DDL
 12 NEISGON DDL
 13 BUCAP DDL
 14 BACHAL DDL
 15 GEOSUL DDL
 16 RICPR DDL
 17 XYOR DDL
 18 AQUIAEO DDL
 19 THEMA DDL
 20 CLOSDF DDL
 21 ENTFCM VANA
 22 ENTFCM VAND
 23 ENTFCM VAND
 24 STRPTOY DDL
 25 AMYCOR DDL
 26 ENTGAL VANC
 27 ENTHR DDL
 28 ENTFCM DDL
 29 ENTFCM DDL
 30 STREN DDL
 31 STRFY DDL
 32 STAPHCOL DDL
 33 STAPHMRS DDL
 34 BACSU DDL
 35 BACSTER DDL
 36 DEIRAD DDL
 37 SYNEC DDL
 38 ECOLI DDLA
 39 SALTY DDLA
 40 MYCTUB DDL
 41 MYCTUB DDL CLIN
 42 MYCAV DDL
 43 MYCSMG DDL
 44 LEGPNU DDL
 45 LEUCMES DDL
 46 BORBURG DDL
 47 TREP A DDL
 48 VIBCHO DDL
 49 HELPYR DDL

EKGLSDKQL--AEISALG--LPIVVKPSREGSSVGMKVVV--ENALQDALRLAFONDEEVLIEKRLS--G
 ---NPELCIQNLIETFS---FPMIVKTAHLGSSIGIFLVRD---KEELQEKISEAFLYDTDFVVEES-RIGS
 ---BQDKWLHIVRAFS---FFIFVKSSHLGSSIGVFEVHN---VIELRDAINEAHRNDVDFVEEN-RIGC
 ETLSPPELV--ACVAKLG--LPLIVKPSHEGSSVGMKVDH--ASELQKALVEAFQHDSVLEKRLS--G
 ---SELDPO--AVVAKLG--LELMVKPSLEGSSVGLTKVKA---VEELKSAVEYALKFDMTILIEEFLA--G
 ---QAIIDN--QIITAKLS--LPIVVKPSHEGSSVGVKPKVT---KEELFAITALEFDITVLEVEFLT--G
 ---EDDCR--EAAQRIG--FPLIVKPAHEGSSIGMAKVG--LDELIAANREARYDSQVLEVEONIS--G
 ---ESDCI--QASTEIG--FPLIVKPAHEGSSIGMAKVNS---TOELVAANQDAARYDSQVLEVEONIS--G
 ---AVEVR--QAVEHIG--FPVILKPAHEGSSVGVSRVFA---LEHDEEVALAARYTEGELMELQIE--G
 ---STELR--LVEDRIG--LPLILKPPHEGSSVGTITKVG---YSDMKAAYELAAFPDAEVLAEQFIT--G
 ---SHTF--DLGARFG--WELYIKPHEGSSVGLVSKVGG---PAELDAALQCAFAIEVEVLCGAVI--G
 ---DFD--AVEEKIG--LPMFVKPAHEGSSVGVKVKG---KGRKLSVTEELKHQGEIIAERFIG--G
 ---DFD--AVEEKIG--LPMFVKPAHEGSSVGVKVKG---KGRKLSVTEELKHQGEIIAERFIG--G
 ---DFD--AVEEKIG--LPMFVKPAHEGSSVGVKVKG---KGRKLSVTEELKHQGEIIAERFIG--G
 S---KITYS--YLLKILKL--KPPVVKFNAGSSIGITVNH---PDELLDSINLAFNISNIIIEKFLK--G
 ---YD--ANAFNFG--TYPVVKPNQGGSTIGLVAET---EELQOGEIAPRHDDTILIEEFLA--G
 ---VD--PVAEFG--YFVVKPSLEGSSVGVSVIKS---PEELPSALELAFRIDDVLEVEFLK--G
 ---HI--NIDPK--REYVILKPLQGGSSIGVVIIE---EDDFNFTDIDFTYG---EDLIEEQIQ--G
 ---LY--TKDEL--RPPVVKPNQGGSSVGVVAIIDESFNDGQIRKQDIDFKMFKTLLAEFFIK--G
 ---VL--NTEWK--FPVVKPVREGSSVGLKIVES---LEELKEYALDILLKTERVWVEEVE--G
 ---FM--KTSPLG--YPCVVKPREGSSIGVFCES---DEEFOHALKEDLPRYGSVIVQKIP--G
