

Table 3. Atom-atom contact potentials

		1 ALA N	2 ALA CA	3 ALA C	4 ALA O	5 ALA CB		1 ALA N	2 ALA CA	3 ALA C	4 ALA O	5 ALA CB			
0	SAS	SAS	1.82	1.23	2.00	1.14	0.89	83	LEU	CB	0.70	-1.07	0.17	-1.19	-0.66
1	ALA	N	1.57	0.60	-2.51	-2.01	0.35	84	LEU	CG	0.64	-0.69	-0.51	-1.15	-0.67
2	ALA	CA	0.63	-0.47	0.40	-0.53	-0.98	85	LEU	CD1	0.18	-1.10	-0.99	-0.19	-0.88
3	ALA	C	-2.48	0.41	1.11	1.07	-0.46	86	LEU	CD2	0.43	-0.81	-0.67	0.01	-0.93
4	ALA	O	-2.02	-0.55	1.11	0.84	-0.91	87	LYS	N	1.89	1.13	-2.52	-1.93	0.84
5	ALA	CB	0.39	-0.97	-0.44	-0.91	-0.43	88	LYS	CA	1.18	0.04	1.18	-0.61	-0.75
6	ARG	N	1.33	0.75	-2.61	-1.95	0.76	89	LYS	C	-2.38	0.73	1.34	1.00	-0.16
7	ARG	CA	0.66	-0.43	0.29	-0.61	-0.83	90	LYS	O	-1.70	-0.42	0.76	0.94	-0.60
8	ARG	C	-2.55	0.28	1.70	0.81	-0.19	91	LYS	CB	1.19	-0.91	0.23	-1.11	0.06
9	ARG	O	-1.87	-0.39	0.75	0.83	-0.67	92	LYS	CG	1.52	-0.12	0.08	-0.66	0.05
10	ARG	CB	0.72	-1.03	0.09	-1.18	-0.24	93	LYS	CD	1.54	-0.59	0.02	-0.07	0.32
11	ARG	CG	0.82	-0.37	-0.15	-0.77	-0.20	94	LYS	CE	1.58	0.15	0.15	-0.12	0.36
12	ARG	CD	1.04	-0.65	-0.43	-0.49	0.10	95	LYS	NZ	1.65	0.75	0.83	-0.03	0.99
13	ARG	NE	1.26	-0.56	0.04	-0.38	0.14	96	MET	N	1.70	1.16	-2.30	-1.99	0.71
14	ARG	CZ	0.85	-1.28	-0.43	-0.13	-0.57	97	MET	CA	0.95	-0.12	0.55	-0.57	-1.01
15	ARG	NH1	0.71	-0.41	-0.37	-0.25	0.06	98	MET	C	-2.48	0.81	2.83	0.74	-0.46
16	ARG	NH2	0.75	-0.29	-0.07	-0.07	0.01	99	MET	O	-2.01	-0.58	1.10	0.50	-0.81
17	ASN	N	1.72	0.49	-2.42	-1.73	0.84	100	MET	CB	0.48	-0.97	-0.09	-1.12	-0.59
18	ASN	CA	0.68	-0.15	0.98	-0.53	-0.50	101	MET	CG	0.56	-0.62	-0.37	-0.73	-0.70
19	ASN	C	-2.24	0.08	2.06	0.28	-0.11	102	MET	SD	0.15	-1.24	-0.63	0.42	-0.93
20	ASN	O	-1.72	-0.30	1.06	0.85	-0.56	103	MET	CE	0.04	-0.90	-1.05	-0.22	-0.79
21	ASN	CB	0.82	-0.70	0.52	-0.81	-0.05	104	PHE	N	1.88	0.65	-2.42	-1.91	0.66
22	ASN	CG	0.03	-0.42	0.60	-0.31	-0.47	105	PHE	CA	0.54	-0.51	1.25	-0.78	-0.89
23	ASN	OD1	-0.77	-0.39	0.43	0.39	-0.26	106	PHE	C	-2.38	-0.10	2.14	0.65	-0.30
24	ASN	ND2	0.26	-0.40	-0.08	-0.36	-0.06	107	PHE	O	-1.88	-0.83	0.56	0.47	-0.65
25	ASP	N	1.68	1.09	-2.51	-1.70	0.58	108	PHE	CB	0.38	-0.85	0.03	-0.93	-0.48
26	ASP	CA	0.58	0.12	1.36	-0.29	-0.70	109	PHE	CG	0.65	-0.98	0.36	0.39	-0.96
27	ASP	C	-2.42	0.79	3.33	1.12	-0.24	110	PHE	CD1	0.33	-0.86	-1.00	-0.47	-0.77
28	ASP	O	-1.95	-0.34	1.02	1.19	-0.73	111	PHE	CD2	0.14	-0.83	-1.01	-0.24	-0.71
29	ASP	CB	0.64	-0.60	0.72	-0.61	-0.13	112	PHE	CE1	0.24	-0.81	-1.04	-0.11	-0.96
30	ASP	CG	-0.27	-0.14	0.58	-0.19	-0.43	113	PHE	CE2	0.27	-0.84	-0.84	0.13	-0.91
31	ASP	OD1	-0.82	0.33	1.05	0.97	0.01	114	PHE	CZ	0.30	-0.84	-0.59	0.15	-0.96
32	ASP	OD2	0.01	-0.18	0.90	1.07	0.16	115	PRO	N	1.98	0.52	-1.36	-1.17	0.04
33	CYS	N	2.08	1.35	-2.53	-1.91	0.19	116	PRO	CA	0.81	-0.15	-0.01	-0.57	-0.41
34	CYS	CA	0.84	-0.35	0.64	-0.47	-0.82	117	PRO	C	-2.45	0.79	0.85	0.84	-0.18
35	CYS	C	-2.20	0.66	1.70	0.44	-0.44	118	PRO	O	-1.75	-0.25	1.12	0.95	-0.68
36	CYS	O	-1.93	-0.68	0.77	0.28	-0.70	119	PRO	CB	0.21	-0.12	-0.31	-0.10	-0.37
37	CYS	CB	0.25	-0.59	-0.26	-1.01	-0.66	120	PRO	CG	0.47	-0.31	-0.41	-0.17	-0.34
38	CYS	SG	-0.25	-0.65	-0.79	-0.15	-0.67	121	PRO	CD	1.11	-0.13	-1.34	-0.91	-0.17
39	GLN	N	2.03	0.95	-2.64	-1.83	0.69	122	SER	N	1.61	0.83	-2.18	-1.73	0.31
40	GLN	CA	0.63	0.14	0.63	-0.51	-1.08	123	SER	CA	0.48	-0.38	0.36	-0.45	-0.63
41	GLN	C	-2.56	1.16	1.63	1.05	-0.37	124	SER	C	-2.35	0.35	2.14	1.11	-0.11
42	GLN	O	-1.83	-0.17	0.91	1.05	-0.70	125	SER	O	-1.81	-0.48	0.85	0.79	-0.66
43	GLN	CB	0.95	-0.79	0.62	-0.93	-0.11	126	SER	CB	0.21	-0.47	0.01	-0.70	-0.23
44	GLN	CG	0.92	-0.25	-0.35	-0.74	0.03	127	SER	OG	-0.64	-0.44	0.39	-0.45	-0.22
45	GLN	CD	1.20	-0.87	-0.02	0.30	-0.39	128	THR	N	1.85	1.09	-2.22	-1.71	0.52
46	GLN	OE1	-0.07	-0.60	0.30	0.39	0.07	129	THR	CA	0.88	-0.19	1.25	-0.76	-0.71
47	GLN	NE2	0.74	-0.39	0.13	-0.29	0.09	130	THR	C	-2.43	0.75	1.95	0.92	-0.38
48	GLU	N	2.08	1.52	-2.67	-1.94	0.77	131	THR	O	-1.82	-0.57	0.69	0.71	-0.61
49	GLU	CA	0.96	0.84	0.96	-0.24	-0.90	132	THR	CB	0.19	-0.71	-0.04	-0.79	-0.28
50	GLU	C	-2.62	1.49	3.36	1.09	-0.04	133	THR	OG1	-0.43	-0.51	0.33	-0.45	-0.16
51	GLU	O	-1.95	-0.24	1.20	1.21	-0.80	134	THR	CG2	0.44	-0.41	-0.54	-0.14	-0.46
52	GLU	CB	0.83	-0.89	0.76	-1.13	0.01	135	TRP	N	2.12	1.07	-2.36	-1.88	0.48
53	GLU	CG	0.60	-0.13	0.27	-0.39	0.01	136	TRP	CA	0.90	0.04	1.69	-0.58	-0.82
54	GLU	CD	1.06	-0.57	-0.06	0.86	-0.12	137	TRP	C	0.00	1.15	4.00	0.61	-0.14
55	GLU	OE1	0.43	-0.40	0.73	1.14	0.47	138	TRP	O	-1.99	-0.67	1.11	0.64	-0.68
56	GLU	OE2	0.51	0.23	0.70	1.23	0.48	139	TRP	CB	0.62	-0.73	0.06	-0.80	-0.60
57	GLY	N	1.34	0.24	-2.19	-1.78	0.27	140	TRP	CG	0.41	-0.93	0.40	0.62	-0.86
58	GLY	CA	0.37	-0.41	0.19	-0.74	-0.34	141	TRP	CD1	0.40	-0.67	-0.51	-0.32	-0.46
59	GLY	C	-1.62	-0.24	0.40	0.27	-0.49	142	TRP	CD2	0.40	-0.84	0.86	1.02	-1.04
60	GLY	O	-1.63	-0.67	0.70	0.66	-0.55	143	TRP	NE1	0.70	-0.35	-0.47	-0.46	-0.42
61	HIS	N	1.86	1.08	-2.51	-1.94	0.60	144	TRP	CE2	0.39	-0.75	0.85	1.41	-1.13
62	HIS	CA	0.41	-0.29	0.99	-0.40	-0.68	145	TRP	CE3	0.24	-0.78	-1.15	0.02	-0.92
63	HIS	C	-2.19	1.26	3.14	0.39	-0.35	146	TRP	CZ2	0.41	-0.56	-0.69	-0.05	-0.68
64	HIS	O	-1.71	-0.68	0.90	0.71	-0.55	147	TRP	CZ3	-0.09	-0.81	-1.08	-0.02	-0.84
65	HIS	CB	0.63	-0.67	0.32	-0.86	-0.33	148	TRP	CH2	0.10	-0.74	-0.82	0.35	-0.81
66	HIS	CG	0.40	-0.46	0.78	0.25	-0.66	149	TYR	N	1.67	0.70	-2.27	-1.93	0.68
67	HIS	ND1	-0.08	-0.55	0.01	-0.24	-0.19	150	TYR	CA	0.54	-0.35	0.76	-0.87	-0.67
68	HIS	CD2	0.38	-0.84	-0.79	-0.59	-0.33	151	TYR	C	-2.15	0.85	2.14	0.56	-0.45
69	HIS	CE1	0.43	-0.28	-0.33	-0.27	-0.24	152	TYR	O	-1.84	-0.80	0.71	0.53	-0.56
70	HIS	NE2	0.65	-0.26	0.04	-0.34	0.05	153	TYR	CB	0.70	-0.86	0.15	-0.92	-0.67
71	ILE	N	1.34	0.98	-2.33	-2.02	0.69	154	TYR	CG	0.49	-0.89	-0.19	0.41	-0.82
72	ILE	CA	0.64	-0.63	1.75	-1.11	-0.95	155	TYR	CD1	0.24	-0.71	-0.99	-0.33	-0.61
73	ILE	C	-2.67	0.59	3.20	0.94	-0.19	156	TYR	CD2	0.26	-1.00	-0.76	-0.40	-0.58
74	ILE	O	-1.97	-0.75	0.69	0.44	-0.69	157	TYR	CE1	0.23	-0.62	-0.70	0.04	-0.70
75	ILE	CB	0.86	-1.25	0.12	-1.36	-0.50	158	TYR	CE2	0.20	-0.74	-0.50	0.14	-0.63
76	ILE	CG1	0.54	-0.79	-0.53	-0.76	-0.87	159	TYR	CZ	0.36	-1.10	-0.30	0.99	-0.92
77	ILE	CG2	0.07	-0.66	-0.58	-0.08	-0.91	160	TYR	OH	0.22	-0.46	0.09	0.33	-0.31
78	ILE	CD1	0.24	-1.13	-0.95	-0.11	-0.96	161	VAL	N	1.33	0.76	-2.16	-2.10	0.63
79	LEU	N	1.80	0.92	-2.47	-2.10	0.74	162	VAL	CA	0.86	-0.60	1.37	-0.88	-0.95
80	LEU	CA	0.89	-0.31	1.60	-0.84	-1.10	163	VAL	C	-2.61	0.59	2.71	1.04	-0.49
81	LEU	C	-2.46	0.57	1.05	0.80	-0.3								

Table 3. (continued)

		6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16		6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16			
		ARG N	ARG CA	ARG C	ARG O	ARG CB	ARG CG	ARG CD	ARG NE	ARG CZ	ARG NH1	ARG NH2		ARG N	ARG CA	ARG C	ARG O	ARG CB	ARG CG	ARG CD	ARG NE	ARG CZ	ARG NH1	ARG NH2			
0	SAS	SAS	1.94	1.24	1.96	1.06	1.05	0.83	0.45	0.58	0.78	0.34	0.30	83	LEU	CB	0.69	-1.08	0.25	-1.11	-0.27	-0.43	0.03	0.12	-0.56	0.08	0.02
1	ALA	N	1.34	0.41	-2.57	-1.87	0.70	0.79	1.02	1.23	0.81	0.68	0.73	84	LEU	CG	0.75	-0.32	-0.42	-1.10	-0.28	-0.30	-0.03	0.09	-0.69	0.21	0.31
2	ALA	CA	1.09	-0.43	0.29	-0.36	-1.03	-0.38	-0.66	-0.57	-1.27	-0.42	-0.29	85	LEU	CD1	0.52	-0.94	-0.70	0.11	-0.50	-0.59	-0.21	-0.28	-0.81	0.06	0.04
3	ALA	C	-2.58	0.27	1.70	0.74	0.09	-0.16	-0.44	0.05	-0.43	-0.36	-0.06	86	LEU	CD2	0.73	-0.67	-0.59	0.26	-0.48	-0.56	-0.35	-0.16	-0.93	-0.12	-0.09
4	ALA	O	-1.96	-0.64	0.82	0.83	-1.18	-0.76	-0.47	-0.35	-0.14	-0.22	-0.03	87	LYS	N	1.69	1.30	-2.34	-1.90	1.30	1.14	1.19	1.56	1.60	1.03	1.14
5	ALA	CB	0.80	-0.82	-0.18	-0.68	-0.23	-0.20	0.10	0.13	-0.56	0.04	-0.02	88	LYS	CA	1.19	0.08	1.23	-0.69	-0.69	-0.05	-0.42	-0.12	-0.80	-0.35	-0.14
6	ARG	N	1.63	1.39	-2.27	-1.77	0.88	1.16	1.39	1.45	1.20	0.84	0.91	89	LYS	C	-2.21	1.31	2.31	0.96	0.42	-0.28	-0.39	0.40	-0.26	-0.35	0.13
7	ARG	CA	1.39	-0.01	0.88	-0.53	-0.72	-0.19	-0.47	-0.32	-0.94	-0.57	-0.17	90	LYS	O	-1.67	-0.44	1.00	0.92	-0.86	-0.66	-0.21	-0.24	0.57	-0.12	0.13
8	ARG	C	-2.23	0.89	2.26	1.10	-0.16	-0.27	-0.27	0.24	0.35	-0.52	0.11	91	LYS	CB	1.34	-0.81	0.70	-1.06	0.63	0.34	0.26	0.09	-0.59	0.17	0.21
9	ARG	O	-1.78	-0.57	1.13	0.90	-1.00	-0.55	-0.15	0.06	0.53	-0.36	-0.10	92	LYS	CG	1.06	-0.05	-0.50	-0.76	0.41	-0.14	0.40	0.26	-0.62	0.10	0.00
10	ARG	CB	0.90	-0.71	-0.15	-1.00	0.16	0.11	0.15	0.36	-0.30	0.14	0.29	93	LYS	CD	1.67	-0.31	0.04	0.07	0.83	0.32	0.44	0.38	-0.20	0.37	0.00
11	ARG	CG	1.19	-0.18	-0.28	-0.56	0.11	-0.11	0.04	0.05	-0.56	-0.04	-0.06	94	LYS	CE	1.98	0.23	0.39	0.15	0.72	0.46	0.60	0.47	-0.11	0.40	-0.02
12	ARG	CD	1.41	-0.45	-0.25	-0.18	0.16	0.04	-0.09	-0.05	-0.73	0.08	-0.13	95	LYS	NZ	2.17	0.73	1.18	0.28	1.36	0.85	0.96	1.03	0.88	0.61	0.44
13	ASN	NE	1.47	-0.30	0.22	0.03	0.37	0.08	-0.05	0.05	-0.70	0.06	-0.05	96	MET	N	0.93	1.52	-2.46	-1.80	1.02	1.14	1.38	1.40	0.53	0.94	0.87
14	ASN	CZ	1.24	0.93	0.35	0.52	-0.30	-0.58	-0.76	-0.69	-1.39	-0.17	-0.33	97	MET	CA	1.19	0.39	0.35	-0.88	-0.94	0.11	-0.12	0.04	-0.73	-0.24	-0.16
15	ASN	NH1	0.87	-0.55	-0.53	-0.38	0.16	-0.02	0.10	0.06	-0.19	0.08	-0.08	98	MET	C	-2.62	1.35	0.84	0.40	-0.18	-0.17	-0.11	0.63	0.73	0.01	0.12
16	ASN	NH2	0.94	-0.16	0.10	-0.12	0.31	-0.04	-0.12	-0.05	-0.34	-0.07	-0.13	99	MET	O	-1.91	-0.67	0.53	0.78	-0.89	-0.49	-0.19	-0.28	1.09	-0.14	0.03
17	ASN	N	1.44	0.73	-2.40	-1.80	0.73	0.71	1.25	1.51	1.74	0.45	0.72	100	MET	CB	1.11	-0.71	-0.26	-0.90	-0.01	-0.09	0.23	0.22	-0.17	0.31	0.28
18	ASN	CA	0.68	-0.51	0.40	-0.81	-1.29	-0.69	-0.90	-0.82	-0.68	-0.65	-0.58	101	MET	CG	0.91	-0.10	-0.13	-0.54	-0.02	-0.43	0.01	-0.24	-0.78	0.06	-0.11
19	ASN	C	-2.30	0.02	1.66	0.31	0.01	-0.58	-0.48	-0.29	-0.39	-0.44	-0.27	102	MET	SD	0.24	-0.92	-0.89	0.40	-0.58	-0.55	-0.68	-0.25	-0.62	0.03	0.28
20	ASN	O	-1.84	-0.50	0.82	0.91	-1.03	-0.95	-0.45	-0.47	-0.03	-0.57	-0.26	103	MET	CE	0.45	-0.43	-0.83	0.04	-0.35	-0.40	-0.15	-0.20	-0.82	-0.05	0.07
21	ASN	CB	1.02	-0.66	0.08	-0.82	0.03	-0.21	-0.04	0.02	-0.59	-0.18	-0.18	104	PHE	N	2.35	0.84	-2.34	-1.87	0.79	0.80	1.36	1.19	0.95	1.05	0.99
22	ASN	CG	-0.03	-0.68	1.01	-0.74	-0.77	-0.75	-0.55	-0.19	-0.94	-0.35	-0.34	105	PHE	CA	0.85	-0.26	0.78	-0.94	-0.65	-0.51	-0.26	0.12	-0.59	-0.11	-0.26
23	ASN	OD1	-0.73	-0.59	0.18	0.23	-0.68	-0.38	-0.71	-0.81	-0.32	-0.79	-0.61	106	PHE	C	-2.45	0.08	1.37	0.48	-0.30	-0.40	-0.12	0.03	0.48	0.10	-0.20
24	ASN	ND2	0.37	-0.25	-0.30	-0.61	-0.35	-0.27	-0.27	-0.01	-0.12	-0.23	-0.05	107	PHE	O	-1.79	-0.91	0.74	0.50	-0.87	-0.59	0.31	-0.25	0.55	-0.29	-0.20
25	ASP	N	1.57	1.28	-2.44	-1.99	0.09	0.68	1.11	0.60	0.56	0.05	0.01	108	PHE	CB	0.78	-0.82	0.29	-0.81	-0.39	-0.33	-0.29	-0.10	-0.74	-0.07	-0.04
26	ASP	CA	0.69	-0.28	0.64	-0.53	-1.35	-0.77	-1.02	-0.95	-1.26	-1.28	-1.12	109	PHE	CG	1.28	-0.52	0.27	0.53	-0.84	-1.09	-1.01	-0.50	-1.35	-0.30	-0.11
27	ASP	C	-2.74	1.05	2.55	0.71	0.09	-0.43	-0.17	-0.32	-0.48	-0.59	-0.34	110	PHE	CD1	0.82	-0.73	-1.04	-0.24	-0.44	-0.63	-0.47	-0.24	-0.81	-0.09	0.00
28	ASP	O	-2.24	-0.57	1.05	0.96	-1.35	-1.05	-0.43	-0.52	-0.14	-0.53	-0.56	111	PHE	CD2	0.41	-0.72	-0.95	-0.30	-0.53	-0.44	-0.43	-0.29	-1.06	-0.09	-0.07
29	ASP	CB	0.37	-0.66	0.46	-0.86	-0.46	-0.56	-0.37	-0.45	-0.74	-0.65	-0.62	112	PHE	CE1	0.45	-0.60	-0.84	-0.03	-0.86	-0.61	-0.52	-0.26	-1.00	-0.07	-0.03
30	ASP	CG	-0.53	-0.05	1.50	-0.99	-1.22	-1.02	-0.98	-1.45	-0.44	-1.06	-1.29	113	PHE	CE2	0.58	-0.82	-0.89	0.02	-0.76	-0.58	-0.60	-0.24	-0.70	0.09	0.09
31	ASP	OD1	-1.31	-0.28	0.48	0.56	-0.98	-0.83	-0.94	-2.00	0.02	-0.49	-1.66	114	PHE	CZ	0.21	-0.88	-0.69	0.27	-0.74	-0.61	-0.73	-0.23	-0.98	-0.04	0.02
32	ASP	OD2	-0.82	-0.39	0.90	0.80	-0.76	-0.58	-0.85	-1.82	-0.16	-1.32	-1.61	115	PRO	N	1.66	0.00	-1.29	-1.40	0.52	-0.08	0.26	-0.18	-0.82	-0.26	-0.21
33	CYS	N	2.59	0.41	-2.25	-1.67	0.93	1.27	1.16	1.04	1.51	0.73	1.12	116	PRO	CA	1.82	-0.48	0.18	-0.68	-0.67	-0.56	-0.42	-0.38	-1.12	-0.66	-0.45
34	CYS	CA	0.52	-0.26	1.02	-1.05	-1.10	-0.07	-0.21	-0.52	0.08	-0.15	0.22	117	PRO	C	-2.33	1.50	2.77	1.84	0.22	-0.39	-0.62	-0.13	-0.32	-0.49	-0.49
35	CYS	C	-2.27	0.69	1.40	0.18	0.11	-0.49	-0.15	0.34	0.77	-0.08	-0.31	118	PRO	O	-1.69	-0.31	0.37	1.12	-0.81	-0.87	-0.72	-0.69	0.17	-0.72	-0.60
36	CYS	O	-1.60	-1.09	0.51	0.30	-0.65	-0.57	-0.36	-0.37	-0.21	-0.47	-0.38	119	PRO	CB	0.37	0.08	-0.48	0.04	-0.06	-0.38	-0.33	-0.18	-0.82	-0.27	-0.18
37	CYS	CB	0.68	-0.71	-0.73	-0.68	-0.43	-0.57	-0.20	-0.38	-0.49	0.28	0.24	120	PRO	CG	1.27	-0.25	-0.41	-0.24	-0.24	-0.18	-0.03	-0.18	-0.98	-0.17	-0.30
38	CYS	SG	0.02	-0.86	-0.81	-0.01	-0.62	-0.47	-0.12	-0.01	-0.59	0.29	0.31	121	PRO	CD	1.30	0.15	-1.61	-1.11	0.07	0.13	-0.04	0.03	-0.53	-0.20	-0.29
39	GLN	N	1.56	1.19	-2.61	-2.12	1.18	0.97	1.26	1.53	1.05	0.64	1.07	122	SER	N	1.48	1.11	-2.21	-1.68	0.60	0.44	0.70	1.24	0.64	0.40	0.68
40	GLN	CA	1.70	-0.59	0.61	-0.77	-1.10	-0.47	-0.77	-0.35	-1.15	-0.63	-0.37	123	SER	CA	0.84	-0.38	1.21	-0.43	-0.56	-0.43	-0.35	-0.36	-0.91	-0.56	-0.43
41	GLN	C	-2.48	1.14	2.38	0.61	-0.01	-0.10	0.14	0.01	-0.53	-0.27	-0.02	124	SER	C	-2.41	0.88	2.98	1.03	0.02	-0.49	-0.44	-0.22	-0.70	-0.69	-0.21
42	GLN	O	-2.03	-0.67	0.85	0.67	-1.19	-0.83	-0.25	-0.12	0.19	-0.15	0.00	125	SER	O	-1.90	-0.67	0.63	0.52	-0.91	-0.88	-0.54	-0.58	0.28	-0.50	-0.37
43	GLN	CB	0.66	-1.																							

Table 3. (continued)

		17	18	19	20	21	22	23	24		17	18	19	20	21	22	23	24			
		ASN N	ASN CA	ASN C	ASN O	ASN CB	ASN CG	ASN OD1	ASN ND2		ASN N	ASN CA	ASN C	ASN O	ASN CB	ASN CG	ASN OD1	ASN ND2			
0	SAS	SAS	1.80	1.16	1.76	0.92	0.70	0.87	0.37	0.34	83	LEU	CB	1.08	-0.78	0.68	-0.91	-0.08	-0.67	-0.28	0.01
1	ALA	N	1.72	0.68	-2.27	-1.71	0.81	0.00	-0.75	0.23	84	LEU	CG	0.55	-0.33	-0.34	-0.82	-0.17	-0.52	0.05	0.10
2	ALA	CA	0.51	-0.15	0.10	-0.29	-0.70	-0.41	-0.38	-0.42	85	LEU	CD1	0.75	-0.66	-0.63	0.21	-0.35	-0.44	0.19	0.21
3	ALA	C	-2.39	0.99	2.06	1.04	0.53	0.60	0.44	-0.06	86	LEU	CD2	0.80	-0.48	-0.30	0.30	-0.32	-0.53	0.27	0.22
4	ALA	O	-1.73	-0.54	0.28	0.85	-0.81	-0.32	0.41	-0.35	87	LYS	N	1.88	0.52	-2.49	-1.95	1.10	0.26	-0.80	0.54
5	ALA	CB	0.86	-0.49	-0.09	-0.57	-0.05	-0.46	-0.30	-0.09	88	LYS	CA	1.00	-0.27	0.84	-0.63	-0.51	-0.36	-0.51	-0.30
6	ARG	N	1.44	0.67	-2.34	-1.84	0.99	-0.07	-0.71	0.34	89	LYS	C	-2.43	0.96	2.78	0.65	0.09	0.06	0.25	-0.39
7	ARG	CA	0.75	-0.51	0.00	-0.48	-0.67	-0.67	-0.58	-0.27	90	LYS	O	-1.73	-0.73	0.54	0.90	-0.78	-0.80	0.36	-0.36
8	ARG	C	-2.37	0.37	1.66	0.82	0.08	1.01	0.20	-0.29	91	LYS	CB	0.89	-1.11	0.09	-0.97	0.03	-0.79	-0.57	-0.20
9	ARG	O	-1.81	-0.81	0.33	0.91	-0.83	-0.75	0.26	-0.59	92	LYS	CG	1.10	-0.66	-0.57	-0.90	-0.06	-0.88	-0.43	-0.18
10	ARG	CB	0.74	-1.28	0.01	-1.03	0.03	-0.76	-0.68	-0.37	93	LYS	CD	1.30	-0.75	-0.20	-0.13	0.07	-0.52	-0.57	-0.30
11	ARG	CG	0.72	-0.68	-0.58	-0.94	-0.21	-0.72	-0.40	-0.28	94	LYS	CE	1.37	-0.38	-0.12	-0.16	0.15	-0.35	-0.64	-0.19
12	ARG	CD	1.25	-0.89	-0.47	-0.46	-0.03	-0.53	-0.74	-0.30	95	LYS	NZ	1.68	-0.14	0.44	-0.32	0.54	0.36	-0.61	0.08
13	ARG	NE	1.53	-0.81	-0.30	-0.49	0.03	-0.20	-0.81	-0.01	96	MET	N	1.84	0.36	-2.33	-1.60	0.97	0.97	-0.79	0.83
14	ARG	CG	1.77	-0.67	-0.39	-0.04	-0.60	-0.93	-0.30	-0.11	97	MET	CA	1.05	-0.07	1.27	-0.60	-0.43	-0.39	-0.33	-0.26
15	ARG	NH1	0.48	-0.64	-0.45	-0.58	-0.16	-0.36	-0.80	-0.23	98	MET	C	-2.45	1.77	1.32	0.76	0.10	-0.11	0.74	-0.16
16	ARG	NH2	0.74	-0.57	-0.28	-0.29	-0.16	-0.35	-0.63	-0.05	99	MET	O	-1.53	-0.99	0.40	0.81	-0.65	-0.13	0.62	-0.11
17	ASN	N	1.58	0.53	-2.39	-1.88	0.58	-0.09	-1.14	0.17	100	MET	CB	0.84	-0.69	0.57	-0.67	0.07	-0.10	-0.13	0.10
18	ASN	CA	0.53	-0.31	0.65	-0.96	-0.68	-0.81	-0.78	-0.66	101	MET	CG	0.32	-0.62	-0.32	-0.49	-0.27	-0.73	-0.24	-0.10
19	ASN	C	-2.36	0.66	1.49	0.33	0.13	-0.61	-0.15	-0.30	102	MET	SD	0.35	-0.62	-0.69	0.53	-0.44	-0.87	0.36	-0.09
20	ASN	O	-1.89	-0.98	0.33	0.53	-0.74	-0.72	0.09	-0.44	103	MET	CE	0.71	-0.64	-0.73	-0.01	-0.45	-0.75	-0.18	0.00
21	ASN	CB	0.60	-0.67	0.14	-0.74	0.07	-0.67	-0.76	-0.48	104	PHE	N	1.61	0.25	-2.43	-1.81	0.66	0.39	-0.88	0.41
22	ASN	CG	-0.06	-0.81	-0.61	-0.71	-0.68	-1.30	-0.29	-0.50	105	PHE	CA	0.38	-0.25	0.02	-1.17	-0.48	-0.06	-0.32	-0.21
23	ASN	OD1	-1.17	-0.80	-0.18	0.06	-0.77	-0.29	-0.09	-0.72	106	PHE	C	-2.65	0.12	1.43	0.58	0.09	-0.03	-0.31	-0.37
24	ASN	ND2	0.19	0.65	-0.31	-0.47	-0.47	-0.51	-0.73	-0.42	107	PHE	O	-1.85	-1.00	0.23	0.72	-0.72	-0.33	0.30	-0.54
25	ASP	N	1.28	0.57	-2.54	-2.02	0.17	-0.44	-1.28	-0.18	108	PHE	CB	0.64	-0.58	-0.01	-0.90	0.00	-0.42	-0.32	-0.06
26	ASP	CA	0.39	-0.27	1.14	-0.72	-1.13	-0.68	-0.52	-0.93	109	PHE	CG	1.21	-0.28	0.39	0.55	-0.76	-0.63	0.43	0.08
27	ASP	C	-2.76	0.09	2.15	0.35	0.16	-0.65	0.14	-0.41	110	PHE	CD1	0.64	-0.51	-0.95	-0.44	-0.42	-0.68	-0.05	0.02
28	ASP	O	-2.06	-0.74	0.00	0.64	-1.02	-0.77	0.29	-0.59	111	PHE	CD2	0.19	-0.77	-0.80	-0.22	-0.55	-0.69	0.02	-0.06
29	ASP	CB	0.03	-0.49	0.40	-0.71	-0.39	-0.64	-0.74	-0.70	112	PHE	CE1	0.49	-0.55	-0.74	0.06	-0.50	-0.60	0.09	-0.07
30	ASP	CG	-0.57	-0.38	-0.05	-0.76	-1.30	-0.76	-0.35	-0.73	113	PHE	CE2	0.53	-0.61	-0.80	0.24	-0.65	-0.79	0.23	0.05
31	ASP	OD1	-1.52	-0.23	0.28	0.55	-1.04	0.08	0.06	-0.79	114	PHE	CZ	0.68	-0.56	-0.34	0.24	-0.45	-0.69	0.17	-0.11
32	ASP	OD2	-0.79	-0.30	0.48	0.73	-0.81	0.35	0.18	-0.76	115	PRO	N	2.25	0.26	-1.63	-1.53	0.40	-0.23	-0.36	-0.40
33	CYS	N	1.13	0.69	-2.37	-1.81	0.84	0.77	-0.84	0.38	116	PRO	CA	0.96	-0.70	0.29	-0.83	-0.33	-1.19	-0.93	-0.58
34	CYS	CA	0.80	0.31	-0.03	-0.77	-0.07	-0.73	-0.48	0.27	117	PRO	C	-2.66	0.25	0.89	0.57	0.26	0.03	0.05	-0.50
35	CYS	C	-2.33	0.34	0.66	-0.11	0.34	0.38	0.12	-0.14	118	PRO	O	-1.56	-0.33	0.45	0.65	-0.73	-0.25	0.27	-0.51
36	CYS	O	-1.62	-0.98	0.30	0.40	-0.57	0.21	0.17	-0.37	119	PRO	CB	0.31	-0.66	-0.34	-0.26	-0.15	-0.63	-0.49	-0.19
37	CYS	CB	0.63	-0.43	-0.38	-0.78	-0.07	-0.42	-0.24	0.05	120	PRO	CG	0.63	-0.54	-0.45	-0.28	-0.02	-0.34	-0.23	-0.11
38	CYS	SG	-0.24	-0.38	-0.56	-0.03	-0.17	-0.06	0.07	0.27	121	PRO	CD	1.05	-0.26	-1.50	-1.28	-0.01	-0.59	-0.16	-0.09
39	GLN	N	1.31	0.87	-2.51	-2.12	0.63	0.43	-0.99	0.34	122	SER	N	1.82	0.18	-2.28	-1.74	0.24	0.02	-1.01	-0.04
40	GLN	CA	0.69	-0.54	0.23	-0.61	-0.92	-0.35	-0.46	-0.69	123	SER	CA	0.79	-0.64	0.36	-0.55	-0.59	-0.30	-0.70	-0.62
41	GLN	C	-2.31	1.82	3.10	0.64	0.15	0.42	0.12	-0.33	124	SER	C	-2.40	0.26	1.32	0.44	-0.24	0.06	0.06	-0.30
42	GLN	O	-2.04	-0.58	0.98	0.73	-0.96	-1.20	0.27	-0.56	125	SER	O	-1.90	-0.71	-0.04	0.59	-0.95	-0.30	0.27	-0.57
43	GLN	CB	0.68	-0.53	1.01	-0.93	-0.38	-0.55	-0.65	-0.33	126	SER	CB	0.46	-0.65	-0.20	-0.72	-0.27	-0.41	-0.48	-0.31
44	GLN	CG	0.56	-0.44	-0.23	-1.09	-0.22	-0.63	-0.69	-0.61	127	SER	OG	-0.86	-0.71	-0.04	-0.47	-0.80	-0.42	-0.53	-0.60
45	GLN	CD	0.51	-0.69	-0.63	-0.11	-0.79	-1.00	-0.13	-0.66	128	THR	N	1.75	0.46	-2.21	-1.79	0.43	0.14	-1.15	-0.03
46	GLN	OE1	-0.54	-0.40	0.04	0.32	-0.64	-0.26	-0.09	-0.74	129	THR	CA	0.56	-0.68	0.28	-0.75	-0.70	-0.53	-0.50	-0.45
47	GLN	NE2	0.22	-0.71	-0.44	-0.54	-0.44	-0.45	-0.86	-0.48	130	THR	C	-2.51	0.58	0.84	0.62	-0.06	-0.08	0.10	-0.22
48	GLU	N	1.57	0.58	-2.44	-1.87	0.81	-0.18	-1.13	0.04	131	THR	O	-1.99	-0.98	0.08	0.57	-0.91	-0.91	0.19	-0.46
49	GLU	CA	1.09	-0.22	1.45	-0.22	-0.86	-0.18	-0.29	-0.55	132	THR	CB	0.55	-1.00	-0.10	-0.59	-0.48	-0.45	-0.78	-0.50
50	GLU	C	-2.53	1.33	1.34	0.91	0.17	1.00	0.30	-0.38	133	THR	OG1	-0.71	-0.71	0.07	-0.46	-0.78	-0.62	-0.61	-0.72
51	GLU	O	-2.11	-0.53	0.45	0.90	-0.99	-1.09	0.10	-0.52	134	THR	CG2	0.50	-0.76	-0.48	-0.33	-0.50	-0.73	-0.37	-0.49
52	GLU	CB	0.60	-0.58	0.40	-0.78	-0.25	-0.55	-0.60	-0.46	135	TRP	N	2.29	1.26	-2.56	-1.95	0.72	-0.20	-0.69	0.29
53	GLU	CG	0.79	0.04	0.03	-0.54	-0.18	-0.64	-0.28	-0.53	136	TRP	CA	0.08	-0.55	0.67	-0.87	-0.73	-0.08	-0.70	-0.42
54	GLU	CD	0.64	-0.46	0.11	0.31	-0.65	0.22	0.12	-0.59	137	TRP	C	-2.66	0.49	3.10	1.44	-0.19	-0.69	0.61	-0.33
55	GLU	OE1	-0.16	0.01	0.85	1.03	-0.21	0.63	0.22	-0.43	138	TRP	O	-2.09	-0.83	0.63	0.48	-1.19	-0.31	0.20	-0.63
56	GLU	OE2	-0.13	-0.07	0.74	0.95	-0.33	0.46	0.11	-0.42											

Table 3. (continued)

		25	26	27	28	29	30	31	32		25	26	27	28	29	30	31	32			
		ASP N	ASP CA	ASP C	ASP O	ASP CB	ASP CG	ASP OD1	ASP OD2		ASP N	ASP CA	ASP C	ASP O	ASP CB	ASP CG	ASP OD1	ASP OD2			
0	SAS	SAS	1.60	0.93	1.88	0.92	0.51	0.75	0.31	0.16	83	LEU	CB	0.66	-0.79	0.11	-0.82	-0.11	0.03	0.33	0.54
1	ALA	N	1.68	0.57	-2.45	-1.93	0.61	-0.30	-0.80	0.01	84	LEU	CG	0.65	-0.29	-0.17	-0.85	-0.17	-0.21	0.64	0.70
2	ALA	CA	1.08	0.12	0.80	-0.33	-0.60	-0.13	0.28	-0.24	85	LEU	CD1	0.79	-0.57	-0.49	0.37	-0.25	0.06	0.60	0.74
3	ALA	C	-2.48	1.44	3.33	1.01	0.72	0.58	1.04	0.89	86	LEU	CD2	1.01	-0.29	-0.29	0.46	-0.36	-0.09	0.80	0.57
4	ALA	O	-1.71	-0.29	1.14	1.19	-0.60	-0.19	0.99	1.10	87	LYS	N	0.92	0.41	-2.78	-2.22	0.27	-0.58	-1.19	-0.55
5	ALA	CB	0.60	-0.69	-0.22	-0.75	-0.13	-0.41	-0.04	0.08	88	LYS	CA	0.65	-0.80	0.11	-0.82	-0.64	-0.33	-0.45	-0.46
6	ARG	N	1.57	0.68	-2.77	-2.23	0.33	-0.57	-1.28	-0.79	89	LYS	C	-2.25	0.99	0.49	0.45	0.34	0.54	0.15	0.37
7	ARG	CA	1.27	-0.29	1.03	-0.54	-0.67	-0.04	-0.28	-0.45	90	LYS	O	-2.27	-0.50	0.41	0.77	-1.06	-1.41	0.22	0.36
8	ARG	C	-2.41	0.64	2.55	1.07	0.47	1.50	0.50	0.88	91	LYS	CB	0.25	-1.42	0.15	-1.29	-0.65	-1.10	-0.71	-0.49
9	ARG	O	-2.00	-0.55	0.71	0.96	-0.86	-1.00	0.59	0.63	92	LYS	CG	0.55	-0.99	-0.40	-1.11	-0.71	-1.29	-0.74	-0.75
10	ARG	CB	0.11	-1.34	0.10	-1.34	-0.47	-1.21	-0.97	-0.78	93	LYS	CD	0.71	-1.34	-0.37	-0.37	-0.69	-1.40	-1.05	-0.99
11	ARG	CG	0.68	-0.76	-0.41	-1.04	-0.56	-1.02	-0.84	-0.63	94	LYS	CE	0.85	-0.77	-0.06	-0.40	-0.39	-0.99	-1.03	-1.02
12	ARG	CD	1.11	-1.01	-0.16	-0.45	-0.37	-0.96	-0.99	-0.88	95	LYS	NZ	0.99	-0.32	0.38	-0.33	-0.16	-0.75	-1.42	-1.37
13	ARG	NE	0.62	-0.94	-0.33	-0.54	-0.44	-1.46	-1.97	-1.79	96	MET	N	1.27	0.99	-2.35	-1.62	1.01	0.10	-0.52	-0.06
14	ARG	CZ	0.60	-1.27	-0.47	-0.15	-0.74	-0.43	0.00	-0.16	97	MET	CA	0.35	0.22	0.94	-0.57	-0.61	-0.11	0.43	-0.59
15	ARG	NH1	0.07	-1.29	-0.60	-0.56	-0.63	-1.07	-1.49	-1.31	98	MET	C	-2.67	0.14	0.30	1.01	0.17	0.63	0.65	0.80
16	ARG	NH2	0.03	-1.12	-0.35	-0.58	-0.60	-1.30	-1.65	-1.61	99	MET	O	-1.54	-0.63	0.50	1.12	-0.54	-0.43	0.81	1.05
17	ASN	N	1.28	0.38	-2.79	-2.05	0.00	-0.60	-1.48	-0.76	100	MET	CB	0.79	-0.71	0.28	-0.69	-0.10	-0.23	-0.02	0.19
18	ASN	CA	0.56	-0.28	0.11	-0.72	-0.50	-0.37	-0.22	-0.32	101	MET	CG	0.62	-0.46	-0.31	-0.56	-0.28	-0.15	0.54	0.46
19	ASN	C	-2.51	1.15	2.15	0.00	0.38	-0.04	0.31	0.50	102	MET	SD	0.29	-0.19	0.42	0.45	-0.29	0.42	1.26	1.23
20	ASN	O	-2.03	-0.73	0.35	0.64	-0.72	-0.77	0.57	0.76	103	MET	CE	0.52	-0.31	-0.61	0.09	-0.33	-0.12	0.62	0.50
21	ASN	CB	0.18	-1.13	0.18	-1.02	-0.39	-1.28	-1.04	-0.85	104	PHE	N	1.97	0.90	-2.45	-1.85	0.60	0.10	-0.39	-0.12
22	ASN	CG	-0.41	-0.67	-0.66	-0.75	-0.64	-0.76	0.08	0.34	105	PHE	CA	0.68	0.62	0.69	-0.50	-0.21	0.42	0.25	-0.43
23	ASN	OD1	-1.31	-0.52	0.13	0.27	-0.72	-0.35	0.06	0.19	106	PHE	C	-2.68	0.66	1.85	0.16	0.76	0.86	0.41	0.74
24	ASN	ND2	-0.16	-0.91	-0.42	-0.61	-0.68	-0.73	-0.81	-0.78	107	PHE	O	-1.61	-0.75	0.56	0.69	-0.43	0.50	0.94	1.30
25	ASP	N	1.88	1.11	-2.50	-1.79	0.22	-0.24	-0.86	-0.28	108	PHE	CB	0.44	-0.83	0.12	-0.87	-0.14	-0.21	0.09	0.12
26	ASP	CA	1.11	0.41	1.54	-0.15	-0.55	0.11	0.12	0.13	109	PHE	CG	1.51	0.66	0.52	0.34	-0.16	0.77	1.95	1.54
27	ASP	C	-2.47	1.58	3.28	0.85	0.73	1.40	0.96	0.87	110	PHE	CD1	0.67	-0.27	-0.76	-0.24	-0.30	-0.33	0.64	0.56
28	ASP	O	-1.80	-0.17	0.86	0.91	-0.65	-0.43	0.88	0.88	111	PHE	CD2	0.52	-0.37	0.62	-0.06	-0.30	-0.04	0.72	0.63
29	ASP	CB	0.25	-0.54	0.74	-0.65	-0.27	-0.30	-0.26	-0.13	112	PHE	CE1	0.68	-0.37	-0.51	0.29	-0.47	-0.10	0.75	0.72
30	ASP	CG	-0.21	0.09	1.40	-0.42	-0.30	0.13	-0.04	0.41	113	PHE	CE2	0.51	-0.28	-0.30	0.45	-0.39	0.00	0.80	0.78
31	ASP	OD1	-0.89	0.10	0.96	0.86	-0.23	-0.04	0.18	0.30	114	PHE	CZ	0.87	-0.28	-0.41	0.45	-0.18	-0.11	0.74	0.86
32	ASP	OD2	-0.29	0.19	0.88	0.85	-0.06	0.42	0.29	0.41	115	PRO	N	1.84	0.19	-1.63	-1.56	0.05	-0.23	-0.17	0.32
33	CYS	N	1.64	1.02	-2.26	-1.65	0.69	-0.58	-0.36	-0.20	116	PRO	CA	1.37	-0.41	0.19	-0.64	-0.25	-0.78	-0.29	-0.48
34	CYS	CA	0.69	-0.58	-0.01	-0.83	-0.63	-0.20	0.04	-0.10	117	PRO	C	-2.83	1.15	2.69	0.78	0.51	0.75	0.73	0.96
35	CYS	C	-2.37	-0.18	3.27	0.35	0.10	0.91	0.73	1.16	118	PRO	O	-1.48	0.27	1.57	1.06	-0.23	0.13	0.77	0.88
36	CYS	O	-1.75	-0.60	0.43	0.59	-0.57	-0.22	0.92	0.98	119	PRO	CB	0.19	-0.28	-0.09	-0.12	-0.44	-0.41	-0.34	0.05
37	CYS	CB	1.02	-0.41	-0.39	-0.67	-0.07	-0.09	0.11	0.18	120	PRO	CG	0.95	-0.33	-0.29	-0.26	-0.27	-0.38	0.30	0.09
38	CYS	SG	-0.06	-0.28	-0.02	0.30	-0.30	-0.09	0.85	0.80	121	PRO	CD	1.24	-0.40	-1.41	-1.12	0.21	-0.43	0.14	0.30
39	GLN	N	1.83	0.83	-2.61	-2.03	0.79	-0.37	-0.76	-0.46	122	SER	N	1.82	0.62	-2.63	-1.86	-0.05	-0.71	-1.51	-0.91
40	GLN	CA	1.20	-0.23	1.07	-0.28	-0.67	-0.59	0.17	0.53	123	SER	CA	0.62	-0.60	0.44	-0.60	-0.44	-0.64	-0.43	-0.50
41	GLN	C	-2.36	1.05	1.78	0.40	0.58	0.30	0.88	0.28	124	SER	C	-2.64	0.52	0.95	0.71	0.29	0.57	0.42	0.46
42	GLN	O	-2.05	-0.04	1.03	1.02	-0.88	-1.34	0.73	0.53	125	SER	O	-1.80	-0.28	0.45	0.77	-0.65	-0.55	0.64	0.90
43	GLN	CB	0.46	-1.05	0.94	-1.08	-0.05	-0.55	-0.27	-0.16	126	SER	CB	0.20	-0.66	-0.01	-0.69	-0.30	-0.80	-0.73	-0.64
44	GLN	CG	0.83	-0.36	-0.33	-0.90	-0.08	-0.71	-0.44	-0.76	127	SER	OG	-1.03	-0.64	0.06	-0.41	-0.73	-0.92	-0.94	-0.94
45	GLN	CD	0.94	-0.77	-0.78	0.43	-0.38	0.28	0.54	0.60	128	THR	N	1.28	0.97	-2.42	-1.94	-0.02	-0.48	-1.41	-1.04
46	GLN	OE1	-0.30	-0.38	0.10	0.38	-0.25	0.13	-0.05	0.08	129	THR	CA	0.72	-0.29	1.26	-0.47	-0.34	-0.07	0.01	-0.21
47	GLN	NE2	0.37	-0.62	-0.15	-0.28	-0.41	-0.72	-0.50	-0.50	130	THR	C	-2.63	0.28	2.13	0.90	0.17	0.29	0.54	0.46
48	GLU	N	1.34	1.03	-2.60	-1.94	0.69	-0.08	-0.86	-0.14	131	THR	O	-1.89	-0.41	0.52	0.63	-0.64	-0.48	0.46	0.89
49	GLU	CA	1.19	0.05	1.11	0.00	-0.85	0.21	0.39	-0.17	132	THR	CB	-0.43	-0.97	0.09	-0.94	-0.56	-1.09	-0.88	-0.70
50	GLU	C	-2.44	1.76	2.23	1.09	0.91	1.28	1.07	0.75	133	THR	OG1	-1.09	-0.53	0.28	-0.56	-0.77	-0.97	-0.92	-0.83
51	GLU	O	-1.78	0.17	1.01	1.16	-0.74	-0.53	0.93	0.85	134	THR	CG2	0.24	-0.28	-0.44	-0.22	-0.40	-0.56	-0.02	-0.24
52	GLU	CB	0.35	-0.73	1.17	-0.97	-0.10	-0.44	-0.30	0.01	135	TRP	N	2.14	0.64	-2.39	-1.93	0.98	-0.29	-0.66	-0.06
53	GLU	CG	0.78	-0.19	0.67	-0.34	0.19	0.00	0.30	0.20	136	TRP	CA	1.16	-0.09	1.12	-0.34	-0.33	0.82	0.33	0.02
54	GLU	CD	0.82	-0.51	0.11	0.71	-0.12	0.25	0.57	0.43	137	TRP	C	-2.70	1.52	1.02	0.53	0.48	0.74	0.63	0.89
55	GLU	OE1	0.21	-0.08	0.56	1.16	0.31	0.32	0.47	0.42	138	TRP	O	-1.58	-0.10	1.08	0.77	-0.35	0.17	1.11	1.19
56	GLU	OE2	0.22	-0.16	1.01	1.31	0.24	0.58	0.57	0.55											

Table 3. (continued)