 D---Y--DELDNIG--YFVFKPNAGSSVATFFIHS---KDEVEEAVRKGLEVDVFLIEKIP--G
 ---KDR--PVAATFT--YFVVKPARSGSSVGVKVN--ADELDYATESARQYDSKILIEQAVS--G
 ---KGD--FEARTLT--YFVVKPARSGSSVGVKVN--TEELNAATEAAGQYDSKILIEQAVS--G
 ---EGOR--LSTEDFV--YFVVKPARSGSSVGVKVKC---AELQAAIEEARQYDSKILIEAVT--G
 ---ADET--VDAARFT--YFVVKPARSGSSVGVKVS---EELHSAVETARQYDSKILIEAVT--G
 ---PMD--VDPDALN--YFVVKPARSGSSVGVKVS---KEELPAALAEARQYDAKILIEEAVI--G
 ---YENDF--ATIDRFIQDHGFFIFIKNEAGSSKGIKVTD---KALQASALTAFAYGGSVILQKALIA--G
 ENPKIFDQ--CEGSLY--EMFVKPANMGSSVGVSKAEN---REELQNALALAYQYDSRAIVEQ--IEA
 ENPKKVFQ--CEGSLY--EMFVKPANMGSSVGVSKAEN---REELQNALALAYQYDSRAIVEQ--IEA
 GNPKEVFEK--CEGSLY--FVVKPANMGSSVGVSKVEN---REELQALEEARFRIDARATVEQ--IEA
 DDVTAKIAB--VEKRAY--FVVKPANMGSSVGVSKSEN---QELRQALKLAFRIDSRLVEQ--VNA
 QDLEACLV--TLARLT--FVVKPANMGSSVGVSKAQT---KVELRKAITQALTYDSRLVEQ--VVA
 KYEHNILKL--VNDKLAN--FVVKPANLGGSSVGVSKCN--EALKEGIEKAFQDRKLVIEQ--VNA
 KYEHNILKL--VNDKLAN--FVVKPANLGGSSVGVSKCN--EALKEGIEKAFQDRKLVIEQ--VNA
 RSPKESCE--VEQELGY--PCFVKPANLGGSSVGVSKCRN---REELQKAFELAFQYDRKLVVEEG--ING
 KSGEYVDR--IERELGY--PCFVKPANAGSSVGVSKCRQ---RGDLKAFIETAFYDRKLVIEA--IVG
 QTPDAVRA--AAELGY--ELFVKPANLGGSSVGVSKVGS---PEELDAALTLAFGLDRRVLIEAMTPHPK
 SNPCVFPALCEKTEAQVGY--PCFVKPANLGGSSVGVSKVRN---RSELAALDNASYDRRVLIEAG--LTDI
 ---RANRHAFSAEVESRLGI---ELFVKPANQGGSSVGVSKVTS---EQYQAVALAFQDRKLVIEQ--IKG
 ---RTRRHAFSAEVESRLGI---ELFVKPANQGGSSVGVSKVAN---EQYQAVALAFQDRKLVIEQ--IKG
 ---RPRSTLHQECE--RIGI---FVVKPARGGSSVGVSRVSS---WDLPAAVARARRHDPKVIIEA--ISG
 ---RPRSTLHQECE--RIGI---FVVKPARGGSSVGVSRVSS---WDLPAAVARARRHDPKVIIEA--ISG
 ---RPSQTLSDQRE--RIGI---FVVKPARGGSSVGVSRVSS---WDLDAVAARARRHDPKVIIEA--IAG
 ---RPGVTLSDQRE--RIGI---FVVKPARGGSSVGVSRVTA---WDLPAAVALARARRHDPKVIIEA--VIG
 ANASERQQFCHVAEFGW--ELFVKPANQGGSSVGVSKANN---MDELNAVAVALRDEEILVEEF--IVG
 ---ANNWSWKIVAEVGN--IVFVKANQGGSSVGVSRVSN---AEEYTEALSDFQYDKVLEAVNG--A
 ---FLDKKIKRNVKELGY--FVVKPAQAGSSVGVSAVQT---RFLIPEAEAFQDEEVLVIEA--VRA
 ---MMQEFVQLETRIGY--FLFVKPAQAGSSVGVSAVQT---RFLIPEAEAFQDEEVLVIEA--VRA
 ---SSIDKAPAGHWG--SIFVKPARQGGSSVGVSKVTT---EDQIPAEAEAFQDEEVLVIEA--VKE
 ---EENRANALDMMNEN--FFFLIKENAGSSVGVSKVKE---EKELVYALDGAPEYSKVLIEEPPIQG--V

Prim. cons.