		33 CYS N	34 CYS CA	35 CYS C	36 CYS O	37 CYS CB	38 CYS SG			33 CYS N	34 CYS CA	35 CYS C	36 CYS O	37 CYS CB	38 CYS SG	
0	SAS	2.27	2.17	2.25	1.33	1.94	2.02	83	LEU	CB	0.76	-0.93	0.02	-0.99	-0.80	-0.85
1	ALA N	2.09	0.83	-2.23	-1.93	0.22	-0.28	84	LEU	CG	0.61	-0.40	-0.47	-1.16	-0.51	-0.99
2	ALA CA	1.37	-0.33	0.67	-0.67	-0.59	-0.65	85	LEU	CD1	0.68	-0.59	-0.77	-0.11	-0.83	-0.89
3	ALA C	-2.50	0.65	1.70	0.76	-0.26	-0.79	86	LEU	CD2	0.60	-0.74	-0.48	0.05	-0.84	-0.87
4	ALA O	-1.92	-0.50	0.45	0.28	-1.02	-0.13	87	LYS N		1.39	1.07	-2.20	-1.54	1.02	0.44
5	ALA CB	0.22	-0.80	-0.43	-0.70	-0.65	-0.67	88	LYS CA		0.94	-0.13	1.79	-0.70	-0.24	-0.01
6	ARG N	2.59	0.54	-2.30	-1.60	0.66	-0.02	89	LYS C		-2.08	0.58	3.77	1.07	-0.14	-0.61
7	ARG CA	0.43	-0.25	0.66	-1.08	-0.71	-0.86	90	LYS O		-1.51	-0.50	0.80	0.31	-0.53	0.19
8	ARG C	-2.22	1.07	1.40	0.52	-0.73	-0.82	91	LYS CB		1.22	-0.12	0.16	-0.38	0.47	-0.21
9	ARG O	-1.68	-1.09	0.18	0.30	-0.69	0.03	92	LYS CG		1.09	0.10	0.05	-0.17	0.32	-0.18
10	ARG CB	0.95	-1.09	0.09	-0.64	-0.42	-0.62	93	LYS CD		1.51	0.10	-0.06	0.15	0.55	0.27
11	ARG CG	1.27	-0.05	-0.47	-0.57	-0.55	-0.47	94	LYS CE		1.44	0.48	0.36	0.01	0.68	0.22
12	ARG CD	1.19	-0.18	-0.14	-0.36	-0.19	-0.12	95	LYS NZ		1.62	0.74	1.05	0.15	1.34	0.99
13	ARG NE	1.06	-0.52	0.33	-0.37	-0.38	-0.01	96	MET N		1.13	0.76	-2.02	-2.23	0.90	0.15
14	ARG CZ	1.55	0.08	-0.77	-0.17	-0.50	-0.59	97	MET CA		1.63	-0.80	0.09	-1.31	-0.81	-0.85
15	ARG NH1	0.76	-0.12	-0.09	-0.49	0.31	0.30	98	MET C		-2.38	0.71	4.00	0.43	-0.07	-0.95
16	ARG NH2	1.14	0.25	-0.32	-0.40	0.25	0.31	99	MET O		-2.35	-0.40	0.99	0.28	-0.95	-0.67
17	ASN N	1.13	0.80	-2.36	-1.62	0.62	-0.28	100	MET CB		0.63	-0.65	-0.27	-1.13	-0.77	-0.82
18	ASN CA	0.68	0.32	0.31	-0.97	-0.43	-0.39	101	MET CG		-0.08	-0.73	-0.80	-1.13	-0.99	-1.06
19	ASN C	-2.34	-0.03	0.66	0.31	-0.39	-0.57	102	MET SD		0.32	-0.92	-1.09	0.38	-1.15	-0.73
20	ASN O	-1.81	-0.81	-0.12	0.39	-0.80	-0.01	103	MET CE		0.15	-0.78	-1.03	-0.46	-1.00	-0.84
21	ASN CB	0.86	-0.05	0.33	-0.59	-0.06	-0.17	104	PHE N		1.11	0.68	-1.94	-2.20	0.47	0.02
22	ASN CG	0.80	-0.74	0.37	0.21	-0.44	-0.07	105	PHE CA		0.52	-0.97	0.38	-1.30	-0.82	-0.83
23	ASN OD1	-0.87	-0.50	0.10	0.14	-0.25	0.09	106	PHE C		-2.15	-0.29	-0.09	0.39	-0.43	-0.57
24	ASN ND2	0.40	0.30	-0.15	-0.39	0.05	0.27	107	PHE O		-2.31	-1.27	0.14	0.12	-1.02	-0.24
25	ASP N	1.64	0.74	-2.40	-1.75	1.03	-0.10	108	PHE CB		0.60	-0.95	-0.28	-0.97	-0.78	-0.91
26	ASP CA	1.06	-0.57	-0.17	-0.56	-0.41	-0.28	109	PHE CG		1.19	-0.72	-0.74	-0.31	-1.50	-0.53
27	ASP C	-2.23	-0.01	3.27	0.46	-0.39	-0.02	110	PHE CD1		0.25	-0.96	-1.01	-0.51	-1.09	-0.79
28	ASP O	-1.66	-0.85	0.33	0.58	-0.68	0.31	111	PHE CD2		0.15	-0.84	-1.30	-0.87	-1.11	-0.82
29	ASP CB	0.72	-0.61	0.07	-0.56	-0.06	-0.30	112	PHE CE1		0.01	-0.78	-0.93	-0.17	-1.02	-0.81
30	ASP CG	-0.55	-0.20	0.91	-0.21	-0.11	-0.10	113	PHE CE2		0.29	-0.63	-0.90	-0.09	-1.13	-0.92
31	ASP OD1	-0.38	0.04	0.72	0.90	0.12	0.90	114	PHE CZ		0.33	-0.69	-0.74	0.00	-1.08	-0.84
32	ASP OD2	-0.24	-0.06	1.18	0.95	0.22	0.82	115	PRO N		2.43	0.15	-1.76	-1.46	0.37	-0.95
33	CYS N	0.27	-0.09	-1.94	-2.26	-1.05	-1.62	116	PRO CA		1.06	-0.69	0.12	-0.73	-0.36	-0.71
34	CYS CA	-0.11	-2.34	0.52	-1.32	-1.98	-2.69	117	PRO C		-2.59	-0.23	-0.05	0.60	-0.50	-0.64
35	CYS C	-1.91	0.53	2.07	0.67	-0.87	-1.96	118	PRO O		-1.64	-0.80	0.35	0.34	-0.75	-0.19
36	CYS O	-2.27	-1.35	0.69	-0.24	-1.04	-0.49	119	PRO CB		0.53	-0.35	-0.35	-0.10	-0.20	-0.42
37	CYS CB	-1.02	-1.96	-0.85	-1.06	-2.33	-2.40	120	PRO CG		0.64	-0.48	-0.20	-0.36	-0.38	-0.39
38	CYS SG	-1.58	-2.68	-1.92	-0.53	-2.41	-3.16	121	PRO CD		0.63	-0.43	-1.43	-1.07	-0.40	-0.58
39	GLN N	2.24	1.45	-2.35	-1.55	0.48	-0.01	122	SER N		1.17	0.72	-2.44	-1.68	0.28	-0.42
40	GLN CA	0.58	0.06	2.00	-0.98	-0.28	-0.31	123	SER CA		0.57	-0.51	1.41	-0.93	-0.42	-0.58
41	GLN C	-2.20	1.55	2.53	1.69	-0.01	-0.75	124	SER C		-2.16	1.35	0.57	0.80	-0.63	-0.90
42	GLN O	-1.42	-0.93	0.33	0.67	-0.37	0.03	125	SER O		-1.80	-1.02	-0.09	0.32	-0.83	-0.13
43	GLN CB	0.37	0.12	1.23	-0.59	-0.41	-0.33	126	SER CB		0.41	-0.35	0.31	-0.45	-0.15	-0.60
44	GLN CG	1.24	0.06	0.39	-0.41	-0.02	-0.53	127	SER OG		-0.40	-0.65	-0.22	-0.21	-0.38	0.25
45	GLN CD	0.18	-0.34	-0.08	0.72	-0.96	-0.65	128	THR N		0.99	0.46	-2.15	-1.86	0.14	-0.18
46	GLN OE1	0.12	-0.51	0.15	0.43	-0.15	0.41	129	THR CA		-0.20	-0.43	0.84	-1.42	-0.62	-0.34
47	GLN NE2	0.12	-0.22	-0.38	-0.49	-0.21	0.09	130	THR C		-2.15	0.66	2.69	-0.19	-0.69	-0.84
48	GLU N	1.83	1.86	-2.59	-1.65	0.56	0.31	131	THR O		-1.83	-1.35	0.29	0.53	-0.76	0.08
49	GLU CA	1.26	0.50	1.54	-0.86	-0.62	-0.49	132	THR CB		0.56	-0.24	0.01	-0.91	-0.59	-0.72
50	GLU C	-2.49	1.47	2.55	1.45	-0.02	-0.67	133	THR OG1		-0.34	-0.40	-0.26	-0.65	-0.53	-0.13
51	GLU O	-1.69	-0.54	0.84	0.53	-0.58	0.20	134	THR CG2		0.12	-0.17	-0.49	-0.27	-0.47	-0.30
52	GLU CB	1.18	0.21	0.82	-0.47	-0.13	-0.02	135	TRP N		0.94	1.70	-1.63	-2.12	0.33	-0.08
53	GLU CG	0.92	0.75	0.41	-0.15	0.40	-0.07	136	TRP CA		0.18	-0.89	1.03	-1.58	0.03	-0.78
54	GLU CD	0.80	-0.46	0.80	0.26	-0.17	0.11	137	TRP C		-2.14	1.27	4.00	0.46	-0.40	-0.49
55	GLU OE1	0.56	-0.37	0.43	0.91	0.07	0.84	138	TRP O		-2.22	-1.17	1.82	0.47	-0.78	-0.31
56	GLU OE2	-0.26	0.40	1.13	1.23	0.43	1.04	139	TRP CB		0.46	-0.49	-0.76	-1.28	-0.77	-0.56
57	GLY N	0.80	0.31	-2.14	-1.93	-0.25	-0.35	140	TRP CG		1.49	-0.57	0.26	1.38	-0.81	-0.51
58	GLY CA	0.46	-0.43	-0.06	-0.87	-0.24	-0.51	141	TRP CD1		0.21	-0.39	-0.57	-0.16	-0.54	-0.72
59	GLY C	-1.74	-0.74	0.23	0.10	-0.72	-0.90	142	TRP CD2		1.42	-1.23	-0.16	1.21	-1.33	-0.25
60	GLY O	-1.68	-0.95	-0.56	0.14	-0.69	0.17	143	TRP NE1		0.63	-0.50	0.03	-0.56	-0.46	-0.64
61	HIS N	1.26	0.57	-2.46	-1.98	-0.22	-0.78	144	TRP CE2		0.76	0.09	1.37	1.30	-1.56	-0.24
62	HIS CA	0.79	-0.50	-0.56	-0.55	-0.18	-0.94	145	TRP CE3		-0.57	-1.03	-1.90	-0.63	-0.78	-0.58
63	HIS C	-2.30	0.74	1.92	-0.06	-0.43	-0.29	146	TRP CZ2		-0.11	-0.36	-0.66	-0.20	-1.05	-0.44
64	HIS O	-1.71	-1.19	-0.44	0.24	-0.66	0.18	147	TRP CZ3		-0.58	-1.16	-1.13	-0.47	-1.01	-0.36
65	HIS CB	-0.18	-0.68	-0.09	-0.92	-0.48	-1.00	148	TRP CH2		0.27	-0.63	-0.90	0.12	-1.06	-0.23
66	HIS CG	0.46	-0.88	0.07	0.01	-0.48	-0.43	149	TYR N		1.09	1.21	-2.01	-2.03	0.53	-0.18
67	HIS CD	-0.21	-0.34	0.61	-0.23	-0.41	-0.92	150	TYR CA		0.40	-0.57	0.28	-1.53	-0.73	-0.78
68	HIS CD2	0.51	-0.12	0.17	-0.25	-0.45	-0.44	151	TYR C		-2.18	1.29	1.05	-0.06	-0.38	-0.94
69	HIS CE1	0.34	-0.40	-0.74	-0.48	-0.46	-0.28	152	TYR O		-2.21	-1.05	0.38	0.11	-0.88	0.00
70	HIS NE2	-0.06	-0.25	-0.85	-0.68	-0.09	-0.19	153	TYR CB		0.25	-0.65	-0.02	-0.84	-0.82	-0.95
71	ILE N	1.25	0.41	-2.15	-2.05	0.79	-0.13	154	TYR CG		0.76	-0.19	1.15	0.55	-1.03	-0.33
72	ILE CA	0.27	-0.64	1.00	-1.51	-0.70	-0.94	155	TYR CD1		-0.03	-0.78	-1.42	-0.84	-0.74	-0.56
73	ILE C	-2.30	0.43	4.00	0.70	0.33	-1.08	156	TYR CD2		0.60	-0.74</				

Table 3. (continued)

		39	40	41	42	43	44	45	46	47		39	40	41	42	43	44	45	46	47			
		GLN N	GLN CA	GLN C	GLN O	GLN CB	GLN CG	GLN CD	GLN OE1	GLN NE2		GLN N	GLN CA	GLN C	GLN O	GLN CB	GLN CG	GLN CD	GLN OE1	GLN NE2			
0	SAS	SAS	1.86	1.16	1.88	0.94	0.83	0.57	0.71	0.22	0.24	83	LEU	CB	1.03	-1.11	0.58	-1.07	-0.37	0.02	-0.59	-0.04	0.06
1	ALA	N	2.03	0.61	-2.59	-1.83	0.93	0.90	1.16	-0.05	0.72	84	LEU	CG	0.89	-0.35	-0.55	-0.97	-0.33	-0.09	-1.00	0.29	0.05
2	ALA	CA	0.98	0.15	1.15	-0.16	-0.79	-0.25	-0.89	-0.62	-0.41	85	LEU	CD1	0.67	-0.77	-0.69	0.20	-0.46	-0.43	-0.63	-0.11	0.08
3	ALA	C	-2.61	0.67	1.63	0.90	0.61	-0.36	-0.02	0.32	0.14	86	LEU	CD2	0.93	-0.44	-0.46	0.30	-0.50	-0.36	-0.77	-0.23	-0.10
4	ALA	O	-1.84	-0.54	1.08	1.05	-0.92	-0.72	0.32	0.42	-0.27	87	LYS	N	1.37	1.11	-2.60	-2.06	0.76	1.14	1.09	-0.15	0.66
5	ALA	CB	0.72	-1.06	-0.35	-0.71	-0.10	0.03	-0.39	0.00	0.06	88	LYS	CA	1.52	-0.44	0.57	-0.56	-1.03	-0.59	-1.45	-0.79	-0.74
6	ARG	N	1.56	1.71	-2.52	-2.02	0.63	0.98	1.25	-0.04	0.64	89	LYS	C	-2.58	0.94	3.65	0.99	0.61	-0.35	-0.04	0.24	-0.20
7	ARG	CA	1.20	-0.60	1.12	-0.65	-1.12	-0.36	-0.87	-1.00	-0.65	90	LYS	O	-2.05	-0.34	1.16	0.75	-1.15	0.82	0.46	0.69	-0.16
8	ARG	C	-2.58	0.63	2.38	0.84	0.52	-0.32	0.04	0.61	-0.19	91	LYS	CB	0.94	-1.19	0.09	-1.21	-0.39	-0.09	-0.76	-0.24	-0.31
9	ARG	O	-2.12	-0.81	0.61	0.68	-1.15	-0.95	0.25	0.50	-0.16	92	LYS	CG	0.97	-0.54	-0.49	-0.92	-0.44	-0.07	-0.95	0.48	-0.35
10	ARG	CB	1.19	-1.09	0.01	-1.20	-0.37	0.06	-0.70	-0.25	-0.23	93	LYS	CD	1.94	-0.66	-0.25	-0.21	-0.03	0.38	-0.82	-0.76	-0.41
11	ARG	CG	0.97	-0.46	-0.10	-0.84	-0.41	-0.51	-1.18	-0.61	-0.32	94	LYS	CE	1.80	-0.26	-0.10	-0.14	-0.17	0.50	-0.34	-0.77	-0.31
12	ARG	CD	1.29	-0.75	0.14	-0.29	-0.23	-0.06	-0.92	-0.96	-0.47	95	LYS	NZ	2.06	0.48	0.57	-0.02	0.45	0.71	0.32	-0.58	-0.01
13	ARG	NE	1.56	-0.35	0.00	-0.15	0.03	-0.10	-0.39	-0.94	-0.20	96	MET	N	1.22	1.13	-2.68	-1.76	0.45	0.75	1.28	0.00	0.46
14	ARG	CZ	1.09	-1.14	-0.53	0.18	-0.48	-0.75	-1.23	0.13	-0.22	97	MET	CA	1.61	0.18	0.59	-0.48	-0.79	-0.50	-0.70	-0.71	-0.27
15	ARG	NH1	0.67	-0.64	-0.28	-0.18	-0.46	-0.14	-0.50	-0.98	-0.13	98	MET	C	-2.81	0.07	1.94	0.32	0.18	-0.53	0.10	0.33	-0.22
16	ARG	NH2	1.10	-0.36	-0.03	-0.04	-0.23	-0.09	-0.43	-0.75	-0.12	99	MET	O	-1.78	-1.18	0.80	0.96	-0.70	-0.71	0.38	0.46	-0.19
17	ASN	N	1.31	0.68	-2.34	-2.03	0.66	0.54	0.48	-0.53	0.20	100	MET	CB	0.62	-1.18	-0.07	-0.90	-0.36	-0.22	-0.71	-0.21	-0.04
18	ASN	CA	0.87	-0.54	1.78	-0.57	-0.53	-0.45	-0.69	-0.40	-0.71	101	MET	CG	1.10	-0.41	-0.08	-0.42	-0.43	-0.27	-0.73	-0.28	-0.14
19	ASN	C	-2.48	0.23	3.10	0.97	1.02	-0.22	-0.63	0.06	-0.43	102	MET	SD	0.57	-0.90	-0.62	0.54	-0.82	-0.58	-0.82	0.21	-0.02
20	ASN	O	-2.12	-0.64	0.66	0.73	-0.92	-1.10	-0.12	0.35	-0.51	103	MET	CE	0.68	-0.60	-0.74	0.08	-0.69	-0.44	-0.64	-0.10	-0.11
21	ASN	CB	0.66	-0.91	0.17	-0.95	-0.38	-0.22	-0.78	-0.67	-0.46	104	PHE	N	2.28	1.06	-2.42	-1.78	1.21	1.27	1.90	0.04	0.65
22	ASN	CG	0.46	-0.34	0.41	-1.17	-0.57	-0.65	-1.01	-0.25	-0.45	105	PHE	CA	1.10	-0.47	1.41	-0.96	-0.62	-0.27	-0.43	-0.71	-0.16
23	ASN	OD1	-1.02	-0.46	0.11	0.24	-0.64	-0.67	-0.12	-0.08	-0.85	106	PHE	C	-2.50	0.94	1.45	0.65	0.61	-0.08	-0.07	0.34	-0.04
24	ASN	OD2	0.37	0.68	-0.34	-0.57	-0.32	-0.59	-0.67	-0.75	-0.48	107	PHE	O	-1.85	-0.98	0.54	0.77	-0.75	0.60	0.71	0.47	-0.11
25	ASP	N	1.83	1.20	-2.39	-2.03	0.44	0.81	0.90	-0.28	0.35	108	PHE	CB	1.07	-0.74	0.53	-0.71	-0.15	-0.02	-0.66	-0.17	-0.22
26	ASP	CA	0.87	-0.23	1.03	-0.04	-1.05	-0.37	-0.76	-0.39	-0.63	109	PHE	CG	1.85	-0.45	1.38	0.25	-0.43	-0.87	-1.56	0.19	0.17
27	ASP	C	-2.57	1.07	1.78	1.00	0.94	-0.33	-0.78	0.13	-0.14	110	PHE	CD1	0.58	-0.52	-1.05	-0.48	-0.58	-0.48	-0.91	-0.31	-0.12
28	ASP	O	-2.04	-0.29	0.41	1.02	-1.07	-0.91	0.45	0.41	-0.25	111	PHE	CD2	0.72	-0.65	0.73	-0.11	-0.44	-0.29	-0.86	-0.27	0.02
29	ASP	CB	0.81	-0.65	0.57	-0.87	-0.05	-0.08	-0.39	-0.31	-0.31	112	PHE	CE1	0.84	-0.58	-0.55	0.26	-0.78	-0.60	-0.87	-0.19	-0.19
30	ASP	CG	-0.34	-0.61	0.30	-1.32	-0.57	-0.72	0.27	0.12	-0.40	113	PHE	CE2	0.33	-0.57	-0.69	0.04	-0.75	-0.67	-0.76	0.02	-0.10
31	ASP	OD1	-0.79	0.17	0.88	0.71	-0.25	-0.39	0.55	-0.04	-0.71	114	PHE	CZ	0.73	-0.85	-0.44	0.09	-0.73	-0.51	-1.04	-0.09	-0.21
32	ASP	OD2	-0.48	-0.47	0.28	0.49	-0.12	-0.70	0.61	0.08	-0.48	115	PRO	N	2.44	1.22	-2.10	-1.26	0.35	-0.25	-0.21	-0.01	-0.39
33	CYS	N	2.24	0.54	-2.23	-1.42	0.33	1.21	0.14	0.13	0.10	116	PRO	CA	1.15	-0.53	0.13	-0.42	-0.85	-0.49	-1.17	-0.89	-0.49
34	CYS	CA	1.43	0.05	1.51	-0.89	0.10	0.04	-0.36	-0.48	-0.23	117	PRO	C	-2.66	0.29	0.64	0.15	0.26	-0.23	0.01	-0.12	-0.06
35	CYS	C	-2.31	2.03	2.53	0.32	1.24	0.41	-0.08	0.20	-0.36	118	PRO	O	-1.98	-0.06	0.40	0.71	-1.08	-0.89	0.69	0.14	-0.38
36	CYS	O	-1.55	-1.00	1.72	0.68	-0.61	-0.40	0.71	0.46	-0.47	119	PRO	CB	0.70	0.08	-0.55	0.03	-0.26	-0.31	-0.95	-0.39	-0.33
37	CYS	CB	0.50	-0.28	-0.01	-0.37	-0.42	-0.03	-0.94	-0.15	-0.22	120	PRO	CG	0.96	-0.35	-0.39	-0.19	-0.27	-0.02	-0.83	-0.38	-0.18
38	CYS	SG	0.03	-0.30	-0.74	0.04	-0.33	-0.54	-0.65	0.40	0.09	121	PRO	CD	1.17	-0.24	-1.67	-1.02	-0.20	0.06	-0.63	-0.31	-0.21
39	GLN	N	2.41	1.37	-2.54	-2.03	1.08	1.06	1.56	0.13	0.81	122	SER	N	1.66	0.77	-2.23	-1.69	0.05	0.58	0.50	-0.58	0.38
40	GLN	CA	1.39	-0.22	1.48	-0.24	-1.14	-0.59	-1.05	-0.62	-0.66	123	SER	CA	0.84	-0.48	0.73	-0.56	-0.70	-0.45	-0.81	-0.63	-0.62
41	GLN	C	-2.51	1.48	4.00	1.32	1.04	-0.19	0.10	0.16	-0.01	124	SER	C	-2.41	1.50	0.37	0.93	0.23	-0.50	0.05	0.06	-0.33
42	GLN	O	-2.04	-0.27	1.33	0.75	-1.15	-0.97	0.12	0.42	-0.27	125	SER	O	-1.99	-0.77	0.74	0.42	-1.04	-0.91	0.02	0.25	-0.47
43	GLN	CB	1.09	-1.13	1.03	-1.15	0.20	0.14	-0.15	0.09	-0.10	126	SER	CB	0.52	-0.58	-0.03	-0.62	-0.24	-0.22	-0.50	-0.34	-0.27
44	GLN	CG	1.10	-0.58	-0.19	-0.97	0.15	-0.13	-0.52	-0.53	-0.30	127	SER	OG	-0.64	-0.41	0.12	-0.24	-0.56	-0.51	-0.15	-0.36	-0.46
45	GLN	CD	1.60	-1.04	0.10	0.09	-0.14	-0.52	-0.62	-0.20	-0.42	128	THR	N	1.16	1.33	-2.15	-1.89	0.26	0.61	-0.07	-0.88	0.01
46	GLN	OE1	0.12	-0.59	0.13	0.39	0.15	-0.46	-0.21	0.05	-0.68	129	THR	CA	1.44	-0.79	1.18	-0.88	-0.73	-0.55	-0.68	-0.58	-0.55
47	GLN	NE2	0.83	-0.64	-0.02	-0.30	-0.08	-0.27	-0.44	-0.69	-0.18	130	THR	C	-2.58	1.21	2.70	1.02	0.28	-0.21	-0.33	0.05	-0.31
48	GLU	N	1.97	1.31	-2.61	-2.07	1.01	0.98	0.80	0.13	0.50	131	THR	O	-1.99	-0.62	1.56	0.88	-1.03	0.80	0.30	0.37	-0.42
49	GLU	CA	1.93	0.23	1.81	-0.21	-1.19	-0.61	-1.09	-0.76	-0.66	132	THR	CB	0.20	-0.87	0.83	-0.80	-0.31	-0.39	-0.54	-0.60	-0.44
50	GLU	C	-2.54	1.19	1.87	1.45	0.72	-0.05	-0.51	0.42	-0.24	133	THR	OG1	-0.77	-0.51	0.37	-0.44	-0.56	-0.86	-0.42	-0.44	-0.64
51	GLU																						

Table 3. (continued)

		48	49	50	51	52	53	54	55	56		48	49	50	51	52	53	54	55	56			
		GLU N	GLU CA	GLU C	GLU O	GLU CB	GLU CG	GLU CD	GLU OE1	GLU OE2		GLU N	GLU CA	GLU C	GLU O	GLU CB	GLU CG	GLU CD	GLU OE1	GLU OE2			
0	SAS	SAS	1.62	0.95	1.83	0.87	0.59	0.38	0.52	0.04	0.01	83	LEU	CB	1.23	-0.92	0.52	-0.91	-0.06	0.19	0.02	0.61	0.61
1	ALA	N	2.08	0.93	-2.65	-1.94	0.81	0.58	1.03	0.44	0.50	84	LEU	CG	0.75	-0.38	0.05	-0.93	0.09	-0.12	-0.11	0.54	0.70
2	ALA	CA	1.53	0.84	1.47	-0.19	-0.89	-0.14	-0.58	-0.48	0.16	85	LEU	CD1	0.75	-0.82	-0.59	0.36	-0.28	-0.41	-0.34	0.50	0.48
3	ALA	C	-2.64	0.97	3.36	1.18	0.76	0.27	-0.06	0.75	0.73	86	LEU	CD2	1.09	-0.40	-0.27	0.59	-0.30	-0.36	-0.49	0.15	0.36
4	ALA	O	-1.95	-0.27	1.10	1.21	-1.12	-0.37	0.88	1.18	1.27	87	LYS	N	1.25	0.87	-2.75	-2.39	0.41	0.65	0.73	0.15	0.05
5	ALA	CB	0.80	-0.89	-0.02	-0.83	0.01	0.01	-0.11	0.37	0.37	88	LYS	CA	1.06	-0.80	-0.07	-0.72	-1.29	-0.80	-1.25	-0.82	-0.39
6	ARG	N	1.57	1.01	-2.72	-2.37	0.67	0.58	1.16	0.22	0.07	89	LYS	C	-2.56	1.27	1.64	0.70	0.19	-0.27	-0.37	0.67	0.60
7	ARG	CA	1.56	-0.52	0.35	-0.55	-0.86	-0.53	-0.88	-0.68	-0.25	90	LYS	O	-2.34	-0.71	0.94	0.72	-1.27	-1.03	0.25	1.03	0.93
8	ARG	C	-2.60	0.22	-1.62	0.44	0.20	-0.40	-0.61	0.47	0.60	91	LYS	CB	0.32	-1.54	-0.15	-1.58	-0.80	-0.58	-0.98	-0.28	-0.36
9	ARG	O	-2.30	-0.70	0.27	0.63	-1.19	-0.94	0.34	1.08	0.77	92	LYS	CG	0.91	-0.86	-0.52	-1.22	-0.62	-0.88	-1.41	-0.56	-0.63
10	ARG	CB	0.64	-1.43	0.08	-1.48	-0.59	-0.61	-1.14	-0.48	-0.52	93	LYS	CD	1.29	-1.24	-0.44	-0.39	-0.56	-0.69	-1.69	-1.27	-1.10
11	ARG	CG	0.75	-0.64	-0.15	-1.11	-0.52	-0.84	-1.12	-0.68	-0.81	94	LYS	CE	1.20	-0.65	-0.17	-0.45	-0.38	-0.61	-1.40	-1.16	-1.27
12	ARG	CD	1.21	-0.85	-0.09	-0.30	-0.18	-0.55	-1.28	-1.05	-1.11	95	LYS	NZ	1.24	-0.16	-0.06	-0.28	-0.06	-0.23	-0.90	-1.41	-1.47
13	ARG	NE	1.24	-0.79	-0.26	-0.33	-0.23	-0.57	-1.55	-1.73	-1.79	96	MET	N	1.80	1.07	-2.65	-1.63	1.17	0.69	0.65	0.02	-0.15
14	ARG	CG	0.97	-1.27	-0.32	-0.01	-0.44	-0.57	-0.41	-0.20	-0.10	97	MET	CA	0.58	-0.04	1.23	-0.50	-0.83	-0.37	-0.99	-0.86	-0.38
15	ARG	NH1	0.74	-0.61	-0.45	-0.30	-0.47	-0.53	-1.04	-1.35	-1.28	98	MET	C	-2.77	1.88	3.89	1.65	0.46	-0.09	0.55	0.95	1.28
16	ARG	NH2	0.63	-0.55	-0.12	-0.31	-0.34	-0.47	-1.31	-1.45	-1.43	99	MET	O	-1.80	-0.95	0.33	1.09	-0.71	-0.52	0.21	1.53	1.27
17	ASN	N	1.57	1.08	-2.56	-2.10	0.58	0.76	0.60	-0.14	-0.11	100	MET	CB	1.12	-0.74	0.13	-0.72	-0.14	-0.05	-0.16	0.52	0.42
18	ASN	CA	0.57	-0.22	1.30	-0.53	-0.59	0.03	-0.46	-0.02	-0.07	101	MET	CG	1.11	-0.30	-0.07	-0.44	-0.20	-0.21	-0.25	0.13	0.37
19	ASN	C	-2.41	1.47	1.34	0.45	0.39	0.04	0.11	0.84	0.73	102	MET	SD	0.44	-0.70	-0.60	0.63	-0.41	-0.48	-0.03	1.02	0.86
20	ASN	O	-1.87	-0.23	0.94	0.90	-0.77	-0.53	0.33	1.07	0.99	103	MET	CE	0.96	-0.32	-0.64	0.27	-0.36	-0.43	-0.32	0.43	0.33
21	ASN	CB	0.83	-0.85	0.17	-1.00	-0.25	-0.19	-0.65	-0.28	-0.38	104	PHE	N	1.78	0.73	-2.68	-1.69	0.99	0.87	1.46	0.59	0.23
22	ASN	CG	-0.14	-0.20	0.99	-1.07	-0.56	-0.66	0.22	0.62	0.45	105	PHE	CA	1.38	-0.10	1.40	-0.67	-0.50	-0.13	-0.42	-0.22	-0.06
23	ASN	OD1	-1.16	-0.26	0.29	0.08	-0.59	-0.22	0.14	0.24	0.12	106	PHE	C	-2.64	1.99	2.00	0.50	1.19	0.44	1.01	1.41	1.05
24	ASN	OD2	0.06	-0.52	-0.39	-0.53	-0.44	-0.51	-0.60	-0.47	-0.44	107	PHE	O	-1.58	-1.04	1.24	0.92	-0.47	-0.13	0.63	1.54	1.33
25	ASP	N	1.34	1.17	-2.46	-1.77	0.33	0.75	0.79	0.22	0.24	108	PHE	CB	1.16	-0.51	0.39	-0.63	-0.13	0.00	-0.43	0.45	0.26
26	ASP	CA	1.03	0.05	1.76	0.17	-0.74	-0.20	-0.51	-0.11	-0.15	109	PHE	CG	2.17	0.02	0.16	0.86	-0.38	-0.52	-0.63	1.20	1.19
27	ASP	C	-2.57	1.10	2.23	1.02	1.17	0.69	0.11	0.60	1.02	110	PHE	CD1	0.90	-0.53	-0.45	0.01	-0.33	-0.27	-0.46	0.35	0.40
28	ASP	O	-1.95	-0.03	1.11	1.17	-0.97	-0.32	0.72	1.20	1.34	111	PHE	CD2	0.68	-0.54	-0.67	-0.14	-0.30	-0.23	-0.38	0.47	0.49
29	ASP	CB	0.71	-0.84	0.91	-0.74	-0.09	0.19	-0.13	0.26	0.15	112	PHE	CE1	0.66	-0.38	-0.57	0.34	-0.64	-0.30	-0.28	0.42	0.60
30	ASP	CG	-0.05	0.18	1.27	-0.51	-0.45	0.00	-0.24	0.33	0.58	113	PHE	CE2	0.78	-0.26	-0.16	0.53	-0.56	-0.43	-0.54	0.65	0.35
31	ASP	OD1	-0.89	0.38	1.08	0.91	-0.27	-0.36	0.57	0.48	0.58	114	PHE	CZ	0.67	-0.30	-0.38	0.54	-0.51	-0.37	-0.73	0.29	0.36
32	ASP	OD2	-0.15	-0.07	0.77	0.82	0.10	0.30	0.44	0.43	0.55	115	PRO	N	2.19	1.36	-2.28	-1.31	0.49	0.00	0.52	0.57	0.54
33	CYS	N	1.83	1.23	-2.52	-1.68	1.15	0.88	0.76	0.54	-0.22	116	PRO	CA	1.63	-0.28	0.06	-0.33	-0.33	-0.12	-0.71	-0.43	-0.10
34	CYS	CA	1.84	0.48	1.42	-0.51	0.19	0.72	-0.45	-0.35	0.44	117	PRO	C	-2.83	0.41	1.04	1.06	0.66	0.57	0.51	0.95	1.15
35	CYS	C	-2.56	1.57	2.55	0.82	0.85	0.43	0.80	0.46	1.16	118	PRO	O	-1.80	-0.07	0.90	1.38	-0.88	-0.26	0.52	0.92	0.90
36	CYS	O	-1.65	-0.88	1.48	0.54	-0.47	-0.15	0.28	0.95	1.27	119	PRO	CB	0.21	0.08	-0.42	-0.02	-0.53	-0.44	-0.83	-0.29	-0.18
37	CYS	CB	0.58	-0.62	-0.02	-0.57	-0.14	0.38	-0.16	0.03	0.43	120	PRO	CG	0.82	-0.50	-0.45	-0.29	-0.22	-0.28	-0.67	-0.01	-0.01
38	CYS	SG	0.34	-0.48	-0.65	0.18	-0.02	-0.08	0.11	0.82	0.98	121	PRO	CD	1.14	-0.07	-1.56	-1.10	-0.06	-0.06	-0.26	0.06	0.38
39	GLN	N	1.97	1.93	-2.58	-2.04	1.01	0.79	0.86	0.05	0.41	122	SER	N	1.23	1.10	-2.28	-1.75	-0.29	0.66	-0.04	-0.71	-0.27
40	GLN	CA	1.33	0.22	0.19	-0.50	-1.21	-0.55	-0.82	-0.59	-0.23	123	SER	CA	1.41	-0.37	1.10	-0.13	-0.49	0.07	-0.41	-0.43	-0.14
41	GLN	C	-2.58	1.86	1.87	1.05	0.77	0.52	-0.47	0.96	1.02	124	SER	C	-2.68	1.45	2.82	1.26	0.88	0.52	0.34	0.59	1.17
42	GLN	O	-2.08	-0.25	1.48	1.30	-1.06	-0.90	0.14	1.24	1.31	125	SER	O	-1.87	-0.38	0.76	0.81	-0.84	-0.26	0.75	1.24	1.24
43	GLN	CB	1.03	-1.19	0.72	-1.18	0.22	0.26	-0.32	0.10	0.12	126	SER	CB	0.40	-0.57	0.29	-0.65	-0.24	-0.38	-0.67	-0.32	-0.43
44	GLN	CG	0.99	-0.61	-0.05	-0.92	-0.02	-0.35	-0.92	-0.36	-0.52	127	SER	OG	-1.00	-0.39	0.72	-0.38	-0.76	0.70	-0.51	-0.59	-0.60
45	GLN	CD	0.83	-1.08	-0.51	-0.03	-0.37	-0.47	-0.45	0.41	0.54	128	THR	N	1.96	1.60	-2.41	-1.82	-0.34	0.46	0.18	-0.77	-0.26
46	GLN	OE1	0.11	-0.73	0.41	0.44	0.00	-0.13	0.14	0.31	0.18	129	THR	CA	1.44	-0.86	0.47	-0.43	-0.63	-0.22	-0.60	-0.51	-0.13
47	GLN	NE2	0.52	-0.65	-0.25	-0.16	-0.30	-0.52	-0.36	-0.37	-0.58	130	THR	C	-2.87	1.40	3.22	1.59	0.61	-0.07	0.21	1.10	1.00
48	GLU	N	2.19	1.92	-2.56	-1.87	1.08	1.04	0.99	0.71	0.92	131	THR	O	-2.02	-0.49	0.91	0.92	-0.87	-0.55	0.70	1.24	1.23
49	GLU	CA	1.90	0.34	1.21	0.11	-0.99	-0.16	-0.62	-0.38	0.12	132	THR	CB	-0.23	-0.87	0.13	-0.84	-0.56	-0.28	-0.88	-0.67	-0.41
50	GLU	C	-2.53	1.21	3.44	1.77	1.09	0.37	0.18	1.15	1.06	133	THR	OG1	-1.13	-0.49	0.24	-0.60	-0.88	-0.89	-0.32	-0.45	-0.33
51	GLU																						

Table 3. (continued)

		57	58	59	60		57	58	59	60			
		GLY N	GLY CA	GLY C	GLY O		GLY N	GLY CA	GLY C	GLY O			
0	SAS	SAS	1.34	0.62	1.48	0.76	83	LEU	CB	0.30	-0.41	-0.23	-0.71
1	ALA	N	1.33	0.33	-1.65	-1.62	84	LEU	CG	0.46	-0.25	-0.67	-0.73
2	ALA	CA	0.25	-0.42	-0.24	-0.66	85	LEU	CD1	0.43	-0.43	-0.65	0.07
3	ALA	C	-2.17	0.19	0.40	0.70	86	LEU	CD2	0.58	-0.30	-0.52	0.12
4	ALA	O	-1.79	-0.71	0.28	0.67	87	LYS	N	1.64	0.95	-1.65	-1.44
5	ALA	CB	0.29	-0.34	-0.47	-0.56	88	LYS	CA	0.53	-0.08	0.21	-0.61
6	ARG	N	1.35	0.71	-1.74	-1.58	89	LYS	C	-2.19	0.19	1.56	1.19
7	ARG	CA	0.33	-0.30	-0.11	-0.90	90	LYS	O	-1.55	-0.44	0.76	1.04
8	ARG	C	-2.18	0.08	0.86	0.54	91	LYS	CB	0.69	-0.09	-0.05	-0.55
9	ARG	O	-1.68	-0.66	0.41	0.52	92	LYS	CG	0.69	-0.05	-0.60	-0.80
10	ARG	CB	0.57	-0.31	-0.50	-0.78	93	LYS	CD	0.86	-0.14	-0.18	-0.26
11	ARG	CG	0.48	-0.27	-0.74	-0.93	94	LYS	CE	0.99	-0.05	-0.19	-0.38
12	ARG	CD	0.54	-0.23	-0.33	-0.63	95	LYS	NZ	1.07	0.23	0.42	-0.42
13	ARG	NE	0.87	-0.21	-0.28	-0.77	96	MET	N	1.31	0.80	-1.76	-1.62
14	ARG	CZ	0.61	-0.77	-0.61	0.00	97	MET	CA	0.31	-0.24	0.22	-0.56
15	ARG	NH1	0.50	-0.36	-0.48	-0.64	98	MET	C	-1.85	-0.41	0.97	0.17
16	ARG	NH2	0.42	-0.38	-0.39	-0.56	99	MET	O	-1.74	-0.76	-0.02	0.60
17	ASN	N	1.26	0.45	-1.92	-1.58	100	MET	CB	0.35	-0.44	-0.12	-0.65
18	ASN	CA	-0.03	-0.42	-0.49	-0.94	101	MET	CG	0.44	-0.38	-0.66	-0.51
19	ASN	C	-1.98	-0.18	0.23	0.01	102	MET	SD	0.03	-0.75	-0.88	0.38
20	ASN	O	-1.64	-0.78	0.12	0.63	103	MET	CE	0.16	-0.54	-0.78	-0.06
21	ASN	CB	0.42	-0.20	-0.15	-0.77	104	PHE	N	1.25	0.56	-1.71	-1.83
22	ASN	CG	0.07	-0.57	-0.61	-0.54	105	PHE	CA	0.37	-0.39	-0.12	-1.01
23	ASN	OD1	-0.93	-0.56	-0.45	0.01	106	PHE	C	-2.29	0.13	-0.12	0.45
24	ASN	ND2	0.16	-0.41	-0.56	-0.60	107	PHE	O	-1.75	-0.71	0.03	0.50
25	ASP	N	1.27	0.43	-2.04	-1.48	108	PHE	CB	0.18	-0.54	-0.62	-0.86
26	ASP	CA	-0.05	-0.44	-0.34	-0.62	109	PHE	CG	0.16	-0.91	-0.39	0.26
27	ASP	C	-2.18	-0.15	0.73	0.49	110	PHE	CD1	0.20	-0.56	-1.11	-0.45
28	ASP	O	-1.68	-0.67	0.45	0.86	111	PHE	CD2	-0.03	-0.72	-1.04	-0.50
29	ASP	CB	0.13	-0.13	-0.05	-0.34	112	PHE	CE1	-0.10	-0.66	-0.99	-0.12
30	ASP	CG	-0.43	-0.64	-0.37	-0.23	113	PHE	CE2	0.02	-0.75	-0.94	-0.13
31	ASP	OD1	-1.19	-0.44	-0.01	0.47	114	PHE	CZ	0.09	-0.75	-0.88	0.21
32	ASP	OD2	-0.65	-0.30	0.11	0.61	115	PRO	N	0.70	-0.09	-1.00	-1.59
33	CYS	N	0.79	0.43	-1.77	-1.67	116	PRO	CA	0.07	-0.49	-0.33	-0.92
34	CYS	CA	0.31	-0.46	-0.74	-0.91	117	PRO	C	-2.16	-0.34	0.19	0.37
35	CYS	C	-2.12	-0.08	0.23	-0.54	118	PRO	O	-1.43	-0.58	0.27	0.80
36	CYS	O	-1.94	-0.86	0.10	0.16	119	PRO	CB	0.21	-0.33	-0.62	-0.24
37	CYS	CB	-0.24	-0.25	-0.72	-0.69	120	PRO	CG	0.43	-0.29	-0.44	-0.34
38	CYS	SG	-0.33	-0.51	-0.88	0.16	121	PRO	CD	0.46	-0.27	-1.14	-1.23
39	GLN	N	1.21	0.88	-1.79	-1.51	122	SER	N	1.04	0.38	-1.80	-1.54
40	GLN	CA	0.37	-0.05	0.11	-0.80	123	SER	CA	-0.07	-0.50	-0.19	-0.87
41	GLN	C	-2.28	0.06	1.25	0.65	124	SER	C	-2.28	-0.27	0.72	0.41
42	GLN	O	-1.62	-0.61	0.72	0.93	125	SER	O	-1.69	-0.75	0.02	0.43
43	GLN	CB	0.27	-0.23	-0.20	-0.66	126	SER	CB	0.12	-0.31	-0.36	-0.59
44	GLN	CG	0.41	-0.11	-0.48	-0.73	127	SER	OG	-0.72	-0.50	-0.30	-0.40
45	GLN	CD	0.24	-0.72	-0.78	0.10	128	THR	N	0.94	0.29	-1.81	-1.68
46	GLN	OE1	-0.29	-0.51	-0.48	0.46	129	THR	CA	0.35	-0.37	-0.03	-0.90
47	GLN	NE2	0.30	-0.36	-0.41	-0.48	130	THR	C	-1.98	-0.02	1.23	0.81
48	GLU	N	1.73	0.86	-1.85	-1.34	131	THR	O	-1.54	-0.59	0.33	0.66
49	GLU	CA	0.44	-0.06	-0.03	-0.43	132	THR	CB	-0.02	-0.40	-0.41	-0.83
50	GLU	C	-2.41	-0.07	1.35	0.77	133	THR	OG1	-0.67	-0.51	-0.30	-0.59
51	GLU	O	-1.60	-0.52	0.40	0.99	134	THR	CG2	0.24	-0.50	-0.82	-0.40
52	GLU	CB	0.42	-0.01	0.21	-0.40	135	TRP	N	0.96	0.56	-1.49	-1.67
53	GLU	CG	0.62	-0.02	-0.40	-0.37	136	TRP	CA	0.47	-0.25	0.11	-0.99
54	GLU	CD	0.09	-0.45	-0.17	0.39	137	TRP	C	-2.31	-0.02	2.39	0.51
55	GLU	OE1	-0.28	-0.10	0.13	0.87	138	TRP	O	-1.81	-0.78	0.95	0.71
56	GLU	OE2	-0.27	-0.07	0.39	0.99	139	TRP	CB	0.66	-0.23	-0.68	-0.62
57	GLY	N	0.80	0.10	-1.59	-1.42	140	TRP	CG	-0.75	-0.56	-1.16	0.19
58	GLY	CA	0.11	-0.31	-0.51	-0.68	141	TRP	CD1	-0.20	-0.61	-1.40	-0.90
59	GLY	C	-1.57	-0.52	-0.31	-0.03	142	TRP	CD2	-1.19	-0.96	-0.57	0.94
60	GLY	O	-1.42	-0.67	-0.04	0.33	143	TRP	NE1	-0.21	-0.70	-0.90	-0.82
61	HIS	N	1.62	0.37	-1.78	-1.48	144	TRP	CE2	-0.88	-1.27	-0.57	0.85
62	HIS	CA	0.15	-0.45	0.67	-0.75	145	TRP	CE3	-0.21	-0.73	-1.19	-0.09
63	HIS	C	-2.15	0.32	0.93	0.47	146	TRP	CZ2	-0.12	-0.95	-1.03	-0.28
64	HIS	O	-1.76	-0.79	0.16	0.63	147	TRP	CZ3	-0.25	-0.81	-0.84	-0.20
65	HIS	CB	0.09	-0.12	-0.19	-0.59	148	TRP	CH2	0.03	-0.81	-0.87	-0.05
66	HIS	CG	0.41	-0.75	-0.01	0.17	149	TYR	N	1.06	0.52	-1.75	-1.60
67	HIS	ND1	-0.69	-0.41	-0.52	-0.41	150	TYR	CA	0.31	-0.26	0.11	-0.96
68	HIS	CD2	-0.08	-0.37	-0.94	-0.61	151	TYR	C	-2.09	-0.35	0.97	0.34
69	HIS	CE1	0.08	-0.57	-0.69	-0.39	152	TYR	O	-1.68	-0.72	0.19	0.41
70	HIS	NE2	0.16	-0.37	-0.65	-0.50	153	TYR	CB	0.21	-0.28	-0.25	-0.66
71	ILE	N	1.13	0.82	-1.47	-1.66	154	TYR	CG	-0.38	-0.97	-0.48	0.50
72	ILE	CA	0.17	-0.37	0.09	-1.01	155	TYR	CD1	-0.14	-0.46	-1.20	-0.66
73	ILE	C	-2.45	0.03	0.41	0.56	156	TYR	CD2	-0.41	-0.68	-1.02	-0.52
74	ILE	O	-1.74	-0.73	0.16	0.43	157	TYR	CE1	-0.35	-0.84	-1.25	-0.48
75	ILE	CB	0.27	-0.37	-0.29	-0.77	158	TYR	CE2	-0.24	-0.88	-0.90	-0.24
76	ILE	CG1	0.50	-0.35	-0.54	-0.60	159	TYR	CZ	-0.39	-1.38	-0.93	0.73
77	ILE	CG2	0.17	-0.46	-0.80	-0.10	160	TYR	OH	-0.21	-0.73	-0.67	-0.13
78	ILE	CD1	0.54	-0.36	-0.59	0.09	161	VAL	N	1.14	0.76	-1.70	-1.71
79	LEU	N	1.60	0.90	-1.71	-1.68	162	VAL	CA	0.30	-0.27	0.23	-0.97
80	LEU	CA	0.37	-0.15	0.39	-0.79	163	VAL	C	-2.28	0.03	1.06	0.42
81	LEU	C	-2.25	-0.04	0.46	0.60	164	VAL	O	-1.73	-0.64	0.37	0.41
82	LEU	O	-1.77	-0.61	0.31	0.63	165	VAL	CB	0.03	-0.38	-0.53	-0.62
							166	VAL	CG1	0.19	-0.55	-0.87	-0.22
							167	VAL	CG2	0.39	-0.34	-0.56	-0.38

Potential coefficients are the negative log-odds ratio of the observed contact area frequencies to the expected frequencies, based on a random distribution of contacts.
Favorable (negative) contacts are shaded.

Table 3. (continued)

		61	62	63	64	65	66	67	68	69	70		61	62	63	64	65	66	67	68	69	70			
		HIS N	HIS CA	HIS C	HIS O	HIS CB	HIS CG	HIS ND1	HIS CD2	HIS CE1	HIS NE2		HIS N	HIS CA	HIS C	HIS O	HIS CB	HIS CG	HIS ND1	HIS CD2	HIS CE1	HIS NE2			
0	SAS	SAS	1.99	1.45	1.89	1.25	1.19	1.29	0.80	0.87	0.57	0.52	83	LEU	CB	0.86	-0.91	0.16	-1.01	-0.63	-0.82	-0.06	-0.40	-0.21	-0.15
1	ALA	N	1.87	0.40	-2.21	-1.71	0.60	0.36	-0.10	0.34	0.39	0.63	84	LEU	CG	0.56	-0.28	-0.68	-1.14	-0.42	-0.78	-0.12	-0.47	-0.18	0.04
2	ALA	CA	1.10	-0.28	1.26	-0.65	-0.67	-0.45	-0.54	-0.85	-0.29	-0.27	85	LEU	CD1	0.55	-0.62	-0.73	0.04	-0.84	-1.14	-0.18	-0.61	-0.25	-0.05
3	ALA	C	-2.48	1.00	3.14	0.89	0.31	0.78	0.02	-0.80	-0.34	0.06	86	LEU	CD2	0.74	-0.26	-0.44	0.16	-0.68	-1.10	-0.30	-0.63	-0.46	-0.31
4	ALA	O	-1.95	-0.42	0.39	0.71	-0.86	0.24	-0.22	-0.58	-0.25	-0.32	87	LYS	N	2.15	1.10	-2.32	-1.77	0.80	1.31	-0.06	0.20	0.95	1.26
5	ALA	CB	0.63	-0.67	-0.34	-0.55	-0.33	-0.65	-0.20	-0.33	-0.25	0.02	88	LYS	CA	0.91	-0.08	0.45	-0.54	-0.58	-0.81	-0.15	-0.56	0.00	0.29
6	ARG	N	1.63	0.80	-2.19	-2.02	0.48	1.04	-0.17	0.50	0.81	0.78	89	LYS	C	-2.44	1.63	2.11	0.54	0.09	0.69	0.03	-0.41	0.18	0.11
7	ARG	CA	0.92	-0.52	0.36	-0.92	-0.87	-0.78	-0.81	-0.14	-0.42	-0.01	90	LYS	O	-1.63	-0.75	0.39	0.77	-0.74	0.25	-0.13	-0.36	0.31	0.25
8	ARG	C	-2.40	0.47	1.75	0.47	0.00	-0.50	-0.75	-0.65	-0.07	0.18	91	LYS	CB	1.08	-0.53	0.55	-0.84	0.08	-0.41	-0.10	-0.27	-0.12	-0.10
9	ARG	O	-1.72	-0.77	0.81	0.46	-0.85	0.62	-0.11	-0.40	-0.08	-0.06	92	LYS	CG	1.30	-0.32	-0.50	-0.50	0.16	-0.27	-0.02	-0.11	-0.26	0.06
10	ARG	CB	1.02	-0.91	0.15	-0.95	-0.42	-0.73	-0.11	-0.21	-0.37	-0.16	93	LYS	CD	1.49	-0.51	-0.03	0.31	0.28	-0.46	0.05	-0.14	-0.16	-0.11
11	ARG	CG	0.78	-0.38	-0.62	-0.81	-0.69	-0.64	-0.20	-0.44	-0.29	-0.27	94	LYS	CE	1.74	0.13	0.62	0.13	0.26	0.16	0.22	0.25	-0.01	0.14
12	ARG	CD	0.99	-0.63	-0.11	-0.42	-0.28	-1.13	-0.51	-0.37	-0.52	-0.42	95	LYS	NZ	2.09	0.35	0.90	-0.02	0.79	1.02	0.20	0.41	0.09	0.20
13	ARG	NE	0.71	-0.04	-0.24	-0.53	-0.07	-0.66	-0.61	-0.38	-0.30	-0.42	96	MET	N	1.45	0.65	-2.57	-2.19	0.14	1.03	0.39	0.15	1.01	0.81
14	ARG	CG	2.31	-0.42	-0.51	0.34	-0.46	-1.61	-0.15	-0.77	-0.84	-0.63	97	MET	CA	0.60	0.11	-0.17	-1.53	-0.09	-0.30	-0.72	-0.76	-0.58	-0.28
15	ARG	NH1	1.16	-0.31	-0.21	-0.29	-0.08	-0.44	-0.27	-0.26	-0.38	-0.30	98	MET	C	-2.64	-0.42	0.09	0.34	-0.32	0.12	-0.27	-0.39	-0.31	0.14
16	ARG	NH2	1.10	-0.36	0.13	-0.39	-0.02	-0.26	-0.10	-0.21	-0.31	-0.25	99	MET	O	-2.18	-0.83	-0.22	0.30	-0.97	0.03	-0.48	-0.41	0.10	0.06
17	ASN	N	1.50	0.88	-2.43	-1.86	0.59	2.14	-0.65	-0.09	0.40	0.47	100	MET	CB	0.29	-1.10	0.15	-1.39	-0.80	-0.92	-1.00	-0.59	-0.43	-0.41
18	ASN	CA	0.59	-0.36	1.14	-0.58	-0.40	0.33	-0.55	-0.49	-0.83	-0.59	101	MET	CG	0.41	-0.78	-0.62	-1.10	-0.52	-0.43	-0.23	-0.54	-0.51	-0.30
19	ASN	C	-2.33	1.46	3.14	0.20	0.19	0.50	-0.72	-0.58	-0.63	0.19	102	MET	SD	-0.38	-1.26	-0.57	0.05	-0.86	-0.91	-0.56	-1.03	-0.90	-0.54
20	ASN	O	-1.84	-0.64	1.11	0.67	-0.70	-0.05	-0.60	-0.46	-0.03	-0.06	103	MET	CE	0.33	-0.87	-0.56	-0.26	-0.65	-1.33	-0.68	-0.82	-0.59	-0.47
21	ASN	CB	0.86	-0.79	-0.03	-0.94	-0.28	-0.97	-0.45	-0.46	-0.62	-0.49	104	PHE	N	2.12	0.66	-2.63	-2.03	0.79	1.77	-0.07	0.29	0.85	0.21
22	ASN	CG	0.28	-0.41	0.72	-0.57	-0.81	-1.00	-0.73	-0.89	-0.92	-0.27	105	PHE	CA	0.95	-0.14	0.72	-0.76	-0.91	-0.02	-0.72	-0.77	-0.43	-0.45
23	ASN	OD1	-1.16	-0.79	0.07	-0.39	-0.71	-0.04	-0.47	-0.52	-0.55	-0.73	106	PHE	C	-2.50	0.67	0.26	0.04	-0.15	0.81	0.48	-0.53	-0.04	0.14
24	ASN	OD2	0.43	-0.49	-0.20	-0.60	-0.43	-0.31	-0.40	-0.25	-0.46	-0.30	107	PHE	O	-2.28	-1.24	-0.01	0.30	-1.29	-0.08	-0.57	-0.66	0.17	0.18
25	ASP	N	1.43	1.07	-2.57	-1.93	0.15	1.01	-0.85	0.12	0.15	0.47	108	PHE	CB	0.46	-0.47	-0.26	-0.81	-0.43	-0.85	-0.36	-0.52	-0.55	-0.30
26	ASP	CA	0.10	-0.52	0.93	-0.62	-0.77	-0.69	-0.87	-0.86	-0.81	-0.86	109	PHE	CG	1.20	-1.00	0.31	0.82	-0.79	-1.79	-0.64	-1.02	-0.69	-0.21
27	ASP	C	-2.36	1.45	3.36	0.69	0.65	1.01	-0.58	-0.58	-0.41	-0.24	110	PHE	CD1	0.39	-0.83	-0.59	-0.52	-0.80	-1.29	-0.50	-0.69	-0.26	0.04
28	ASP	O	-1.78	-0.46	0.47	0.65	-0.74	-0.07	-0.46	-0.38	-0.27	-0.10	111	PHE	CD2	0.37	-0.91	-0.69	-0.54	-0.97	-1.15	-0.34	-0.72	-0.43	-0.35
29	ASP	CB	0.40	-0.65	0.52	-0.63	-0.23	-0.43	-0.50	-0.77	-0.71	-0.67	112	PHE	CE1	0.70	-0.51	-0.90	-0.21	-1.13	-1.29	-0.33	-0.70	-0.20	-0.22
30	ASP	CG	-0.40	-1.07	0.31	-0.55	-0.95	-0.51	-1.04	-0.89	-1.05	-0.65	113	PHE	CE2	0.34	-0.93	-0.71	0.04	-1.06	-1.24	-0.44	-0.90	-0.48	-0.18
31	ASP	OD1	-1.26	-0.87	0.08	0.66	-0.82	0.23	-1.28	-0.48	-0.84	-1.11	114	PHE	CZ	0.49	-0.54	-0.49	-0.09	-0.98	-1.41	-0.49	-0.90	-0.40	-0.35
32	ASP	OD2	-0.86	-0.85	0.61	0.76	-0.46	0.80	-1.36	-0.42	-0.69	-1.33	115	PRO	N	2.89	2.40	-1.68	-1.34	0.49	0.21	-0.25	-0.72	-0.13	-0.31
33	CYS	N	1.27	0.81	-2.33	-1.72	-0.20	0.41	-0.23	0.49	0.29	-0.08	116	PRO	CA	0.48	-0.38	0.25	-0.73	-0.55	-0.92	-0.83	-0.59	-0.77	-0.44
34	CYS	CA	0.62	-0.50	0.61	-1.13	-0.69	-0.89	-0.36	-0.15	-0.41	-0.25	117	PRO	C	-2.89	0.13	1.80	-0.07	0.22	0.73	-0.27	-0.64	-0.41	-0.23
35	CYS	C	-2.43	-0.56	1.92	-0.43	-0.09	0.07	0.62	0.17	-0.75	-0.84	118	PRO	O	-1.50	-0.52	0.42	0.70	-0.69	-0.27	-0.60	-0.65	-0.53	-0.70
36	CYS	O	-1.99	-0.56	-0.08	0.24	-0.94	-0.02	-0.22	-0.23	-0.47	-0.67	119	PRO	CB	0.28	0.19	0.05	-0.12	-0.20	-1.08	-0.45	-0.50	-0.75	-0.54
37	CYS	CB	-0.20	-0.22	-0.38	-0.65	-0.49	-0.48	-0.40	-0.46	-0.47	-0.10	120	PRO	CG	0.75	-0.30	-0.04	-0.40	-0.40	-1.07	-0.27	-0.51	-0.59	-0.35
38	CYS	SG	-0.74	-0.93	-0.29	0.16	-1.00	-0.43	-0.91	-0.44	-0.28	-0.18	121	PRO	CD	0.99	-0.22	-1.63	-1.03	-0.29	-1.01	-0.02	-0.47	-0.51	-0.36
39	GLN	N	1.77	1.07	-2.43	-1.67	0.76	1.14	0.23	0.42	0.59	0.89	122	SER	N	1.56	0.30	-2.16	-1.78	0.24	1.38	-0.47	0.39	0.47	0.05
40	GLN	CA	1.51	-0.50	0.17	-0.95	-0.78	-0.01	0.20	-0.29	0.05	0.07	123	SER	CA	1.03	-0.43	0.68	-0.71	-0.36	-0.39	-0.38	-0.43	-0.73	-0.46
41	GLN	C	-2.43	0.63	4.00	1.74	0.25	-0.55	0.10	-0.48	-0.28	0.01	124	SER	C	-2.40	0.69	2.94	0.85	-0.23	0.57	-0.39	-0.65	-0.38	0.01
42	GLN	O	-1.79	-0.86	0.52	0.66	-0.89	-0.15	-0.45	-0.37	0.00	0.00	125	SER	O	-1.83	-0.76	-0.12	0.37	-0.77	0.20	-0.29	-0.44	-0.53	-0.33
43	GLN	CB	0.79	-0.56	0.14	-0.79	0.04	-0.22	-0.12	-0.48	-0.40	-0.50	126	SER	CB	0.39	-0.56	0.21	-0.52	-0.09	-0.39	-0.58	-0.36	0.70	-0.65
44	GLN	CG	0.98	-0.33	-0.05	-0.58	-0.05	0.15	0.00	-0.10	-0.29	-0.22	127	SER	OG	-0.70	-0.82	0.02	-0.38	-0.58	0.09	-1.03	-0.47	-0.51	-0.96
45	GLN	CD	0.24	-0.10	0.38	0.33	-0.55	-1.66	-0.18	-0.67	-0.84	-0.42	128	THR	N	1.71	0.31	-2.47	-1.97	0.50	1.54	-0.32	0.14	0.59	0.69
46	GLN	OE1	-0.15	-0.93	0.11	0.35	-0.07	-0.26	-0.53	-0.43	-0.51	-0.79	129	THR	CA	1.75	-0.79	1.78	-0.99	-0.60	0				