ERP2ESD22AAVE2RLGY3H32PVFVKPANEHSSVGVSKVSSFN2ESELQAALEAFQYDSKLVIEQAVS12G

Contacts:

		Y210ai.	.K215ain
E187.		F209a.1	.Y2161
00 ECOLI DDLB	PEFTVAILGE-----EILPSIRIQP-----SGTFYDYAKYLSDE---TQYFCPAG--LEASQANLQALVVK		
01A CHLPH DDL	REIEVSCIGHSSS--WYCMAGNERCG-----ASGFDYQEKYGFQIDCAKISFDLQ--LSQESLDCVRELAER		
01B CHLTR DDL	KEIEVSVLGDGSG--APVVAGLHERRC-----SGGFDYQEKYGLSGKSSAQIVFTD--LSKEIQEQILEADK		
02 YERPES DDL	PEFTVAILGD-----EVLPSIRIQP-----PGVFDYDAKYLSDK---TQYFCPSG--LSDESEQQLAALALQ		
03 HAREN DDL	DELTVPVLGN-----QVLPAIRIVP-----EGEFDYDYAKYLSDN---TQYFCPAG--LTPEREQALSTLVR		
04 HADUC DDL	AEYSVPVLDG-----EVLPAVQIIP-----DGEFDYDYAKYLSDK---TQYIYPA--LTPEREQALSTLVR		
05 PSEUDAE DDL	PEFTVAILRG-----QVLPAIRLGT-----PHTFDYDYAKYLSAD---TRYQVPCG--LDEAKREKELZAR		
06 PSEUPUT DDL	PEFTIAVLRG-----QVLPPIALGT-----PHVFDYDYAKYLVND---TQYIYPCG--LDSVKEQLIDLTAR		
07 KYLFAS DDL	DELTVSILDE-----MALPSIRIVE-----QQWYDYAKYLAED---TQYVCP--G-LDEVAEAIARLALA		
08 BORFER DDL	RELTAVLGSAA--ARALPVIEIVA-----PGGNYDYEHKYPSSD---TQYFCPAD--LPADVAADVAVAER		
09 THIFER DDL	HEVTVAILDG-----QALPPIVIEP-----PRAFYDYDYAKYLSAD---TRYLLPSG--LGAPLEQQLQALALR		
10 NEISMAE DDL	GEYSCPVLNG-----KGLPGIHIIP-----ATEFDYDYAKYLRND---TIYQCPSEDLTEAESLMLRELAER		
11 NEISMNE DDL	GEYSCPVLNG-----KGLPGIHIIP-----ATEFDYDYAKYLRND---TIYQCPSEDLTEAESLMLRELAER		
12 NEISGON DDL	GEYSCPVLNG-----KGLPGIHIIP-----ATEFDYDYAKYLRND---TIYQCPSEDLTEAESLMLRELAER		
13 BUCAP DDL	TEYTVSILNK-----KVLPPIKIIT-----KWFYDYSSKYIESS---TEYICPSG--LNYQREELKIKIVEI		
14 BACHAL DDL	TEYTVAVLGNKGE--ERLPPVIEIVP-----KMKLYDYESKYAPGH---SEHIVPAR--LSEHAYVQQAVER		
15 GEOSUL DDL	REIQIGILL--D--DRAMGAIIVP-----VNEFDYDYAKYTAGK---AETHCPPV--LPAEHRRLAEGEA		
16 RICFR DDL	QELQVALLNGKA--LGVLEIKLL-----KRFYDYDYAKYNEGE---AETHCPPV--LPAEHRRLAEGEA		
17 TYMCE DDL	RELTAVMGNKA--LAVTELCP-----NNGFDYDYAKYTDGM---TTHICPAK--LPAEHRRLAEGEA		
18 AQUIASO DDL	ROMTVGLKGEA--LPPVVEIIP-----KKGVDYDYCKYTKGM---SEYRILK--DKLSKQLQIEISL		
19 THEMA DDL	REMTVAILGKGE--FELLPVLELRP-----KRRFDYDYVAKYTKGE---TEYILPAP--LNSERLVEKEMALK		
20 CLOSDIE DDL	GEYTSFLLNG-----EYFPTIISIKS-----DSGFDYDYAKYVSEK---GAKEEVVY--LDEELQKRVNIESET		
21 ENTFCM VANA	CEVGC AVLGNB--A--ALVVGEDQIRL-----QYGFYDYDYAKYVSEK---GAKEEVVY--LDEELQKRVNIESET		
22 ENTFCM VANB	SEVGC AVLGNB--D--DLVVGEDQIRL-----SHGIFRHHQNEPEKSGENAMIIVPADIPVEERNRVQETAKK		
23 ENTFCM VAND	SEVGC AVLGNB--N--DLVVGEDQIRL-----RHGFFRHHQNEPEKSGENAMIIVPADIPVEERNRVQETAKK		
24 STRETOY DDL	SEIGCALGTG--T--DLVVGEDQIRL-----SHGIFRHHQNEPEKSGENAMIIVPADIPVEERNRVQETAKK		
25 AMYCOE DDL	SEIGCALGTG--E--DLVVGEDQIRL-----THGFKIHQNEPEKSGENAMIIVPADIPVEERNRVQETAKK		
26 ENTGAL VANC	IEIGCGILLGN--E--QLTYGACDAISL-----VDGFFDYDYAKYVSEK---GAKEEVVY--LDEELQKRVNIESET		
27 ENTHR DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
28 ENTFCM DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
29 ENTFCM DDLF	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
30 STREPN DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
31 STREY DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
32 STAPHOOL DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
33 STAPHMRSR DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
34 BACSU DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
35 BACSTER DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
36 DEIRAD DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
37 SYNEC DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
38 ECOLI DOLA	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
39 SALTU DOLA	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
40 MYCTUB DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
41 MYCTUB DDL CLIN	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
42 MYCAV DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
43 MYCSMG DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
44 LEGPNU DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
45 LEUCMES DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
46 BORBURG DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
47 TREPA DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
48 VIBCHO DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
49 HELFYR DDL	REIEVAVLGNED--VRTLPGEVVKD-----VAFYDYDYAKYINN---KIEMQIPAE--VPEEYQKQYKAKI		
Prim. cons.	REIEVAVLGNDDGTG3PEALP2GEIVPDGVRGR3GGFDYDYAKYLDGSGKTEYIIIPADLPEEVEBQIRELALR		