Table 3. (continued)

		71 ILE N	72 ILE CA	73 ILE C	74 ILE O	75 ILE CB	76 ILE CG1	77 ILE CG2	78 ILE CD1		71 ILE N	72 ILE CA	73 ILE C	74 ILE O	75 ILE CB	76 ILE CG1	77 ILE CG2	78 ILE CD1		
0	SAS	2.48	2.14	2.40	1.61	2.12	1.89	1.61	1.62	83	LEU	CB	1.10	-1.40	0.59	-1.18	-1.04	-1.16	-0.96	-1.15
1	ALA N	1.35	0.61	-2.70	-1.97	0.86	0.52	0.03	0.20	84	LEU	CG	0.98	-0.52	-0.44	-1.56	-0.42	-1.00	-1.24	-1.19
2	ALA CA	1.02	-0.62	0.60	-0.72	-1.24	-0.79	-0.67	-1.14	85	LEU	CD1	0.47	-1.00	-0.77	-0.05	-0.77	-1.18	-1.42	-1.37
3	ALA C	-2.29	1.79	3.20	0.67	0.20	-0.52	-0.59	-0.96	86	LEU	CD2	0.73	-0.91	-0.43	0.08	-0.87	-1.14	-1.36	-1.45
4	ALA O	-2.02	-1.15	0.98	0.43	-1.37	-0.77	-0.06	-0.08	87	LYS	N	1.80	1.78	-2.85	-1.87	1.64	0.88	0.43	0.80
5	ALA CB	0.73	-0.92	-0.17	-0.69	-0.49	-0.87	-0.91	-0.96	88	LYS	CA	0.94	-0.29	0.96	-1.03	-1.22	-0.29	-0.18	-0.77
6	ARG N	1.80	1.26	-2.78	-1.94	0.98	0.66	0.62	0.69	89	LYS	C	-2.55	1.77	3.32	0.77	0.30	-0.51	-0.46	-0.56
7	ARG CA	0.97	-0.47	0.74	-1.04	-1.18	-0.74	-0.23	-0.92	90	LYS	O	-1.83	-0.98	0.87	0.55	-1.11	-0.54	0.11	0.18
8	ARG C	-2.22	0.55	1.26	0.75	0.60	-0.59	-0.40	-0.69	91	LYS	CB	1.40	-0.59	0.40	-0.71	-0.14	-0.40	-0.33	-0.41
9	ARG O	-2.04	-1.15	0.90	0.39	-1.31	-0.78	0.02	0.19	92	LYS	CG	1.37	0.25	-0.12	-0.55	0.27	-0.25	-0.41	-0.39
10	ARG CB	1.72	-0.78	0.41	-0.90	-0.30	-0.48	-0.29	-0.49	93	LYS	CD	1.79	-0.29	-0.05	0.12	0.34	0.13	-0.33	-0.14
11	ARG CG	1.13	-0.27	-0.59	-0.76	-0.29	-0.47	-0.63	-0.58	94	LYS	CE	1.77	0.43	0.70	0.17	0.57	0.47	-0.19	0.27
12	ARG CD	1.39	-0.38	-0.20	-0.19	0.01	0.10	-0.36	-0.43	95	LYS	NZ	1.77	0.90	0.87	0.05	1.56	1.45	0.99	1.28
13	ARG NE	1.62	0.13	0.56	-0.29	0.41	0.15	-0.27	-0.20	96	MET	N	1.63	0.72	-2.14	-2.19	1.05	0.71	0.13	0.50
14	ARG CZ	2.07	-0.32	0.00	1.06	-0.10	-0.72	-0.90	-0.91	97	MET	CA	0.49	-0.83	1.25	-1.29	-1.62	-0.64	-0.79	-1.09
15	ARG NH1	0.98	-0.07	0.20	-0.04	0.28	0.15	-0.05	0.14	98	MET	C	-2.12	1.47	4.00	0.76	0.03	-0.51	-0.62	-0.75
16	ARG NH2	1.28	0.19	0.44	0.01	0.41	0.27	-0.01	0.08	99	MET	O	-2.32	-1.42	0.86	0.36	-1.49	-1.02	-0.36	-0.23
17	ASN N	2.03	1.75	-2.84	-1.85	0.80	1.04	0.37	0.86	100	MET	CB	0.83	-1.30	0.23	-1.11	-0.94	-0.99	-0.93	-0.86
18	ASN CA	1.04	-0.13	1.05	-1.00	-1.08	-0.34	-0.18	-0.41	101	MET	CG	0.63	-0.57	-0.64	-1.13	-0.79	-0.95	-1.17	-1.00
19	ASN C	-2.37	1.37	1.58	0.02	0.51	-0.33	-0.37	-0.66	102	MET	SD	0.39	-1.14	-0.64	0.59	-0.73	-1.17	-1.33	-1.22
20	ASN O	-1.78	-0.68	0.48	0.49	-0.93	-0.66	0.08	0.21	103	MET	CE	0.23	-0.85	-1.03	-0.07	-0.67	-0.91	-1.19	-1.04
21	ASN CB	1.15	-0.29	-0.04	-0.71	0.30	-0.13	-0.28	-0.29	104	PHE	N	1.87	0.84	-2.26	-2.35	1.40	0.70	0.21	0.53
22	ASN CG	0.58	0.53	0.21	-0.44	-0.11	-0.62	-0.43	-0.36	105	PHE	CA	0.78	-0.30	1.62	-1.24	-1.25	-0.63	-0.44	-0.89
23	ASN OD1	-0.64	-0.21	0.50	0.32	-0.13	0.16	0.10	0.30	106	PHE	C	-1.81	1.23	2.59	0.77	1.00	-0.78	-0.31	-0.71
24	ASN ND2	0.40	-0.02	-0.09	-0.40	0.08	0.34	-0.10	0.28	107	PHE	O	-2.42	-1.44	0.98	0.11	-1.43	-0.94	-0.16	-0.03
25	ASP N	1.67	1.67	-2.97	-1.77	0.59	0.74	0.53	1.06	108	PHE	CB	0.64	-0.92	0.05	-1.00	-1.02	-1.10	-1.00	-1.14
26	ASP CA	1.34	0.40	0.57	-0.60	-1.31	-0.29	-0.01	-0.41	109	PHE	CG	2.15	-0.47	0.14	0.02	-0.61	-1.33	-1.31	-1.59
27	ASP C	-2.44	2.01	1.28	0.33	0.78	-0.16	-0.15	-0.64	110	PHE	CD1	0.74	-0.80	-0.83	-0.75	-0.85	-1.03	-1.16	-1.14
28	ASP O	-1.78	-0.56	1.48	0.64	-1.11	-0.64	0.26	0.33	111	PHE	CD2	0.57	-0.87	-0.69	-0.60	-0.66	-1.17	-1.21	-1.27
29	ASP CB	1.00	-0.31	0.58	-0.59	-0.25	-0.10	-0.45	-0.33	112	PHE	CE1	0.34	-0.68	-0.73	0.02	-0.92	-1.08	-1.21	-1.16
30	ASP CG	1.09	0.72	1.25	0.05	-0.40	0.14	-0.16	-0.04	113	PHE	CE2	0.75	-0.69	-0.46	0.09	-0.67	-1.21	-1.24	-1.26
31	ASP OD1	0.05	0.49	0.89	1.08	0.30	0.85	0.89	0.70	114	PHE	CZ	0.30	-0.68	-0.68	0.12	-0.66	-0.93	-1.25	-1.26
32	ASP OD2	0.14	-0.04	1.48	1.23	0.25	0.79	0.50	0.66	115	PRO	N	2.71	1.68	-1.87	-1.17	0.97	-0.06	-0.51	-0.29
33	CYS N	1.26	0.26	-2.33	-2.15	1.65	0.35	0.22	0.19	116	PRO	CA	1.30	-0.35	0.71	-0.72	-0.84	-0.43	-0.40	-0.60
34	CYS CA	0.43	-0.64	0.39	-1.24	-1.24	-0.26	-0.42	-0.83	117	PRO	C	-2.31	1.46	1.50	0.90	0.77	-0.26	-0.13	-0.66
35	CYS C	-2.11	1.02	4.00	0.40	-0.08	-0.83	-0.61	-0.87	118	PRO	O	-1.80	-0.48	1.06	0.80	-1.23	-0.80	0.07	-0.07
36	CYS O	-2.05	-1.54	0.71	0.13	-1.06	-0.91	0.05	0.07	119	PRO	CB	0.82	-0.03	-0.25	0.20	0.25	-0.48	-0.45	-0.52
37	CYS CB	0.81	-0.69	0.32	-0.87	-0.74	-1.02	-0.65	-0.82	120	PRO	CG	0.94	-0.26	0.06	0.21	0.27	-0.44	-0.40	-0.41
38	CYS SG	-0.07	-0.93	-1.07	-0.25	-0.68	-1.01	-0.90	-0.75	121	PRO	CD	0.98	-0.27	-1.63	-0.91	0.49	-0.07	-0.08	-0.19
39	GLN N	1.81	1.01	-3.03	-1.78	1.18	0.85	0.63	0.67	122	SER	N	1.78	1.59	-2.69	-1.82	0.54	0.67	0.26	0.51
40	GLN CA	0.91	-0.33	0.05	-0.96	-1.43	-0.27	-0.14	-0.81	123	SER	CA	0.85	0.08	1.00	-0.92	-0.79	-0.53	-0.22	-0.69
41	GLN C	-2.72	1.05	2.00	0.80	0.09	-0.46	-0.53	-0.83	124	SER	C	-2.45	1.37	1.25	0.74	0.04	-0.49	-0.50	-0.58
42	GLN O	-1.98	-1.11	0.76	0.67	-1.26	-0.79	0.13	0.25	125	SER	O	-1.80	-0.98	0.94	0.35	-1.00	-0.58	0.00	0.24
43	GLN CB	1.53	-0.84	0.52	-0.69	-0.56	-0.24	-0.37	-0.53	126	SER	CB	0.90	-0.59	0.20	-0.57	-0.44	-0.27	-0.42	-0.41
44	GLN CG	1.25	-0.13	-0.24	-0.63	0.16	-0.10	-0.28	-0.31	127	SER	OG	-0.25	-0.52	0.43	-0.36	-0.22	0.12	-0.02	0.23
45	GLN CD	1.55	-0.67	0.38	0.75	-0.33	-0.34	-0.88	-0.59	128	THR	N	1.29	1.27	-2.60	-2.06	0.80	0.77	0.52	0.70
46	GLN OE1	-0.01	-0.60	0.51	0.77	-0.14	0.31	0.06	0.10	129	THR	CA	0.86	-0.84	1.47	-1.31	-1.15	-0.60	-0.37	-0.92
47	GLN NE2	0.73	-0.23	0.35	-0.09	-0.09	0.29	-0.13	0.13	130	THR	C	-2.12	1.35	1.89	0.88	0.73	-0.61	-0.32	-0.86
48	GLU N	1.91	1.70	-3.02	-1.80	1.41	1.05	0.48	0.89	131	THR	O	-2.18	-1.37	1.19	0.37	-1.24	-0.90	-0.07	0.11
49	GLU CA	1.04	0.22	0.45	-0.97	-1.36	-0.32	-0.34	-0.84	132	THR	CB	0.75	-1.07	-0.33	-0.90	-0.78	-0.61	-0.48	-0.45
50	GLU C	-2.59	1.86	2.17	1.38	0.98	-0.35	-0.25	-0.49	133	THR	OG1	0.03	-0.52	0.25	-0.46	-0.30	-0.13	-0.27	0.08
51	GLU O	-1.83	-0.71	2.20	0.81	-1.20	-0.61	0.30	0.31	134	THR	CG2	0.44	-0.35	-0.57	-0.23	-0.43	-0.82	-0.80	-0.80
52	GLU CB	1.36	-0.80	0.69	-0.70	-0.24	-0.17	-0.24	-0.24	135	TRP	N	1.62	1.23	-2.52	-2.11	1.10	1.03	0.28	0.54
53	GLU CG	1.05	-0.02	-0.10	-0.45	0.16	-0.23	-0.34	-0.36	136	TRP	CA	0.78	-0.65	3.76	-1.49	-1.51	-0.86	-0.09	-0.61
54	GLU CD	1.76	-0.23	1.41	0.87	0.13	-0.13	-0.45	-0.38	137	TRP	C	-2.18	1.34	4.00	1.12	1.02	-0.97	-0.75	-0.74
55	GLU OE1	0.74	-0.21	1.53	1.46	0.58	0.75	0.47	0.62	138	TRP	O	0.98	-0.79	0.36	-0.81	-1.05	-0.91	-0.85	-1.04
56	GLU OE2	0.56	0.51	0.93	1.37	0.61	0.75	0.49	0.56	139	TRP	CB	1.57	0.71	2.17	0.32	-1.30	-0.99	-1.19	-1.25
57	GLY N	1.15	0.16	-2.47	-1.75	0.26	0.49	0.15	0.52	141	TRP	CD1	0.36	-0.44	-0.78	-0.47	-0.80	-0.63	-0.72	-0.48
58	GLY CA	0.86	-0.34	0.02	-0.75	-0.35	-0.34	-0.46	-0.35	142	TRP	CD								

Table 3. (continued)

		79 LEU N	80 LEU CA	81 LEU C	82 LEU O	83 LEU CB	84 LEU CG	85 LEU CD1	86 LEU CD2	79 LEU N	80 LEU CA	81 LEU C	82 LEU O	83 LEU CB	84 LEU CG	85 LEU CD1	86 LEU CD2				
0	SAS	2.30	2.24	2.12	1.38	1.89	2.12	1.51	1.34	83	LEU	CB	0.85	-1.47	0.02	-1.24	-0.81	-0.87	-1.02	-0.96	
1	ALA	N	1.81	0.87	-2.49	-1.93	0.68	0.61	0.14	0.39	84	LEU	CG	0.69	-0.78	-0.63	-1.37	-0.88	-1.05	-1.24	-0.98
2	ALA	CA	0.94	-0.29	0.56	-0.59	-1.07	-0.69	-1.11	-0.82	85	LEU	CD1	0.38	-1.11	-0.88	-0.13	-1.01	-1.22	-1.27	-1.35
3	ALA	C	-2.43	1.62	1.05	0.78	0.18	-0.50	-1.00	-0.68	86	LEU	CD2	0.67	-0.73	-0.47	0.04	-0.95	-0.97	-1.35	-1.35
4	ALA	O	2.11	-0.88	0.81	0.62	-1.20	-1.16	-0.16	0.04	87	LYS	N	2.14	1.11	-2.77	-1.91	1.06	0.84	0.59	0.80
5	ALA	CB	0.78	-1.08	-0.33	-0.72	-0.65	-0.66	-0.88	-0.93	88	LYS	CA	1.05	0.23	1.00	-0.78	-0.93	-0.40	-0.86	-0.54
6	ARG	N	2.20	1.30	-2.57	-1.96	0.67	0.72	0.49	0.69	89	LYS	C	-2.72	1.11	2.46	0.86	0.32	-0.62	-0.60	-0.62
7	ARG	CA	0.80	-0.06	0.76	-0.68	-1.08	-0.31	-0.96	-0.68	90	LYS	O	-1.88	-0.84	0.93	0.70	-0.87	-1.03	0.27	0.33
8	ARG	C	-2.54	1.52	1.87	0.70	0.26	-0.42	-0.71	-0.61	91	LYS	CB	1.67	-1.03	0.33	-0.91	-0.13	-0.21	-0.41	-0.42
9	ARG	O	-2.04	-1.07	0.85	0.53	-1.12	-1.11	0.14	0.32	92	LYS	CG	1.62	-0.42	-0.31	-0.69	-0.05	-0.12	-0.47	-0.40
10	ARG	CB	1.36	-1.10	0.15	-1.06	-0.26	-0.27	-0.50	-0.48	93	LYS	CD	1.68	-0.64	-0.13	-0.07	0.22	0.09	-0.13	-0.29
11	ARG	CG	1.24	-0.48	-0.34	-0.63	-0.42	-0.29	-0.59	-0.56	94	LYS	CE	1.42	0.12	0.24	-0.07	0.40	0.30	0.14	0.04
12	ARG	CD	1.30	-0.38	-0.12	-0.33	0.04	-0.02	-0.20	-0.34	95	LYS	NZ	1.90	0.84	0.96	0.01	1.52	1.58	1.23	0.89
13	ASN	NE	1.78	-0.11	0.29	-0.52	0.12	0.10	-0.28	-0.15	96	MET	N	1.81	1.37	-2.22	-2.12	1.45	0.64	0.48	0.66
14	ASN	CG	2.28	-0.41	-0.35	0.48	-0.57	-0.70	-0.83	-0.95	97	MET	CA	0.82	-0.17	1.51	-0.91	-1.27	-0.41	-1.14	-0.81
15	ASN	NH1	0.98	-0.34	-0.25	-0.28	0.10	0.23	0.09	-0.09	98	MET	C	-2.09	2.48	3.03	0.50	-0.03	-0.41	-1.03	-0.57
16	ASN	NH2	1.12	-0.23	0.02	-0.16	0.04	0.33	0.06	-0.07	99	MET	O	-2.26	-0.97	0.67	0.52	-1.21	-1.39	-0.16	0.05
17	ASN	N	2.12	1.24	-2.64	-1.73	1.06	0.53	0.72	0.78	100	MET	CB	1.31	-1.30	0.36	-1.11	-0.71	-0.71	-1.02	-0.90
18	ASN	CA	1.23	-0.03	0.84	-0.67	-0.78	-0.33	-0.67	-0.50	101	MET	CG	0.61	-0.80	-0.66	-0.97	-0.84	-0.94	-1.05	-0.95
19	ASN	C	-2.29	0.72	1.71	0.34	0.69	-0.33	-0.65	-0.32	102	MET	SD	0.29	-1.31	-0.71	0.37	-1.05	-1.14	-1.20	-1.31
20	ASN	O	-1.81	-0.82	0.32	0.55	-0.91	-0.83	0.23	0.34	103	MET	CE	0.38	-0.96	-0.85	-0.12	-0.92	-0.89	-1.08	-1.14
21	ASN	CB	1.43	-0.67	0.26	-0.66	-0.07	-0.16	-0.35	-0.32	104	PHE	N	1.86	1.47	-2.29	-2.21	0.97	0.83	0.49	0.75
22	ASN	CG	0.74	0.54	0.46	-0.20	-0.68	-0.52	-0.45	-0.55	105	PHE	CA	0.78	-0.77	1.62	-0.99	-1.14	-0.71	-0.83	-0.61
23	ASN	OD1	-0.71	-0.35	0.33	0.56	-0.27	0.08	0.24	0.34	106	PHE	C	-2.04	1.81	2.15	0.10	0.39	-0.50	-0.77	-0.44
24	ASN	OD2	0.80	-0.22	0.06	-0.29	0.02	0.11	0.23	0.24	107	PHE	O	-2.24	-1.18	0.65	0.37	-1.20	-1.28	0.09	0.22
25	ASP	N	1.84	1.17	-2.65	-1.52	0.65	0.63	0.77	0.99	108	PHE	CB	0.81	-1.23	-0.17	-1.06	-0.86	-0.67	-1.07	-0.99
26	ASP	CA	1.24	0.36	1.73	-0.34	-0.79	-0.28	-0.58	-0.30	109	PHE	CG	1.96	-0.69	0.18	0.10	-1.09	-0.68	-1.55	-1.46
27	ASP	C	-2.53	0.93	2.85	0.55	0.11	-0.16	-0.50	-0.31	110	PHE	CD1	0.37	-0.97	-0.96	-0.74	-0.98	-0.98	-1.13	-1.11
28	ASP	O	-1.81	-0.28	0.96	0.77	-0.82	-0.85	0.41	0.50	111	PHE	CD2	0.31	-1.17	-1.00	-0.66	-0.95	-0.84	-1.27	-1.15
29	ASP	CB	1.06	-0.26	0.68	-0.37	-0.10	-0.15	-0.25	-0.36	112	PHE	CE1	0.21	-0.71	-0.94	-0.16	-1.19	-1.14	-1.19	-1.26
30	ASP	CG	0.28	0.54	1.07	0.17	0.03	-0.22	0.06	-0.09	113	PHE	CE2	0.16	-0.88	-0.74	-0.04	-1.18	-0.98	-1.19	-1.28
31	ASP	OD1	-0.14	0.55	1.32	1.14	0.35	0.64	0.69	0.90	114	PHE	CZ	0.13	-0.80	-0.67	-0.04	-1.09	-0.99	-1.30	-1.33
32	ASP	OD2	0.09	-0.30	1.28	1.17	0.59	0.74	0.83	0.66	115	PRO	N	2.13	1.30	-1.92	-1.46	0.28	-0.17	-0.28	-0.45
33	CYS	N	1.78	1.12	-2.18	-2.14	0.75	0.58	0.65	0.56	116	PRO	CA	1.31	-0.66	0.68	-0.67	-0.48	-0.17	-0.37	-0.36
34	CYS	CA	0.79	-0.43	1.62	-0.93	-0.95	-0.41	-0.61	-0.76	117	PRO	C	-2.39	1.55	0.38	0.65	0.43	0.00	-0.39	-0.17
35	CYS	C	-2.02	1.02	0.35	0.27	0.03	-0.47	-0.78	-0.50	118	PRO	O	-1.63	-0.09	0.81	0.86	-0.74	-0.89	0.15	0.15
36	CYS	O	-2.04	-0.91	0.02	0.25	-1.00	-1.17	-0.07	0.10	119	PRO	CB	0.56	-0.18	-0.16	0.10	-0.20	-0.33	-0.47	-0.44
37	CYS	CB	0.99	-0.85	-0.47	-0.98	-0.80	-0.51	-0.85	-0.86	120	PRO	CG	1.09	-0.31	-0.36	-0.05	-0.17	-0.22	-0.34	-0.43
38	CYS	SG	0.04	-0.91	-0.64	-0.31	-0.84	-0.98	-0.90	-0.88	121	PRO	CD	0.93	-0.03	-1.60	-0.95	0.14	0.04	-0.16	-0.11
39	GLN	N	2.22	0.86	-2.72	-1.98	1.02	0.87	0.63	0.89	122	SER	N	1.91	1.12	-2.56	-1.73	0.80	0.63	0.50	0.60
40	GLN	CA	1.49	0.12	0.99	-0.70	-1.11	-0.35	-0.79	-0.45	123	SER	CA	0.87	0.23	0.96	-0.68	-0.73	-0.28	-0.64	-0.48
41	GLN	C	-2.62	0.93	2.55	0.71	0.60	-0.53	-0.70	-0.47	124	SER	C	-2.45	1.33	2.82	0.95	0.45	-0.32	-0.65	-0.57
42	GLN	O	-1.96	-0.71	0.66	0.78	-1.08	-0.99	0.22	0.36	125	SER	O	-1.83	-0.86	0.72	0.60	-0.84	-0.95	0.12	0.25
43	GLN	CB	1.26	-1.13	0.63	-1.00	-0.37	-0.32	-0.47	-0.50	126	SER	CB	0.76	-0.60	0.11	-0.55	-0.25	-0.31	-0.38	-0.43
44	GLN	CG	1.18	-0.37	0.01	-0.55	0.03	-0.08	-0.43	-0.37	127	SER	OG	-0.26	-0.65	0.39	-0.30	-0.20	-0.11	0.16	0.13
45	GLN	CD	1.79	-0.67	0.03	0.45	-0.59	-1.02	-0.64	-0.79	128	THR	N	1.82	1.89	-2.47	-1.87	0.73	0.90	0.68	0.76
46	GLN	OE1	0.10	-0.84	0.17	0.56	-0.03	0.33	-0.06	-0.17	129	THR	CA	0.86	-0.05	0.40	-1.03	-0.90	-0.28	-0.74	-0.56
47	GLN	NE2	0.69	-0.42	0.27	-0.14	0.08	0.06	0.10	-0.08	130	THR	C	-2.32	1.53	1.63	1.05	0.34	-0.39	-0.71	-0.54
48	GLU	N	2.34	1.48	-2.79	-1.71	1.21	0.72	0.72	1.06	131	THR	O	-2.09	-1.16	1.03	0.48	-0.96	-1.34	0.06	0.17
49	GLU	CA	0.91	0.56	1.02	-0.61	-0.92	-0.37	-0.83	-0.40	132	THR	CB	1.02	-0.81	0.32	-0.87	-0.49	-0.17	-0.44	-0.40
50	GLU	C	-2.74	1.74	1.77	1.44	0.52	0.05	-0.60	-0.28	133	THR	OG1	0.15	-0.29	0.30	-0.49	-0.25	0.13	0.01	0.06
51	GLU	O	-1.80	-0.52	1.07	0.96	-0.91	-0.93	0.39	0.66	134	THR	CG2	0.49	-0.26	-0.51	-0.25	-0.49	-0.74	-0.77	-0.75
52	GLU	CB	1.39	-0.85	0.82	-0.68	-0.05	0.11	-0.29	-0.30	135	TRP	N	1.60	0.67	-2.48	-2.18	0.77	0.81	0.41	0.72
53	GLU	CG	1.09	0.08	0.32	-0.24	0.20	-0.11	-0.41	-0.36	136	TRP	CA	0.52	-0.67	2.33	-0.94	-0.96	-0.53	-0.81	-0.54
54	GLU	CD	1.14	-0.48	0.51	1.21	0.02	-0.11	-0.35	-0.50	137	TRP	C	-2.26	1.06	2.94	0.94	-0.36	-0.69	-0.88	-0.42
55	GLU	OE1	0.41	-0.39	0.90	1.50	0.65	0.56	0.58	0.21	138	TRP	O	-2.09	-1.17	0.74	0.46	-1.08	-1.09	0.06	-0.07
56	GLU	OE2	0.56	0.25	1.43	1.58	0.67	0.75	0.56	0.45	139	TRP	CB	0.96	-1.41	-0.60	-1.13	-0.91	-0.93	-1.03	-1.02
57	GLY																				

Table 3. (continued)

		87	88	89	90	91	92	93	94	95		87	88	89	90	91	92	93	94	95				
		LYS N	LYS CA	LYS C	LYS O	LYS CB	LYS CG	LYS CD	LYS CE	LYS NZ		LYS N	LYS CA	LYS C	LYS O	LYS CB	LYS CG	LYS CD	LYS CE	LYS NZ				
0	SAS	SAS	1.75	0.99	1.79	0.78	0.69	0.51	0.19	0.03	-0.19	83	LEU	CB	1.08	-0.93	0.31	-0.86	-0.15	-0.06	0.20	0.38	1.44	
1	ALA	N	1.89	1.19	-2.41	-1.69	1.17	1.51	1.53	1.56	1.62	84	LEU	CG	0.85	-0.41	-0.62	-1.02	-0.22	-0.14	0.07	0.27	1.51	
2	ALA	CA	1.14	0.04	0.73	-0.40	-0.92	-0.14	-0.61	0.13	0.67	85	LEU	CD1	0.63	-0.85	-0.59	0.24	-0.41	-0.47	-0.14	0.12	1.15	
3	ALA	C	-2.49	1.18	1.33	0.75	0.21	0.07	0.02	0.14	0.84	86	LEU	CD2	0.84	-0.53	-0.61	0.28	-0.42	-0.41	-0.30	0.02	0.80	
4	ALA	O	-1.93	-0.62	1.02	0.94	-1.10	-0.64	-0.01	-0.06	0.01	87	LYS	N	1.14	1.35	-2.42	-1.72	1.34	1.11	1.80	1.88	1.97	
5	ALA	CB	0.87	-0.74	-0.15	-0.62	0.06	0.04	0.31	0.35	0.90	88	LYS	CA	1.36	0.18	1.36	-0.45	-0.49	0.18	-0.17	0.21	0.80	
6	ARG	N	1.69	1.16	-2.24	-1.66	1.33	1.05	1.64	1.97	2.14	89	LYS	C	-2.39	1.36	1.98	0.77	0.31	-0.32	0.00	0.39	1.11	
7	ARG	CA	1.33	0.07	1.28	-0.44	-0.82	-0.07	-0.34	0.21	0.66	90	LYS	O	-1.73	-0.46	0.78	0.83	-0.72	-0.49	0.23	0.29	0.23	
8	ARG	C	-2.31	1.25	2.31	1.01	0.70	-0.51	0.04	0.40	1.19	91	LYS	CB	1.38	-0.48	0.32	-0.74	0.11	0.48	0.59	0.76	1.15	
9	ARG	O	-1.90	-0.71	0.99	0.93	-1.05	-0.74	0.12	0.22	0.33	92	LYS	CG	1.14	0.20	-0.32	-0.51	0.48	0.52	0.62	0.71	1.22	
10	ARG	CB	1.32	-0.68	0.43	-0.87	0.63	0.40	0.81	0.70	1.27	93	LYS	CD	1.81	-0.15	0.02	0.18	0.61	0.62	0.48	0.54	0.91	
11	ARG	CG	1.14	-0.04	-0.28	-0.70	0.34	-0.14	0.31	0.45	0.78	94	LYS	CE	1.86	0.24	0.40	0.20	0.77	0.72	0.54	0.76	0.89	
12	ARG	CD	1.21	-0.41	-0.36	-0.25	0.26	0.40	0.43	0.59	0.86	95	LYS	NZ	1.99	0.87	1.10	0.18	1.22	1.30	0.99	0.98	0.58	
13	ARG	NE	1.59	-0.11	0.39	-0.27	0.10	0.27	0.40	0.48	1.02	96	MET	N	2.28	1.48	-2.29	-1.71	0.86	0.87	1.73	1.05	1.28	
14	ARG	CZ	1.64	-0.81	-0.25	0.55	-0.60	-0.64	-0.21	-0.13	0.91	97	MET	CA	0.73	0.39	0.40	-0.79	-0.58	-0.12	-0.39	0.38	0.79	
15	ARG	NH1	1.06	-0.33	-0.36	-0.14	0.20	0.12	0.40	0.45	0.61	98	MET	C	-2.53	0.20	3.29	1.49	-0.09	-0.04	-0.05	-0.36	1.07	
16	ARG	NH2	1.16	-0.13	0.12	0.10	0.23	0.02	0.02	0.01	0.43	99	MET	O	-1.78	-1.03	0.81	0.84	-0.62	-0.60	0.26	0.00	0.27	
17	ASN	N	1.88	0.98	-2.46	-1.73	0.88	1.08	1.28	1.36	1.61	100	MET	CB	0.57	-0.69	-0.48	-0.83	-0.12	-0.03	0.06	0.43	1.37	
18	ASN	CA	0.54	-0.27	0.93	-0.72	-1.12	-0.68	-0.78	-0.40	-0.18	101	MET	CG	0.72	-0.17	-0.35	-0.49	-0.07	-0.20	-0.20	0.47	1.02	
19	ASN	C	-2.46	0.84	2.78	0.52	0.07	-0.59	-0.21	-0.12	0.45	102	MET	SD	0.43	-0.75	-0.62	0.51	-0.47	-0.48	-0.45	-0.20	0.78	
20	ASN	O	-1.96	-0.65	0.67	0.90	-0.96	-0.89	-0.08	-0.11	-0.28	103	MET	CE	0.59	-0.55	-0.78	0.13	-0.27	-0.27	-0.09	0.09	0.58	
21	ASN	CB	1.12	-0.50	0.10	-0.80	0.02	-0.06	0.05	0.14	0.48	104	PHE	N	1.57	0.94	-2.69	-1.75	1.34	1.29	1.91	1.56	1.88	
22	ASN	CG	0.29	-0.30	0.06	-0.78	-0.79	-0.90	-0.53	-0.37	0.36	105	PHE	CA	0.40	-0.06	0.36	0.71	-0.99	-0.74	-0.24	-0.32	0.22	0.80
23	ASN	OD1	-0.83	-0.50	0.23	0.34	-0.55	-0.38	-0.49	-0.60	-0.57	106	PHE	C	-2.62	0.46	2.18	0.25	-0.34	-0.49	-0.28	0.20	1.43	
24	ASN	OD2	0.56	-0.28	-0.40	-0.39	-0.17	-0.16	-0.27	-0.17	0.08	107	PHE	O	-1.76	-1.04	0.41	0.52	-0.87	-0.46	-0.04	0.02	0.03	
25	ASP	N	0.92	0.64	-2.27	-2.25	0.23	0.51	0.70	0.86	0.96	108	PHE	CB	0.94	-0.69	-0.25	-0.78	0.00	0.22	0.13	0.24	0.93	
26	ASP	CA	0.44	-0.80	0.99	-0.50	-1.43	-1.00	-1.36	-0.79	-0.36	109	PHE	CG	1.49	-0.71	-0.11	0.37	-0.63	-0.68	-0.66	-0.39	1.01	
27	ASP	C	-2.75	0.13	0.49	0.42	0.18	-0.39	-0.37	0.07	0.40	110	PHE	CD1	0.59	-0.56	-1.04	-0.33	-0.23	-0.22	-0.42	0.08	1.04	
28	ASP	O	-2.23	-0.86	0.45	0.77	-1.29	-1.10	-0.34	-0.34	-0.30	111	PHE	CD2	0.68	-0.76	0.93	-0.04	-0.39	-0.37	-0.17	0.13	1.05	
29	ASP	CB	0.30	-0.63	0.35	-1.04	-0.65	-0.71	-0.70	-0.41	-0.22	112	PHE	CE1	0.39	-0.34	-0.71	0.13	-0.54	-0.45	-0.15	0.01	0.88	
30	ASP	CG	-0.55	-0.34	0.53	-1.39	-1.12	-1.32	-1.42	-1.01	-0.74	113	PHE	CE2	0.59	-0.51	-0.56	0.33	-0.58	-0.46	-0.36	0.10	0.73	
31	ASP	OD1	-1.21	-0.45	0.13	0.20	-0.67	-0.69	-0.99	-0.98	-1.40	114	PHE	CZ	0.48	-0.59	-0.61	0.33	-0.56	-0.41	-0.37	-0.04	0.82	
32	ASP	OD2	-0.58	-0.44	0.36	0.33	-0.45	-0.72	-0.94	-0.97	-1.35	115	PRO	N	1.83	0.82	-0.98	-1.47	0.52	-0.09	0.30	0.77	1.04	
33	CYS	N	1.39	0.91	-2.11	-1.50	1.20	1.09	1.49	1.41	1.60	116	PRO	CA	1.47	-0.31	0.26	-0.83	-0.63	-0.28	-0.26	0.19	0.51	
34	CYS	CA	1.05	-0.14	0.57	-0.46	-0.15	0.07	0.07	0.44	0.71	117	PRO	C	-2.41	0.85	1.24	0.85	0.23	-0.40	0.35	0.44	0.55	
35	CYS	C	-2.17	1.80	3.77	0.79	0.12	0.03	-0.08	0.36	1.06	118	PRO	O	-1.74	-0.38	0.48	1.05	-0.84	-0.78	-0.25	-0.32	-0.13	
36	CYS	O	-1.54	-0.73	0.14	0.32	-0.39	-0.12	0.18	0.03	0.18	119	PRO	CB	0.51	-0.06	-0.31	-0.09	0.02	-0.21	0.22	0.18	0.85	
37	CYS	CB	1.03	-0.24	-0.11	-0.52	0.46	0.30	0.52	0.66	1.27	120	PRO	CG	1.03	-0.30	-0.30	-0.18	0.03	0.07	0.10	0.30	0.79	
38	CYS	SG	0.48	0.01	-0.60	0.18	-0.21	-0.19	0.26	0.21	0.97	121	PRO	CD	1.40	0.08	-1.57	-1.13	0.27	0.41	0.22	0.60	0.79	
39	GLN	N	1.37	1.51	-2.61	-2.04	0.91	0.93	1.92	1.81	2.03	122	SER	N	1.15	1.08	-2.25	-1.75	0.52	0.84	1.28	1.19	1.02	
40	GLN	CA	1.11	-0.44	0.93	-0.30	-1.20	-0.55	-0.68	-0.29	0.43	123	SER	CA	0.68	-0.43	0.72	-0.65	-0.82	-0.19	-0.71	-0.21	0.15	
41	GLN	C	-2.57	0.59	3.65	1.17	0.08	-0.49	-0.25	-0.11	0.58	124	SER	C	-2.52	0.52	2.10	0.57	0.35	0.27	-0.03	-0.06	0.41	
42	GLN	O	-2.07	-0.59	1.01	0.75	-1.21	-0.91	-0.17	-0.08	0.03	125	SER	O	-1.89	-0.32	0.82	0.74	-0.89	-0.76	-0.04	-0.18	-0.22	
43	GLN	CB	0.78	-1.03	0.62	-1.13	-0.39	-0.45	-0.04	-0.18	0.39	126	SER	CB	0.76	-0.52	0.06	-0.55	-0.12	-0.14	-0.01	0.05	0.43	
44	GLN	CG	1.15	-0.58	-0.33	-0.81	-0.09	-0.08	0.37	0.48	0.63	127	SER	O	-0.54	-0.46	0.10	-0.19	-0.61	-0.13	-0.16	-0.20	-0.07	
45	GLN	CD	1.13	-1.45	-0.04	0.44	-0.76	-0.97	-0.83	-0.34	0.33	128	THR	N	1.29	1.31	-2.32	-1.81	0.65	0.64	1.19	1.17	1.17	
46	GLN	OE1	-0.16	-0.79	0.21	0.66	-0.20	-0.42	-0.72	-0.71	-0.54	129	THR	CA	0.61	-0.94	0.62	-0.68	-0.62	-0.39	-0.48	-0.17	0.58	
47	GLN	NE2	0.68	-0.73	-0.21	-0.19	-0.29	-0.33	-0.28	-0.28	-0.01	130	THR	C	-2.54	0.83	2.40	0.79	-0.05	-0.27	-0.11	-0.18	0.65	
48	GLU	N	1.25	1.05	-2.59	-2.33	0.30	0.88	1.28	1.21	1.21	131	THR	O	-1.87	-0.72	0.87	0.69	-0.77	-0.79	0.02	-0.18	-0.06	
49	GLU	CA	0.90	-0.80	1.25	-0.67	-1.55	-0.87	-1.26	-0.67	-0.21	132	THR	CB	0.29	-0.61	0.48	-0.74	-0.40	-0.34	-0.14	0.00	0.67	
50	GLU	C	-2.72	-0.07	1.64	0.93	-0.16	-0.53	-0.44	-0.17	-0.06	133	THR	OG1	-0.61	-0.45	0.20	-0.42	-0.50	-0.41	-0.15	-0.29	-0.10	
51	GLU																							

Table 3. (continued)

		96 MET N	97 MET CA	98 MET C	99 MET O	100 MET CB	101 MET CG	102 MET SD	103 MET CE		96 MET N	97 MET CA	98 MET C	99 MET O	100 MET CB	101 MET CG	102 MET SD	103 MET CE	
0 SAS	SAS	1.51	1.67	2.10	1.41	1.56	1.44	1.40	1.20	83 LEU	CB	1.48	-1.26	-0.03	-1.20	-0.71	-0.84	-1.06	-0.92
1 ALA	N	1.70	0.95	-2.51	-2.00	0.47	0.53	0.12	-0.01	84 LEU	CG	0.67	-0.41	-0.42	-1.37	-0.71	-0.95	-1.15	-0.90
2 ALA	CA	1.18	-0.11	0.81	-0.56	-0.97	-0.62	-1.24	-0.90	85 LEU	CD1	0.51	-1.12	-1.02	-0.19	-1.01	-1.04	-1.21	-1.08
3 ALA	C	-2.27	0.56	2.83	1.05	-0.10	-0.36	-0.63	-1.07	86 LEU	CD2	0.70	-0.79	-0.56	0.01	-0.89	-0.94	-1.31	-1.14
4 ALA	O	-2.00	-0.61	0.76	0.50	-1.13	-0.74	0.47	-0.20	87 LYS	N	2.28	0.71	-2.56	-1.79	0.55	0.69	0.39	0.55
5 ALA	CB	0.75	-0.99	-0.43	-0.82	-0.58	-0.69	-0.93	-0.79	88 LYS	CA	1.51	0.39	0.19	-1.01	-0.69	-0.17	-0.76	-0.56
6 ARG	N	0.93	1.16	-2.65	-1.91	1.08	0.89	0.20	0.41	89 LYS	C	-2.25	0.41	3.29	0.79	-0.50	-0.36	-0.62	-0.80
7 ARG	CA	1.47	0.40	1.32	-0.66	-0.71	-0.10	-0.93	-0.44	90 LYS	O	-1.72	-0.82	1.50	0.83	-0.84	-0.49	0.57	0.16
8 ARG	C	-2.42	0.37	0.84	0.52	-0.29	-0.13	-0.89	-0.85	91 LYS	CB	0.87	-0.56	-0.08	-0.61	-0.11	-0.06	-0.47	-0.27
9 ARG	O	-1.80	-0.91	0.46	0.78	-0.89	-0.53	0.43	0.06	92 LYS	CG	0.89	-0.09	-0.04	-0.61	-0.02	-0.19	-0.47	-0.27
10 ARG	CB	1.04	-0.93	-0.17	-0.89	0.00	-0.02	-0.59	-0.35	93 LYS	CD	1.74	-0.36	-0.07	0.21	0.09	-0.18	-0.44	-0.08
11 ARG	CG	1.15	0.13	-0.16	-0.50	-0.08	-0.42	-0.55	-0.40	94 LYS	CE	1.07	0.41	-0.34	-0.04	0.45	0.49	-0.19	0.10
12 ARG	CD	1.35	-0.10	-0.09	-0.18	0.25	0.02	-0.68	-0.15	95 LYS	NZ	1.31	0.87	1.07	0.23	1.45	1.09	0.81	0.65
13 ARG	NE	1.43	0.06	0.61	-0.31	0.22	-0.22	-0.25	-0.20	96 MET	N	2.43	0.40	-2.24	-2.02	1.43	0.77	0.18	0.06
14 ARG	CZ	0.58	-0.72	0.73	1.06	-0.17	-0.78	-0.61	-0.83	97 MET	CA	0.43	-1.16	1.64	-0.82	-1.11	-0.59	-1.09	-0.47
15 ARG	NH1	0.97	-0.24	0.00	-0.15	0.33	0.08	0.04	-0.03	98 MET	C	-2.21	1.65	2.48	1.02	0.03	-0.30	-0.60	-0.76
16 ARG	NH2	0.90	-0.15	0.11	-0.01	0.30	-0.09	0.30	0.10	99 MET	O	-2.03	-0.87	1.03	1.05	-1.01	-1.15	0.33	-0.08
17 ASN	N	1.84	1.03	-2.48	-1.54	0.83	0.29	0.31	0.69	100 MET	CB	1.44	-1.10	1.02	-0.00	-0.51	-0.51	-1.13	-0.81
18 ASN	CA	0.38	-0.06	1.76	-0.95	-0.69	-0.62	-0.62	-0.65	101 MET	CG	0.80	-0.58	-0.33	-1.13	-0.51	-0.96	-1.18	-0.73
19 ASN	C	-2.30	1.27	1.32	0.41	0.58	-0.33	-0.70	-0.76	102 MET	SD	0.22	-1.08	-0.60	0.28	-1.12	-1.17	-0.74	-1.25
20 ASN	O	-1.61	-0.64	0.79	0.80	-0.67	-0.51	0.58	0.01	103 MET	CE	0.11	-0.45	-0.74	-0.11	-0.80	-0.72	-1.25	-1.01
21 ASN	CB	0.99	-0.41	0.11	-0.64	0.08	-0.27	-0.44	-0.45	104 PHE	N	1.62	1.21	-2.07	-2.24	0.76	0.59	0.20	-0.03
22 ASN	CG	1.01	-0.37	-0.11	-0.13	-0.10	-0.76	-0.88	-0.77	105 PHE	CA	0.82	-0.68	0.41	-1.11	-0.95	-0.47	-1.42	-1.14
23 ASN	OD1	-0.81	-0.35	0.75	0.59	-0.13	-0.23	0.40	-0.15	106 PHE	C	-2.34	0.01	-0.96	0.11	0.26	-0.39	-0.80	-1.06
24 ASN	ND2	0.86	-0.24	-0.17	-0.14	0.11	-0.10	-0.09	0.01	107 PHE	O	-2.14	-1.07	0.33	0.53	-1.13	-0.89	0.46	-0.09
25 ASP	N	1.28	0.32	-2.70	-1.54	0.78	0.58	0.26	0.49	108 PHE	CB	0.73	-0.92	-0.51	-1.05	-0.93	-0.71	-1.25	-1.01
26 ASP	CA	1.00	0.23	0.18	-0.61	-0.70	-0.46	-0.19	-0.32	109 PHE	CG	1.25	-0.87	0.18	-0.63	-1.02	-1.32	-1.11	-1.60
27 ASP	C	-2.31	0.95	0.30	0.52	0.28	-0.29	-0.42	-0.64	110 PHE	CD1	0.84	-0.92	-0.96	-0.87	-1.07	-1.13	-1.20	-1.12
28 ASP	O	-1.63	-0.60	0.99	1.11	-0.68	-0.55	0.52	0.12	111 PHE	CD2	0.32	-0.90	-1.00	-0.54	-1.01	-0.99	-1.19	-1.11
29 ASP	CB	1.02	-0.59	0.19	-0.53	-0.09	-0.27	-0.29	-0.33	112 PHE	CE1	0.32	-0.86	-1.03	-0.32	-1.35	-1.29	-1.19	-1.16
30 ASP	CG	0.13	-0.15	0.63	-0.42	-0.26	-0.15	0.41	0.12	113 PHE	CE2	0.28	-0.92	-1.02	-0.19	-1.21	-1.27	-1.07	-1.11
31 ASP	OD1	-0.53	0.47	0.63	0.78	0.02	0.62	1.35	0.68	114 PHE	CZ	0.33	-0.81	-0.83	0.06	-1.21	-1.36	-1.23	-1.25
32 ASP	OD2	-0.07	-0.59	0.78	1.01	0.21	0.52	1.33	0.57	115 PRO	N	2.63	0.84	-1.67	-1.56	0.48	-0.12	-0.98	-0.35
33 CYS	N	1.13	1.60	-2.41	-2.35	0.62	-0.11	0.29	0.10	116 PRO	CA	0.71	-0.52	0.26	-0.91	-0.42	-0.29	-0.82	-0.33
34 CYS	CA	0.78	-0.80	0.67	-0.38	-0.66	-0.74	-0.93	-0.80	117 PRO	C	-2.24	1.31	2.01	0.88	0.70	-0.30	-0.55	-0.76
35 CYS	C	-1.99	0.07	4.00	0.97	-0.24	-0.80	-1.10	-1.06	118 PRO	O	-1.61	-0.52	0.33	0.93	-0.68	-0.55	0.23	-0.29
36 CYS	O	-2.23	-1.36	0.42	0.28	-1.14	-1.14	0.42	-0.45	119 PRO	CB	0.67	0.16	0.14	0.21	-0.22	-0.37	-0.87	-0.63
37 CYS	CB	0.91	-0.80	-0.06	-0.93	-0.77	-1.00	-1.16	-1.01	120 PRO	CG	0.68	-0.43	-0.45	-0.16	-0.16	-0.32	-0.81	-0.37
38 CYS	SG	0.19	-0.84	-0.95	-0.69	-0.81	-1.06	-0.73	-0.84	121 PRO	CD	0.90	-0.29	-1.42	-1.03	-0.15	0.10	-0.79	-0.27
39 GLN	N	1.22	1.60	-2.84	-1.78	0.59	1.07	0.53	0.64	122 SER	N	1.70	0.91	-2.17	-1.62	0.42	0.57	0.11	0.09
40 GLN	CA	1.15	0.18	0.09	-1.14	-1.18	-0.41	-0.91	-0.61	123 SER	CA	0.90	-0.58	0.30	-0.76	-0.73	-0.34	-0.94	-0.56
41 GLN	C	-2.65	0.60	1.94	0.78	-0.07	-0.08	-0.62	-0.78	124 SER	C	-2.28	0.70	2.21	0.59	0.07	-0.16	-0.35	-0.62
42 GLN	O	-1.76	-0.51	0.30	0.95	-0.91	-0.41	0.60	0.12	125 SER	O	-1.83	-0.53	0.60	0.63	-0.90	-0.57	0.63	0.09
43 GLN	CB	0.47	-0.77	0.21	-0.69	-0.35	-0.43	-0.82	-0.69	126 SER	CB	0.57	-0.38	0.04	-0.58	-0.26	-0.13	-0.45	-0.39
44 GLN	CG	0.73	-0.48	-0.52	-0.72	-0.21	-0.27	-0.59	-0.44	127 SER	OG	-0.42	-0.34	0.05	-0.19	-0.41	-0.21	0.38	-0.11
45 GLN	CD	1.32	-0.79	0.10	0.32	-0.72	-0.74	-0.82	-0.65	128 THR	N	1.64	0.92	-2.22	-1.74	0.41	0.51	0.17	0.28
46 GLN	OE1	0.01	-0.72	0.32	0.41	-0.20	-0.22	0.28	-0.08	129 THR	CA	0.74	-0.96	0.20	-0.90	-0.96	-0.56	-0.96	-0.70
47 GLN	NE2	0.49	-0.25	-0.23	-0.22	-0.01	-0.12	-0.01	-0.09	130 THR	C	-2.35	-0.06	3.84	1.35	0.23	-0.71	-0.83	-0.76
48 GLU	N	1.80	0.55	-2.80	-1.79	1.10	1.07	0.41	0.94	131 THR	O	-1.95	-0.67	0.93	0.45	-1.04	-0.88	0.61	-0.17
49 GLU	CA	1.11	-0.04	1.72	-0.92	-0.74	-0.30	-0.71	-0.33	132 THR	CB	0.98	-0.54	0.30	-0.69	0.01	-0.22	-0.34	-0.28
50 GLU	C	-2.62	1.24	3.89	0.32	0.14	-0.07	-0.60	-0.68	133 THR	CG1	-0.23	-0.41	0.66	-0.37	-0.30	-0.46	0.20	-0.09
51 GLU	O	-1.64	-0.54	1.68	1.08	-0.72	-0.45	0.69	0.29	134 THR	CG2	0.75	-0.04	-0.51	-0.24	-0.29	-0.62	-0.74	-0.77
52 GLU	CB	1.18	-0.81	0.46	-0.71	-0.13	-0.19	-0.41	-0.36	135 TRP	N	1.13	0.09	-2.08	-2.18	0.68	1.12	0.40	0.05
53 GLU	CG	0.72	-0.36	-0.08	-0.53	-0.03	-0.20	-0.48	-0.43	136 TRP	CA	0.97	-0.91	3.52	-1.23	-0.81	-0.81	-1.30	-1.13
54 GLU	CD	0.69	-0.98	0.55	0.21	-0.15	-0.24	-0.02	-0.32	137 TRP	C	-2.31	-0.04	4.00	0.13	-1.27	-0.54	-1.04	-1.56
55 GLU	OE1	0.04	-0.86	0.93	1.49	0.57	0.22	1.13	0.51	138 TRP	O	-2.03	-1.42	0.47	0.12	-1.10	-0.55	-0.26	-0.73
56 GLU	OE2	-0.14	-0.36	1.28	1.23	0.49	0.44	0.94	0.43	139 TRP	CB	0.75	-1.19	0.10	1.72	0.05	-0.68	-0.94	-0.77
57 GLY	N	1.32	0.30	-1.87	-1.74	0.34	0.42	0.00	0.13	140 TRP	CG	1.80	-1.43	1.72	0.05	-0.68	-0.94	-0.77	-0.88
58 GLY	CA	0.81	-0.21	-0.38	-0.78	-0.42	-0.37	-0.75	-0.53	141 TRP	CD1	0.55	-0.80	-1.20	-0.46	-0.68	-0.76	-0.76	-0.78
59 GLY	C	-1.72	0.21	0.97	-0.03	-0.12	-0.66	-0.90	-0.80	142 TRP	CD2	3.19	-0.94	0.60	0.51	-1.26	-1.12	-0.25	-1.60
60 GLY	O	-1.63	-0.59																