Contacts:

00	ECOLI_DDLB	-----
01A	CHLPH_DDL	-----
01B	CHLPH_DDL	-----
02	YERPEB_DDL	-----
03	HAEIN_DDL	-----
04	HAEDUC_DDL	-----
05	PSEUDAE_DDL	-----
06	PSEUPUT_DDL	-----
07	XYLFAS_DDL	-----
08	BORPER_DDL	-----
09	THIFER_DDL	-----
10	NEISMAA_DDL	-----
11	NEISMNB_DDL	-----
12	NEISGNB_DDL	-----
13	BUCAP_DDL	-----
14	BACHAL_DDL	-----
15	GEOSUL_DDL	-----
16	RICPR_DDL	-----
17	TYMOB_DDL	KMAGQGG-----
18	AQUIAEO_DDL	-----
19	THEMA_DDL	-----
20	CLOSDIF_DDL	-----
21	ENTFCM_VANA	-----
22	ENTFCM_VANB	-----
23	ENTFCM_VAND	-----
24	STRPTOY_DDL	-----
25	AMYCCR_DDL	-----
26	ENTGAL_VANC	-----
27	ENTHR_DDL	FFNAME-----
28	ENTFCM_DDL	FFERNE-----
29	ENTPCS_DDLF	-----
30	STRPN_DDL	HLI-----
31	STRPY_DDL	-----
32	STAPHCCG_DDL	-----
33	STAPHRSA_DDL	-----
34	BACSU_DDL	IKHTF-----
35	BACSTER_DDL	-----
36	DEIRAD_DDL	-----
37	SYNEC_DDL	Q-----
38	ECOLI_DDLA	IKTTM-----
39	SALTY_DDLA	IKTTM-----
40	MYCTUB_DDL	LH-----
41	MYCTUB_DDL_CLIN	LH-----
42	MYCAV_DDL	L-----
43	MYCSMG_DDL	LR-----
44	LEGNUN_DDL	-----
45	LEUCMES_DDL	LSYSFVSLGEEKIGKFN-----
46	BORBURG_DDL	R-IDFEN-----
47	TREBA_DDL	LSTDLRHAHVCAFSVTAAHDPDAQGDDWDQORDSNPLPTA-----
48	VIBCHO_DDL	-----
49	HELEPR_DDL	NK-----

Prim. cons.

LKTTT42222222222HDPDAQGDDWDQORDSNPLPTA