Table 3. (continued)

		104 PHE N	105 PHE CA	106 PHE C	107 PHE O	108 PHE CB	109 PHE CG	110 PHE CD1	111 PHE CD2	112 PHE CE1	113 PHE CE2	114 PHE CZ		104 PHE N	105 PHE CA	106 PHE C	107 PHE O	108 PHE CB	109 PHE CG	110 PHE CD1	111 PHE CD2	112 PHE CE1	113 PHE CE2	114 PHE CZ			
0	SAS	SAS	2.28	1.89	2.14	1.47	1.83	2.20	1.72	1.71	1.52	1.54	1.49	83	LEU	CB	0.99	-1.13	0.38	-1.19	-0.86	-1.09	-0.99	-0.95	-1.20	-1.18	-1.10
1	ALA	N	1.89	0.52	-2.41	-1.87	0.35	0.62	0.30	0.11	0.20	0.23	0.26	84	LEU	CG	0.85	-0.71	-0.51	-1.28	-0.67	-0.68	-0.98	-0.85	-1.14	-0.99	-1.00
2	ALA	CA	0.67	-0.50	-0.08	-0.80	-0.85	-0.97	-0.86	-0.83	-0.82	-0.84	-0.84	85	LEU	CD1	0.53	-0.81	-0.76	0.06	-1.06	-1.54	-1.13	-1.26	-1.19	-1.19	-1.30
3	ALA	C	-2.38	1.27	2.14	0.54	0.04	0.36	-1.00	-1.01	-1.05	-0.85	-0.59	86	LEU	CD2	0.79	-0.58	-0.42	0.17	-0.98	-1.45	-1.11	-1.14	-1.25	-1.28	-1.33
4	ALA	O	-1.91	-0.81	0.66	0.46	-0.94	0.37	-0.46	-0.23	-0.08	0.16	0.18	87	LYS	N	1.57	0.38	-2.65	-1.76	0.92	1.46	0.56	0.65	0.36	0.56	0.44
5	ALA	CB	0.70	-0.86	-0.29	-0.65	-0.47	-0.95	-0.77	-0.71	-0.96	-0.91	-0.95	88	LYS	CA	0.96	-0.05	0.44	-1.01	-0.69	-0.71	-0.56	-0.76	-0.35	-0.51	-0.59
6	ARG	N	2.35	0.85	-2.48	-1.79	0.76	1.24	0.80	0.37	0.42	0.54	0.17	89	LYS	C	-2.66	0.38	2.18	0.41	-0.26	-0.13	-1.04	-0.93	-0.72	-0.57	-0.62
7	ARG	CA	0.85	-0.26	0.10	-0.89	-0.83	-0.52	-0.74	-0.72	-0.61	-0.83	-0.88	90	LYS	O	-1.76	-1.03	0.26	0.51	-0.78	0.35	-0.31	-0.02	0.16	0.38	0.37
8	ARG	C	-2.31	0.79	1.37	0.72	0.31	0.28	-1.05	-0.96	-0.85	-0.90	-0.70	91	LYS	CB	1.36	-0.72	-0.32	-0.86	0.01	-0.61	-0.23	-0.39	-0.54	-0.58	-0.56
9	ARG	O	-1.87	-0.98	0.51	0.50	-0.81	0.50	-0.22	-0.29	0.01	0.05	0.30	92	LYS	CG	1.32	-0.22	-0.48	0.49	-0.23	0.67	-0.21	-0.37	-0.45	-0.45	-0.40
10	ARG	CB	0.82	-0.63	-0.29	-0.87	-0.38	-0.84	-0.43	-0.54	-0.86	-0.76	-0.73	93	LYS	CD	1.93	-0.29	-0.26	-0.06	0.15	-0.64	-0.41	-0.16	-0.15	-0.36	-0.36
11	ARG	CG	0.83	-0.49	-0.40	-0.60	-0.32	-1.08	-0.63	-0.44	-0.61	-0.58	-0.61	94	LYS	CE	1.55	0.25	0.21	0.00	0.26	-0.37	0.09	0.13	0.02	0.11	-0.03
12	ARG	CD	1.35	-0.24	-0.12	-0.31	-0.27	-0.99	-0.46	-0.43	-0.51	-0.60	-0.72	95	LYS	NZ	1.91	0.87	1.42	-0.01	1.01	1.00	1.07	1.08	0.90	0.77	0.85
17	ASN	N	1.62	0.37	-2.68	-1.85	0.64	1.16	0.61	0.15	0.46	0.50	0.66	96	MET	N	1.62	0.79	-2.36	-2.14	0.72	1.21	0.82	0.28	0.28	0.24	0.30
18	ASN	CA	0.27	-0.24	0.09	-0.97	-0.59	-0.27	-0.51	-0.77	-0.55	-0.61	-0.57	97	MET	CA	1.24	-0.67	0.06	-1.04	-0.92	-0.87	-0.93	-0.87	-0.93	-0.83	-0.83
19	ASN	C	-2.39	0.06	1.43	0.22	-0.03	0.38	-0.96	-0.81	-0.75	-0.82	-0.36	98	MET	C	-2.03	0.40	-0.96	0.32	-0.51	0.18	-0.96	-1.01	-1.04	-1.03	-0.84
20	ASN	O	-1.82	-1.22	0.61	0.70	-0.91	0.52	-0.43	-0.20	0.10	0.28	0.27	99	MET	O	-2.24	-1.14	0.11	0.53	-1.06	-0.67	-0.87	-0.53	-0.29	-0.16	0.09
21	ASN	CB	0.69	-0.46	0.09	-0.71	0.00	-0.75	-0.41	-0.55	-0.50	-0.65	-0.45	100	MET	CB	0.79	-0.94	0.25	-1.12	-0.93	-1.02	-1.08	-1.02	-1.36	-1.22	-1.21
22	ASN	CG	0.43	-0.07	-0.03	-0.33	-0.43	-0.66	-0.69	-0.71	-0.61	-0.81	-0.71	101	MET	CG	0.63	-0.45	-0.49	-0.88	-0.71	-1.31	-1.13	-0.99	-1.29	-1.27	-1.36
23	ASN	OD1	-0.91	-0.34	-0.33	0.27	-0.32	0.41	-0.03	0.03	0.13	0.27	0.21	102	MET	SD	0.24	-1.40	-0.79	0.41	-1.25	-1.11	-1.20	-1.19	-1.19	-1.08	-1.23
24	ASN	ND2	0.44	-0.19	-0.38	-0.56	-0.04	0.06	0.02	-0.06	-0.07	0.05	-0.11	103	MET	CE	0.02	-1.12	-1.04	-0.11	-1.01	-1.59	-1.11	-1.11	-1.16	-1.11	-1.24
25	ASP	N	1.98	0.68	-2.71	-1.62	0.42	1.49	0.65	0.50	0.65	0.48	0.85	104	PHE	N	1.12	0.72	-2.13	-2.29	0.54	1.28	0.22	0.26	0.25	0.25	0.13
26	ASP	CA	0.92	0.63	0.65	-0.74	-0.83	0.66	-0.27	-0.38	-0.37	-0.28	-0.28	105	PHE	CA	0.74	-0.52	1.13	-1.31	-1.14	0.76	-0.74	-0.92	-0.92	-0.93	-0.94
27	ASP	C	-2.41	0.69	1.88	0.54	0.11	0.52	-0.76	-0.62	-0.52	-0.31	-0.42	106	PHE	C	-2.09	1.16	-0.35	0.38	-0.34	0.72	-0.88	-1.11	-0.94	-0.66	-0.68
28	ASP	O	-1.86	-0.52	0.19	0.68	-0.88	0.26	-0.25	-0.04	0.34	0.48	0.47	107	PHE	O	-2.29	-1.34	0.42	0.32	-1.11	0.49	-0.58	-0.56	0.07	0.01	0.12
29	ASP	CB	0.64	-0.19	0.74	-0.44	-0.14	-0.15	-0.29	-0.30	-0.47	-0.39	-0.18	108	PHE	CB	0.56	-1.13	-0.35	-1.09	-0.77	-1.17	-1.14	-1.13	-1.30	-1.26	-1.20
30	ASP	CG	0.13	0.44	0.86	0.48	-0.22	0.75	-0.34	-0.05	0.11	0.00	0.11	109	PHE	CG	1.32	-0.75	0.73	0.51	-1.17	-1.39	-1.44	-1.34	-1.44	-1.57	-1.67
31	ASP	OD1	-0.42	0.25	0.40	0.91	0.10	1.98	0.65	0.75	0.80	0.84	0.81	110	PHE	CD1	0.26	-0.73	-0.87	-0.60	-1.13	-1.45	-1.05	-1.29	-1.16	-1.18	-1.09
32	ASP	OD2	-0.14	-0.42	0.72	1.26	0.14	1.62	0.61	0.66	0.76	0.84	0.91	111	PHE	CD2	0.30	-0.90	-1.11	-0.57	-1.13	-1.34	-1.28	-1.10	-1.15	-1.15	-1.25
33	CYS	N	1.12	0.51	-2.18	-2.31	0.58	1.16	0.22	0.12	-0.02	0.25	0.30	112	SER	N	1.70	0.51	-2.59	-1.83	0.45	1.00	0.34	0.32	0.28	0.24	0.40
34	CYS	CA	0.70	-0.97	-0.29	-1.24	-0.96	-0.73	-0.97	-0.85	-0.79	-0.65	-0.71	113	SER	CA	0.82	-0.12	0.79	-0.97	-0.42	-0.85	-0.76	-0.79	-0.78	-0.62	-0.63
35	CYS	C	-1.90	-0.38	-0.09	0.13	-0.28	-0.75	-1.01	-1.30	-0.94	-0.91	-0.74	114	SER	O	-2.59	2.14	1.27	0.96	-0.08	0.15	-0.57	-0.62	-0.35	-0.42	-0.31
36	CYS	O	-2.21	-1.34	0.39	0.12	-1.00	-0.36	-0.50	-0.86	-0.15	-0.06	0.03	115	PRO	N	2.57	0.40	-1.72	-1.29	0.04	0.05	-0.68	-1.25	-0.46	-0.94	-0.57
37	CYS	CB	0.50	-0.81	-0.45	-1.01	-0.79	-1.49	-1.09	-1.11	-1.02	-1.13	-1.08	116	PRO	CA	0.50	-0.92	0.32	-0.89	-0.60	-0.77	-0.70	-0.64	-0.46	-0.62	-0.63
38	CYS	SG	0.06	-0.82	-0.57	-0.25	-0.91	-0.53	-0.79	-0.82	-0.81	-0.92	-0.85	117	PRO	C	-2.59	2.14	1.27	0.96	-0.08	0.15	-0.57	-0.62	-0.35	-0.42	-0.31
39	GLN	N	2.28	1.09	-2.53	-1.86	1.05	1.81	0.55	0.69	0.80	0.29	0.69	118	PRO	O	-1.77	-0.28	0.31	0.88	-0.79	0.42	-0.41	0.04	-0.02	0.29	
40	GLN	CA	1.07	-0.46	0.92	-0.94	-0.74	-0.45	-0.53	-0.66	-0.59	-0.57	-0.85	119	PRO	CB	0.32	-0.13	-0.46	-0.20	-0.37	-0.92	-0.52	-0.61	-0.71	-0.76	-0.63
41	GLN	C	-2.38	1.43	1.45	0.52	0.53	1.39	-1.05	-0.74	-0.56	-0.70	-0.44	120	PRO	CG	0.58	-0.35	0.05	0.14	-0.44	-1.08	-0.59	-0.58	-0.67	-0.79	-0.74
42	GLN	O	-1.78	-1.01	0.69	0.76	-0.71	0.25	-0.48	-0.09	0.29	0.07	0.11	121	PRO	CD	-0.60	-0.73	0.23	-0.35	-0.32	1.13	-0.21	-0.01	-0.06	0.05	0.14
43	GLN	CB	1.25	-0.60	0.61	0.74	-0.14	-0.42	-0.58	-0.44	-0.79	-0.75	-0.73	122	SER	N	1.70	0.51	-2.59	-1.83	0.45	1.00	0.34	0.32	0.28	0.24	0.40
44	GLN	CG	1.31	-0.25	-0.07	-0.59	-0.02	-0.85	-0.47	-0.29	-0.59	-0.66	-0.51	123	SER	CA	0.82	-0.12	0.79	-0.97	-0.42	-0.85	-0.76	-0.79	-0.78	-0.62	-0.62
45	GLN	CD	1.94	-0.40	-0.07	-0.69	-0.67	-1.59	-0.92	-0.86	-0.88	-0.77	-1.05	124	SER	C	-2.53	0.81	1.80	0.41	-0.08	0.15	-0.57	-0.62	-0.35	-0.42	-0.31
46	GLN	OE1	0.03	-0.70	0.32	0.43	-0.14	0.16	0.28	-0.25	-0.16	0.05	-0.06	125	SER	O	-1.85	-1.11	0.27	0.24	-0.90	0.55	-0.33	-0.09	0.10	0.25	0.33
47	GLN	NE2	0.68	-0.13	-0.05	-0.14	-0.21	0.16	-0.11	0.02	-0																

Table 3. (continued)

		115 PRO N	116 PRO CA	117 PRO C	118 PRO O	119 PRO CB	120 PRO CG	121 PRO CD		115 PRO N	116 PRO CA	117 PRO C	118 PRO O	119 PRO CB	120 PRO CG	121 PRO CD			
0	SAS	SAS	1.34	0.98	1.77	0.78	0.39	0.32	0.72	83	LEU	CB	0.24	-0.49	0.44	-0.72	-0.22	-0.19	0.12
1	ALA	N	1.95	0.79	-2.48	-1.74	0.19	0.44	1.09	84	LEU	CG	-0.17	-0.18	-0.02	-0.90	-0.35	-0.24	0.03
2	ALA	CA	0.48	-0.15	0.80	-0.24	-0.14	-0.33	-0.14	85	LEU	CD1	-0.26	-0.37	-0.38	0.11	-0.48	-0.35	-0.16
3	ALA	C	-1.36	-0.03	0.85	1.11	-0.33	-0.44	-1.38	86	LEU	CD2	-0.43	-0.35	-0.15	0.11	-0.45	-0.44	-0.11
4	ALA	O	-1.16	-0.56	0.84	0.96	-0.06	-0.10	-0.88	87	LYS	N	1.80	1.47	-2.44	-1.73	0.47	1.01	1.37
5	ALA	CB	0.05	-0.40	-0.17	-0.69	-0.37	-0.35	-0.18	88	LYS	CA	0.83	-0.31	0.86	-0.37	-0.08	-0.32	0.06
6	ARG	N	1.63	1.81	-2.36	-1.68	0.34	1.24	1.28	89	LYS	C	-0.97	0.26	1.24	0.48	-0.33	-0.32	-1.61
7	ARG	CA	0.01	-0.49	1.49	-0.30	0.06	-0.27	0.13	90	LYS	O	-1.46	-0.81	0.83	1.05	-0.04	-0.09	-1.09
8	ARG	C	-1.29	0.18	2.77	0.36	-0.50	-0.44	-1.65	91	LYS	CB	0.48	-0.63	0.25	-0.84	0.01	0.02	0.26
9	ARG	O	-1.39	-0.67	1.88	1.13	0.10	-0.18	-1.08	92	LYS	CG	-0.09	-0.27	-0.39	-0.79	-0.21	0.07	0.41
10	ARG	CB	0.49	-0.67	0.24	-0.80	-0.07	-0.26	0.06	93	LYS	CD	0.29	-0.25	0.36	-0.28	0.22	0.10	0.22
11	ARG	CG	-0.08	-0.55	-0.40	-0.88	-0.39	-0.19	0.13	94	LYS	CE	0.78	0.21	0.46	-0.36	0.18	0.31	0.61
12	ARG	CD	0.26	-0.41	-0.60	-0.72	-0.33	-0.03	-0.04	95	LYS	NZ	1.03	0.59	0.54	-0.17	0.95	0.89	0.88
13	ARG	NE	-0.19	-0.38	-0.14	-0.69	-0.17	-0.17	0.04	96	MET	N	2.60	0.66	-2.27	-1.60	0.63	0.67	0.88
14	ARG	CG	-0.81	-1.13	-0.32	0.17	-0.84	-1.01	-0.54	97	MET	CA	0.82	-0.54	1.27	-0.51	0.13	-0.46	-0.31
15	ARG	NH1	-0.27	-0.66	-0.50	-0.73	-0.24	-0.15	-0.18	98	MET	C	-1.67	0.26	2.01	0.34	0.11	-0.49	-1.46
16	ARG	NH2	-0.22	-0.43	-0.50	-0.61	-0.16	-0.27	-0.27	99	MET	O	-1.55	-0.91	0.89	0.94	0.27	-0.11	-1.00
17	ASN	N	2.22	0.94	-2.69	-1.55	0.29	0.60	1.03	100	MET	CB	0.45	-0.42	0.70	-0.67	-0.23	-0.18	-0.16
18	ASN	CA	0.24	-0.71	0.27	-0.31	-0.68	-0.56	-0.28	101	MET	CG	-0.09	-0.30	-0.30	-0.56	-0.39	-0.34	0.09
19	ASN	C	-1.63	0.30	0.89	0.44	-0.35	-0.48	-1.54	102	MET	SD	-0.97	-0.82	-0.52	0.17	-0.88	-0.82	-0.80
20	ASN	O	-1.51	-0.81	0.54	0.66	-0.21	-0.22	-1.25	103	MET	CE	-0.30	-0.33	-0.74	-0.31	-0.64	-0.38	-0.28
21	ASN	CB	0.37	-0.33	0.28	-0.72	-0.16	-0.03	-0.01	104	PHE	N	2.54	0.44	-2.63	-1.76	0.27	0.54	0.78
22	ASN	CG	-0.23	-1.20	0.03	-0.24	-0.65	-0.36	-0.62	105	PHE	CA	0.38	-0.94	2.11	-0.28	-0.16	-0.38	-0.20
23	ASN	OD1	-0.38	-0.96	0.02	0.26	-0.44	-0.16	-0.16	106	PHE	C	-1.72	0.30	1.27	0.30	-0.47	-0.08	-1.49
24	ASN	ND2	-0.41	-0.58	-0.50	-0.52	-0.17	-0.09	0.08	107	PHE	O	-1.28	-0.90	0.95	0.90	-0.16	0.19	-1.04
25	ASP	N	1.81	1.38	-2.85	-1.48	0.18	0.93	1.21	108	PHE	CB	0.04	-0.61	-0.07	-0.78	-0.38	-0.46	-0.35
26	ASP	CA	0.19	-0.41	1.15	0.26	-0.29	-0.34	-0.41	109	PHE	CG	0.05	-0.77	0.16	0.45	-0.94	-1.10	-1.47
27	ASP	C	-1.63	0.18	2.70	1.56	-0.10	-0.32	-1.45	110	PHE	CD1	-0.68	-0.70	-0.57	-0.41	-0.53	-0.60	-0.60
28	ASP	O	-1.55	-0.61	0.78	1.07	-0.07	-0.19	-1.08	111	PHE	CD2	-1.24	-0.64	-0.62	-0.41	-0.62	-0.59	-0.86
29	ASP	CB	0.03	-0.24	0.52	-0.25	-0.44	-0.28	0.20	112	PHE	CE1	-0.45	-0.46	-0.34	0.02	-0.71	-0.68	-0.58
30	ASP	CG	-0.23	-0.80	0.74	0.13	-0.43	-0.39	-0.47	113	PHE	CE2	-0.93	-0.62	-0.42	-0.06	-0.76	-0.79	-0.73
31	ASP	OD1	-0.19	-0.28	0.72	0.76	-0.29	0.40	0.16	114	PHE	CZ	-0.57	-0.63	-0.30	0.25	-0.64	-0.75	-0.58
32	ASP	OD2	0.30	-0.48	0.99	0.86	0.13	0.18	0.32	115	PRO	N	1.12	-0.02	-1.39	-1.67	0.17	-0.08	0.13
33	CYS	N	2.40	1.04	-2.62	-1.63	0.50	0.62	0.59	116	PRO	CA	-0.03	-0.68	1.39	-0.73	-0.05	-0.23	-0.29
34	CYS	CA	0.16	-0.71	-0.23	-0.78	-0.38	-0.51	-0.46	117	PRO	C	-1.39	1.41	-0.09	0.37	0.03	0.04	-1.25
35	CYS	C	-1.76	0.11	-0.05	0.36	-0.38	-0.22	-1.48	118	PRO	O	-1.66	-0.69	0.34	0.69	-0.22	-0.32	-1.20
36	CYS	O	-1.47	-0.68	0.60	0.36	-0.08	-0.32	-1.05	119	PRO	CB	0.15	-0.04	0.05	-0.27	-0.06	-0.21	-0.10
37	CYS	CB	0.37	-0.37	-0.49	-0.75	-0.22	-0.40	-0.42	120	PRO	CG	-0.06	-0.21	0.06	-0.38	-0.21	-0.34	-0.15
38	CYS	SG	-0.94	-0.71	-0.63	-0.22	-0.43	-0.39	-0.58	121	PRO	CD	0.16	-0.28	-1.21	-1.23	-0.11	-0.16	0.17
39	GLN	N	2.41	1.14	-2.69	-1.97	0.68	0.93	1.15	122	SER	N	1.54	0.69	-2.64	-1.57	0.04	0.51	0.60
40	GLN	CA	1.23	-0.54	0.29	-0.05	0.06	-0.37	-0.26	123	SER	CA	0.67	-0.54	0.63	-0.30	-0.35	-0.46	-0.32
41	GLN	C	-1.10	0.02	0.64	0.42	-0.56	-0.42	-1.71	124	SER	C	-1.47	-0.10	0.06	0.31	-0.18	-0.56	-1.43
42	GLN	O	-1.23	-0.41	0.15	0.72	0.10	-0.10	-0.98	125	SER	O	-1.54	-0.72	0.39	0.92	-0.21	-0.25	-1.08
43	GLN	CB	0.33	-0.85	0.26	-1.08	-0.27	-0.28	-0.20	126	SER	CB	-0.11	-0.40	-0.25	-0.63	-0.38	-0.23	-0.02
44	GLN	CG	-0.23	-0.49	-0.21	-0.88	-0.32	-0.03	0.05	127	SER	OG	-0.26	-0.60	0.14	-0.39	-0.36	-0.20	-0.35
45	GLN	CD	-0.21	-1.19	0.01	0.62	-0.97	-0.84	-0.65	128	THR	N	2.29	0.82	-2.61	-1.54	0.47	1.00	1.09
46	GLN	OE1	-0.04	-0.89	-0.16	0.12	-0.34	-0.33	-0.28	129	THR	CA	0.27	-1.09	1.24	-0.40	-0.31	-0.37	-0.02
47	GLN	NE2	-0.40	-0.49	-0.07	-0.40	-0.31	-0.15	-0.20	130	THR	C	-1.78	0.20	1.90	0.74	-0.60	-0.46	-1.41
48	GLU	N	2.16	1.62	-2.86	-1.79	0.19	0.78	1.12	131	THR	O	-1.33	-0.82	0.72	0.88	0.03	0.02	-0.95
49	GLU	CA	1.32	-0.28	0.43	-0.06	0.06	-0.51	-0.09	132	THR	CB	0.57	-0.40	0.46	-0.82	-0.26	-0.01	-0.08
50	GLU	C	-1.28	0.06	1.04	0.89	-0.44	-0.47	-1.60	133	THR	OG1	-0.31	-0.56	0.21	-0.55	-0.39	-0.14	-0.19
51	GLU	O	-1.29	-0.30	1.05	1.38	0.05	-0.20	-1.06	134	THR	CG2	-0.75	-0.49	-0.39	-0.36	-0.53	-0.43	-0.16
52	GLU	CB	0.46	-0.33	0.67	-0.89	-0.54	-0.23	-0.07	135	TRP	N	2.20	1.76	-2.61	-1.57	0.10	0.16	0.86
53	GLU	CG	-0.02	-0.12	0.56	-0.29	-0.44	-0.29	-0.06	136	TRP	CA	0.07	-0.80	2.23	-0.38	-0.68	-0.67	-0.37
54	GLU	CD	0.52	-0.72	0.51	0.51	-0.85	-0.69	-0.30	137	TRP	C	-2.07	1.64	0.45	0.79	0.06	-0.28	-1.62
55	GLU	OE1	0.56	-0.41	0.95	0.90	-0.22	0.08	0.11	138	TRP	O	-1.01	-0.17	1.81	0.93	0.22	-0.10	-0.98
56	GLU	OE2	0.52	-0.08	1.13	0.87	-0.09	0.09	0.42	139	TRP	CB	-0.10	-0.61	0.24	-0.79	-0.62	-0.82	-0.47
57	GLY	N	0.68	0.05	-2.18	-1.43	0.21	0.41	0.45	140	TRP	CG	-0.61	-1.27	-0.49	0.48	-1.31	-1.49	-1.42
58	GLY	CA	-0.07	-0.49	-0.32	-0.59	-0.33	-0.29	-0.27	141	TRP	CD1	-1.25	-0.93	-0.70	-0.79	-0.74	-0.96	-0.95
59	GLY	C	-1.00	-0.35	0.19	0.28	-0.64	-0.47	-1.17	142	TRP	CD2	-1.13	-1.44	-0.05	1.09	-1.48	-1.54	-1.75
60	GLY	O	-1.58	-0.93	0.36	0.80	-0.19	-0.28	-1.20	143	TRP	NE1	-0.87	-0.67	-0.54	-1.14	-0.53	-0.73	-0.98
61	HIS	N	2.86	0.45	-2.91	-1.50	0.26	0.72	0.96	144	TRP	CE2	-1.38	-1.55	0.49	0.92	-1.50	-1.30	-1.80
62	HIS	CA	2.35	-0.39	0.15	-0.50	0.16	-0.32	-0.24	145	TRP	CE3	-1.45	-0.71	-0.61	0.21	-1.02	-0.95	-0.95
63	HIS	C	-1.68	0.27	1.80	0.42	0.04</td												

Table 3. (continued)

		122 SER N	123 SER CA	124 SER C	125 SER O	126 SER CB	127 SER OG		122 SER N	123 SER CA	124 SER C	125 SER O	126 SER CB	127 SER OG	
0 SAS	SAS	1.63	0.94	2.00	0.92	0.53	0.55	83 LEU	CB	0.82	-0.73	0.46	-0.84	-0.26	-0.21
1 ALA	N	1.60	0.46	-2.38	-1.80	0.19	-0.63	84 LEU	CG	0.65	-0.28	-0.32	-0.93	-0.32	-0.13
2 ALA	CA	0.84	-0.38	0.36	-0.45	-0.48	-0.46	85 LEU	CD1	0.53	-0.63	-0.64	0.09	-0.38	0.11
3 ALA	C	-2.16	0.37	2.14	0.87	0.00	0.39	86 LEU	CD2	0.63	-0.47	-0.55	0.21	-0.43	0.09
4 ALA	O	-1.74	-0.47	1.13	0.79	-0.69	-0.43	87 LYS	N	1.14	0.65	-2.54	-1.88	0.73	-0.53
5 ALA	CB	0.33	-0.62	-0.10	-0.67	-0.23	-0.25	88 LYS	CA	1.08	-0.43	0.57	-0.32	-0.53	-0.48
6 ARG	N	1.47	0.83	-2.44	-1.90	0.73	-0.65	89 LYS	C	-2.23	0.74	2.10	0.82	0.04	0.16
7 ARG	CA	1.12	-0.39	0.87	-0.63	-0.35	-0.55	90 LYS	O	-1.76	-0.67	0.56	0.74	-0.53	-0.17
8 ARG	C	-2.18	1.21	2.98	0.62	-0.01	0.28	91 LYS	CB	0.54	-0.81	0.38	-0.89	-0.12	-0.63
9 ARG	O	-1.69	-0.44	1.06	0.52	-0.50	-0.21	92 LYS	CG	0.86	-0.17	0.27	-0.77	-0.14	-0.17
10 ARG	CB	0.62	-0.55	0.02	-0.92	-0.19	-0.63	93 LYS	CD	1.28	-0.69	-0.01	-0.08	0.00	-0.22
11 ARG	CG	0.46	-0.42	-0.49	-0.88	-0.36	-0.40	94 LYS	CE	1.20	-0.19	-0.05	-0.23	0.06	-0.24
12 ARG	CD	0.72	-0.34	-0.41	-0.54	-0.11	-0.47	95 LYS	NZ	1.04	0.21	0.40	-0.25	0.51	-0.10
13 ARG	NE	1.26	-0.34	-0.24	-0.61	-0.03	-0.43	96 MET	N	1.69	0.89	-2.31	-1.82	0.55	-0.41
14 ARG	CZ	0.67	-0.90	-0.69	0.27	-0.38	0.07	97 MET	CA	0.93	-0.59	0.70	-0.49	-0.40	-0.34
15 ARG	NH1	0.41	-0.55	-0.70	-0.52	-0.24	-0.36	98 MET	C	-2.14	0.29	2.21	0.57	0.03	0.06
16 ARG	NH2	0.70	-0.41	-0.22	-0.40	-0.11	-0.21	99 MET	O	-1.61	-0.79	0.62	0.63	-0.57	-0.16
17 ASN	N	1.82	0.78	-2.43	-1.90	0.43	-0.85	100 MET	CB	0.44	-0.73	0.08	-0.89	-0.27	-0.41
18 ASN	CA	0.21	-0.64	0.25	-0.69	-0.66	-0.72	101 MET	CG	0.59	-0.34	-0.15	-0.57	-0.14	-0.23
19 ASN	C	-2.26	0.36	1.32	-0.04	-0.22	-0.02	102 MET	SD	0.14	-0.93	-0.35	0.57	-0.45	0.33
20 ASN	O	-1.75	-0.57	0.44	0.59	-0.72	-0.44	103 MET	CE	0.12	-0.55	-0.60	0.06	-0.39	-0.14
21 ASN	CB	0.26	-0.58	-0.23	-0.93	-0.27	-0.81	104 PHE	N	1.69	0.79	-2.56	-1.84	0.49	-0.59
22 ASN	CG	0.05	-0.31	0.05	-0.29	-0.41	-0.41	105 PHE	CA	0.52	-0.13	0.83	-1.07	-0.56	-0.74
23 ASN	OD1	-1.04	-0.70	0.03	0.24	-0.44	-0.53	106 PHE	C	-2.56	0.81	1.80	0.25	0.22	0.25
24 ASN	ND2	-0.02	-0.60	-0.32	-0.59	-0.28	-0.61	107 PHE	O	-1.83	-0.99	0.43	0.25	-0.63	-0.32
25 ASP	N	1.82	0.59	-2.66	-1.79	0.18	-1.02	108 PHE	CB	0.46	-0.42	0.08	-0.90	-0.07	-0.32
26 ASP	CA	0.64	-0.60	0.54	-0.28	-0.67	-0.63	109 PHE	CG	1.03	-0.86	-0.65	0.57	-0.33	1.14
27 ASP	C	-2.61	0.42	0.95	0.44	-0.02	0.08	110 PHE	CD1	0.36	-0.76	-0.73	-0.34	-0.49	-0.22
28 ASP	O	-1.87	-0.61	0.71	0.77	-0.68	-0.39	111 PHE	CD2	0.34	-0.79	-0.87	-0.10	-0.39	-0.03
29 ASP	CB	-0.01	-0.43	0.30	-0.65	-0.30	-0.75	112 PHE	CE1	0.31	-0.70	-0.75	0.06	-0.68	-0.08
30 ASP	CG	-0.69	-0.65	0.57	-0.54	-0.81	-0.90	113 PHE	CE2	0.27	-0.77	-0.78	0.23	-0.51	0.03
31 ASP	OD1	-1.54	-0.44	0.39	0.62	-0.72	-1.09	114 PHE	CZ	0.43	-0.61	-0.59	0.29	-0.56	0.12
32 ASP	OD2	-0.93	-0.47	0.42	0.87	-0.60	-0.95	115 PRO	N	1.57	0.71	-1.47	-1.55	-0.12	-0.24
33 CYS	N	1.16	0.53	-2.19	-1.79	0.37	-0.39	116 PRO	CA	0.69	-0.54	-0.08	-0.75	-0.40	-0.61
34 CYS	CA	0.71	-0.53	1.33	-0.98	-0.38	-0.65	117 PRO	C	-2.62	0.64	0.06	0.41	-0.27	0.16
35 CYS	C	-2.42	1.44	0.57	-0.07	0.29	0.18	118 PRO	O	-1.58	-0.29	0.30	0.92	-0.63	-0.37
36 CYS	O	-1.68	-0.97	0.83	0.33	-0.44	-0.18	119 PRO	CB	0.06	-0.34	-0.15	-0.26	-0.37	-0.40
37 CYS	CB	0.30	-0.42	-0.64	-0.81	-0.16	-0.38	120 PRO	CG	0.54	-0.44	-0.54	-0.32	-0.22	-0.23
38 CYS	SG	-0.39	-0.58	-0.89	-0.14	-0.61	0.22	121 PRO	CD	0.62	-0.30	-1.39	-1.12	-0.02	-0.34
39 GLN	N	1.65	0.80	-2.44	-1.98	0.51	-0.64	122 SER	N	0.99	0.48	-2.36	-1.69	0.17	-0.73
40 GLN	CA	0.79	-0.48	1.47	-0.74	-0.59	-0.42	123 SER	CA	0.51	-0.48	-0.23	-0.75	-0.52	-0.50
41 GLN	C	-2.22	0.73	0.37	0.73	-0.04	0.14	124 SER	C	-2.33	-0.24	1.93	0.61	0.11	0.19
42 GLN	O	-1.69	-0.58	0.95	0.42	-0.60	-0.22	125 SER	O	-1.70	-0.78	0.61	0.43	-0.53	-0.42
43 GLN	CB	0.08	-0.70	0.23	-1.04	-0.25	-0.58	126 SER	CB	0.19	-0.51	0.12	-0.54	-0.38	-0.47
44 GLN	CG	0.61	-0.44	-0.49	-0.90	-0.23	-0.52	127 SER	OG	-0.74	-0.49	0.18	-0.45	-0.44	-0.72
45 GLN	CD	0.53	-0.80	0.04	0.00	-0.50	-0.15	128 THR	N	1.17	0.72	-2.48	-1.82	0.15	-1.00
46 GLN	OE1	-0.61	-0.62	0.02	0.21	-0.29	-0.36	129 THR	CA	0.66	-0.85	0.42	-0.81	-0.60	-0.55
47 GLN	NE2	0.40	-0.61	-0.34	-0.49	-0.25	-0.48	130 THR	C	-2.28	0.22	1.40	0.67	-0.16	-0.13
48 GLU	N	1.23	1.42	-2.71	-1.86	0.37	-0.99	131 THR	O	-1.74	-0.78	0.60	0.55	-0.50	-0.27
49 GLU	CA	1.13	-0.37	1.44	-0.34	-0.58	-0.40	132 THR	CB	-0.26	-0.90	-0.10	-0.85	-0.53	-0.75
50 GLU	C	-2.25	1.13	2.82	0.74	0.28	0.72	133 THR	OG1	-0.70	-0.56	-0.03	-0.39	-0.56	-0.84
51 GLU	O	-1.76	-0.15	1.28	0.81	-0.64	-0.36	134 THR	CG2	0.36	-0.40	-0.33	-0.13	-0.43	-0.26
52 GLU	CB	-0.25	-0.48	0.89	-0.84	-0.24	-0.78	135 TRP	N	1.32	0.25	-2.56	-1.89	0.60	-0.32
53 GLU	CG	0.68	0.08	0.52	-0.28	-0.38	-0.70	136 TRP	CA	0.80	-0.20	0.14	-1.06	-0.23	-0.37
54 GLU	CD	-0.01	-0.39	0.34	0.74	-0.67	-0.51	137 TRP	C	-2.44	1.85	3.28	0.46	0.30	0.59
55 GLU	OE1	-0.74	-0.41	0.55	1.20	-0.27	-0.60	138 TRP	O	-1.96	-0.94	0.06	0.32	-0.56	-0.17
56 GLU	OE2	-0.29	-0.13	1.14	1.21	-0.37	-0.61	139 TRP	CB	0.41	-0.55	0.14	-0.65	-0.25	-0.07
57 GLY	N	1.05	-0.08	-2.30	-1.69	0.11	-0.72	140 TRP	CG	0.54	-0.83	-0.22	0.73	-0.38	0.63
58 GLY	CA	0.41	-0.48	-0.25	-0.77	-0.30	-0.51	141 TRP	CD1	0.30	-0.75	-0.93	-0.46	-0.50	-0.31
59 GLY	C	-1.77	-0.17	0.72	0.01	-0.37	-0.28	142 TRP	CD2	0.48	-0.99	-0.03	0.61	-0.78	0.90
60 GLY	O	-1.55	-0.89	0.40	0.42	-0.58	-0.39	143 TRP	NE1	0.33	-0.42	-0.44	-0.46	-0.51	-0.85
61 HIS	N	1.55	1.01	-2.44	-1.82	0.35	-0.69	144 TRP	CE2	0.19	-0.70	-0.70	0.67	-0.98	0.49
62 HIS	CA	0.31	-0.44	0.65	-0.74	-0.58	-0.82	145 TRP	CE3	0.33	-0.89	-0.99	0.07	-0.40	0.45
63 HIS	C	-2.13	0.70	2.94	-0.12	0.24	0.04	146 TRP	CZ2	0.07	-0.88	-0.87	-0.05	-0.63	-0.14
64 HIS	O	-1.78	-0.75	0.87	0.37	-0.53	-0.36	147 TRP	CZ3	-0.13	-0.96	-1.11	0.18	-0.65	0.41
65 HIS	CB	0.27	-0.36	-0.23	-0.77	-0.10	-0.58	148 TRP	CH2	-0.08	-0.67	-1.10	0.09	-0.72	0.06
66 HIS	CG	1.41	-0.40	0.60	0.23	-0.40	0.11	149 TYR	N	1.36	1.05	-2.52	-1.91	0.39	-0.74
67 HIS	CD	-0.46	-0.39	-0.40	-0.31	-0.59	-1.01	150 TYR	CA	0.90	-0.42	1.16	-0.99	-0.34	-0.51
68 HIS	CD2	0.41	-0.42	-0.65	-0.44	-0.36	-0.48	151 TYR	C	-2.45	0.64	1.45	0.55	-0.14	0.01
69 HIS	CE1	0.50	-0.72	-0.36	-0.55	-0.70	-0.52	152 TYR	O	-1.92	-0.95	0.70	0.39	-0.58	-0.55
70 HIS	NE2	0.07	-0.45	-0.03	-0.35	-0.65	-0.95	153 TYR	CB	0.26	-0.61	0.29	-0.90	-0.27	-0.37
71 ILE	N	1.77	0.84	-2.49	-1.80	0.86	-0.25	154 TYR	CG	1.15	-1.01	0.15	0.51	-0.45	0.58
72 ILE	CA	1.59	0.06	1.35	-0.94	-0.62	-0.53	155 TYR	CD1	0.30	-0.64	-1.26	-0.47	-0.48	-0.13
73 ILE	C	-2.66	1.02	1.25	0.90	0.19	0.44	156 TYR	CD2	0.08	-0.51	-0.67	-0.28	-0.36	0.07
74 ILE	O	-1.82	-0.95	0.77	0.36	-0.58	-0.33	157 TYR	CE1	0.24	-0.66	-0.63	-0.20	-0.71	-0.19
75 ILE	CB	0.55	-0.79	0.04	-0.98	-0.46	-0.22	158 TYR	CE2	0.28	-0.67	-0.42	-0.01	-0.59	-0.05
76 ILE</															

Table 3. (continued)

		128	129	130	131	132	133	134		128	129	130	131	132	133	134			
		THR N	THR CA	THR C	THR O	THR CB	THR OG1	THR CG2		THR N	THR CA	THR C	THR O	THR CB	THR OG1	THR CG2			
0	SAS	SAS	1.96	1.30	1.95	1.07	0.93	0.66	0.61	83	LEU	CB	0.75	-0.90	0.33	-0.96	-0.49	-0.26	-0.50
1	ALA	N	1.85	0.87	-2.46	-1.82	0.19	-0.43	0.40	84	LEU	CG	0.92	-0.27	-0.39	-1.32	-0.17	0.09	-0.76
2	ALA	CA	1.11	-0.18	0.74	-0.53	-0.71	-0.52	-0.42	85	LEU	CD1	0.71	-0.72	-0.70	0.03	-0.43	-0.02	-0.78
3	ALA	C	-2.19	1.28	1.95	0.67	-0.03	0.32	-0.56	86	LEU	CD2	0.81	-0.54	-0.53	0.14	-0.39	0.03	-0.76
4	ALA	O	-1.71	-0.79	0.93	0.71	-0.81	-0.43	-0.10	87	LYS	N	1.29	0.59	-2.56	-1.87	0.27	-0.60	0.63
5	ALA	CB	0.56	-0.69	-0.37	-0.63	-0.27	-0.19	-0.47	88	LYS	CA	1.32	-0.93	0.83	-0.70	-0.62	-0.44	-0.13
6	ARG	N	1.05	0.81	-2.46	-1.96	0.44	-0.50	0.41	89	LYS	C	-2.29	0.64	2.40	0.87	0.48	0.21	-0.40
7	ARG	CA	0.86	-0.82	0.32	-0.81	-0.70	-0.53	-0.33	90	LYS	O	-1.82	-0.74	0.82	0.68	-0.75	-0.41	-0.12
8	ARG	C	-2.28	0.43	0.45	0.68	0.07	0.65	-0.44	91	LYS	CB	0.68	-0.60	-0.04	-0.77	-0.39	-0.53	-0.22
9	ARG	O	-1.84	-1.08	0.68	0.61	-0.83	-0.33	-0.21	92	LYS	CG	0.66	-0.36	-0.25	-0.79	-0.33	-0.43	-0.49
10	ARG	CB	0.51	-1.03	-0.23	-1.07	-0.36	-0.67	-0.37	93	LYS	CD	1.21	-0.45	-0.10	-0.01	-0.12	-0.22	-0.25
11	ARG	CG	0.89	-0.40	-0.50	-0.71	-0.47	-0.57	-0.46	94	LYS	CE	1.20	-0.13	-0.17	-0.21	0.02	-0.33	-0.29
12	ARG	CD	1.04	-0.63	-0.20	-0.19	-0.14	-0.54	-0.31	95	LYS	NZ	1.20	0.65	0.64	-0.10	0.76	-0.13	0.32
13	ARG	NE	0.75	-0.15	-0.20	-0.41	-0.13	-0.51	-0.16	96	MET	N	1.64	0.71	-2.39	-1.94	0.95	-0.23	0.71
14	ARG	CZ	1.75	-0.55	-0.20	0.44	-0.50	0.32	-0.79	97	MET	CA	0.94	-0.96	-0.05	-0.63	-0.55	-0.42	-0.06
15	ARG	NH1	0.53	-0.50	-0.43	-0.41	-0.02	-0.26	-0.29	98	MET	C	-2.19	0.20	3.84	0.92	0.31	0.68	-0.53
16	ARG	NH2	0.67	-0.37	-0.26	-0.30	0.03	-0.13	-0.18	99	MET	O	-1.74	-0.94	1.38	0.45	-0.70	-0.34	-0.21
17	ASN	N	1.75	0.53	-2.54	-1.99	0.52	-0.70	0.46	100	MET	CB	0.43	-0.95	0.23	-1.02	0.01	-0.30	-0.31
18	ASN	CA	0.50	-0.67	0.57	-0.96	-1.01	-0.71	-0.78	101	MET	CG	0.54	-0.55	-0.70	-0.86	-0.21	-0.46	-0.63
19	ASN	C	-2.18	0.29	0.84	0.08	-0.12	0.09	-0.49	102	MET	SD	0.20	-0.95	-0.83	0.56	-0.32	0.18	-0.75
20	ASN	O	-1.80	-0.78	0.63	0.56	-0.61	-0.44	-0.30	103	MET	CE	0.33	-0.69	-0.74	-0.19	-0.27	-0.11	-0.78
21	ASN	CB	0.46	-0.68	-0.04	-0.91	-0.48	-0.78	-0.51	104	PHE	N	1.32	0.93	-2.24	-1.91	0.78	-0.23	0.47
22	ASN	CG	0.18	-0.53	-0.08	-0.90	-0.45	-0.60	-0.74	105	PHE	CA	0.61	-0.53	1.18	-1.23	-0.78	-0.51	-0.28
23	ASN	OD1	-1.18	-0.50	0.06	0.16	-0.77	-0.60	-0.31	106	PHE	C	-2.23	0.63	2.70	0.80	0.22	0.18	-0.60
24	ASN	ND2	0.00	-0.42	-0.23	-0.48	-0.49	-0.73	-0.47	107	PHE	O	-1.89	-1.31	0.71	0.51	-0.73	-0.29	-0.21
25	ASP	N	1.29	0.73	-2.65	-1.88	-0.44	-1.08	0.19	108	PHE	CB	0.65	-0.65	0.14	-0.81	-0.40	-0.47	-0.36
26	ASP	CA	0.99	-0.28	0.32	-0.42	-0.97	-0.54	-0.30	109	PHE	CG	2.70	-0.08	0.31	0.17	-0.32	0.89	-0.58
27	ASP	C	-2.39	1.29	2.13	0.50	0.09	0.28	-0.46	110	PHE	CD1	0.59	-0.66	-1.04	-0.44	-0.54	-0.13	-0.51
28	ASP	O	-1.95	-0.50	0.89	0.63	-0.96	-0.54	-0.17	111	PHE	CD2	0.75	-0.46	-0.90	-0.24	-0.55	-0.19	-0.62
29	ASP	CB	0.04	-0.32	0.19	-0.63	-0.55	-0.78	-0.40	112	PHE	CE1	0.53	-0.38	-0.84	0.11	-0.56	-0.01	-0.63
30	ASP	CG	-0.45	-0.08	0.29	-0.48	-1.10	-0.94	-0.57	113	PHE	CE2	0.62	-0.49	-0.68	0.32	-0.52	-0.11	-0.77
31	ASP	OD1	-1.44	0.01	0.52	0.43	-0.89	-0.92	0.03	114	PHE	CZ	0.52	-0.39	-0.52	0.35	-0.38	0.14	-0.61
32	ASP	OD2	-1.08	-0.17	0.42	0.86	-0.68	-0.83	-0.16	115	PRO	N	2.32	0.30	-1.78	-1.34	0.63	-0.29	-0.77
33	CYS	N	0.99	-0.24	-2.18	-1.82	0.53	-0.34	0.08	116	PRO	CA	0.84	-1.07	0.17	-0.81	-0.40	-0.56	-0.50
34	CYS	CA	0.47	-0.43	0.63	-1.31	-0.26	-0.38	-0.20	117	PRO	C	-2.58	1.29	1.90	0.72	0.44	0.21	-0.41
35	CYS	C	-2.12	0.85	2.69	0.30	0.01	-0.23	-0.51	118	PRO	O	-1.54	-0.41	0.74	0.87	-0.84	-0.54	-0.32
36	CYS	O	-1.87	-1.46	-0.16	0.53	-0.91	-0.62	-0.23	119	PRO	CB	0.51	-0.29	-0.56	-0.04	-0.24	-0.43	-0.53
37	CYS	CB	0.17	-0.61	-0.67	-0.75	-0.59	-0.53	-0.48	120	PRO	CG	1.02	-0.35	-0.43	-0.06	0.00	-0.18	-0.43
38	CYS	SG	-0.14	-0.32	-0.83	0.06	-0.72	-0.13	-0.31	121	PRO	CD	1.11	0.01	-1.37	-1.00	-0.06	-0.20	-0.16
39	GLN	N	1.16	1.42	-2.61	-1.98	0.17	-0.76	0.58	122	SER	N	1.17	0.64	-2.30	-1.74	-0.26	-0.69	0.33
40	GLN	CA	1.36	-0.79	1.24	-0.58	-0.88	-0.53	-0.25	123	SER	CA	0.76	-0.84	0.21	-0.75	-0.91	-0.57	-0.42
41	GLN	C	-2.12	1.18	2.70	1.53	0.84	0.38	-0.24	124	SER	C	-2.45	0.42	1.40	0.58	-0.08	0.00	-0.35
42	GLN	O	-1.89	-0.92	1.02	0.87	-0.82	-0.42	-0.10	125	SER	O	-1.82	-0.84	0.68	0.54	-0.86	-0.37	-0.10
43	GLN	CB	0.22	-0.72	0.27	-1.01	-0.31	-0.58	-0.33	126	SER	CB	0.19	-0.58	-0.14	-0.50	-0.53	-0.58	-0.44
44	GLN	CG	0.65	-0.53	-0.21	-0.79	-0.39	-0.85	-0.50	127	SER	OG	-1.01	-0.55	-0.16	-0.30	-0.73	-0.84	-0.20
45	GLN	CD	-0.04	-0.66	-0.33	0.27	-0.53	-0.41	-0.86	128	THR	N	1.74	0.97	-2.21	-1.90	0.16	-0.54	0.52
46	GLN	OE1	-0.91	-0.56	0.02	0.34	-0.58	-0.44	-0.28	129	THR	CA	0.99	-1.65	0.57	-0.99	-0.90	-0.71	-0.28
47	GLN	NE2	0.03	-0.53	-0.33	-0.44	-0.43	-0.65	-0.38	130	THR	C	-2.18	0.57	1.93	0.63	0.25	0.14	-0.51
48	GLU	N	1.95	1.42	-2.90	-2.01	-0.25	-1.12	0.32	131	THR	O	-1.90	-1.02	0.65	0.47	-0.87	-0.43	-0.19
49	GLU	CA	1.63	-0.85	1.37	-0.47	-0.87	-0.53	-0.25	132	THR	CB	0.18	-0.89	0.23	-0.86	-0.70	-0.71	-0.47
50	GLU	C	-2.38	0.47	3.22	0.89	0.11	0.25	-0.17	133	THR	OG1	-0.55	-0.69	0.12	-0.46	-0.70	-0.88	-0.48
51	GLU	O	-1.83	-0.47	1.63	0.91	-0.85	-0.58	0.08	134	THR	CG2	0.57	-0.25	-0.50	-0.22	-0.45	-0.53	-0.75
52	GLU	CB	-0.28	-0.61	0.60	-0.86	-0.56	-0.90	-0.36	135	TRP	N	2.27	0.44	-2.43	-1.78	0.50	-0.34	0.64
53	GLU	CG	0.50	-0.20	-0.07	-0.55	-0.27	-0.89	-0.52	136	TRP	CA	1.32	0.11	1.36	-1.13	-0.75	-0.54	-0.24
54	GLU	CD	0.22	-0.59	0.21	0.68	-0.89	-0.32	-0.35	137	TRP	C	-2.57	2.49	2.49	1.27	0.72	0.80	-0.08
55	GLU	CD	-0.82	-0.49	1.08	1.20	-0.66	-0.46	-0.17	138	TRP	O	-1.73	-0.92	1.35	0.63	-0.84	-0.38	0.08
56	GLU	OE2	-0.29	-0.11	0.97	1.19	-0.38	-0.34	-0.06	139	TRP	CB	0.49	-0.62	-0.38	-0.76	-0.18	-0.20	-0.23
57	GLY	N	0.95	0.35	-2.00	-1.54	-0.02	-0.66	0.22	140	TRP	CG	1.60	-0.19	-0.44	0.35	0.56	1.14	-0.52
58	GLY	CA	0.32	-0.34	-0.01	-0.62	-0.39	-0.53	-0.50	141	TRP	CD1	0.12	-0.63	-1.02	-0.73	-0.57	-0.19	-0.40
59	GLY	C	-1.78	-0.03	1.23	0.32	-0.42	-0.29	-0.83	142	TRP	CD2	1.28	0.32	0.29	1.02	0.38	1.12	-0.63
60	GLY	O	-1.69	-0.93	0.82	0.64	-0.84	-0.57	-0.35	143	TRP	NE1	0.09	-0.65	-0.81	-0.59	-0.60	-0.89	-0.40
61	HIS	N	1.71	0.71	-2.36	-1.91	0.49	-0.55	0.45	144	TRP	CE2	0.90	-0.03	0.07	1.64	-0.32	0.56	-0.83
62	HIS	CA	0.33	-0.79	0.88	-1.17	-0.68	-1.06	-0.29	145	TRP	CE3	0.5						

Table 3. (continued)

		135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	
		TRP N	TRP CA	TRP C	TRP O	TRP CB	TRP CG	TRP CD1	TRP CD2	TRP NE1	TRP CE2	TRP CE3	TRP CZ2	TRP CZ3	TRP CH2	
0	SAS	SAS	2.14	1.99	2.48	1.43	1.72	2.03	1.24	2.15	1.06	2.07	2.00	1.21	1.63	1.30
1	ALA	N	2.12	0.88	-2.38	-1.99	0.59	0.38	0.36	0.36	0.68	0.35	0.21	0.37	-0.12	0.06
2	ALA	CA	1.11	0.05	1.14	-0.64	-0.73	-0.92	-0.67	-0.84	-0.35	-0.75	-0.78	-0.57	-0.81	-0.74
3	ALA	C	-2.33	1.71	4.00	1.10	0.05	0.42	-0.51	0.84	-0.46	0.83	-1.17	-0.70	-1.09	-0.82
4	ALA	O	-1.88	-0.62	0.62	0.63	-0.80	0.61	-0.30	0.99	-0.45	1.41	0.03	-0.03	0.01	0.39
5	ALA	CB	0.52	-0.80	-0.12	-0.67	-0.60	-0.85	-0.46	-1.03	-0.41	-1.11	-0.91	-0.69	-0.84	-0.81
6	ARG	N	1.32	0.71	-2.33	-1.87	0.37	0.26	0.32	0.46	0.48	0.80	-0.44	0.61	-0.73	0.29
7	ARG	CA	0.76	-1.11	-0.08	-1.12	-1.13	-1.39	-0.86	-1.34	-0.54	-0.84	-1.30	-0.89	-1.16	-0.85
8	ARG	C	-2.62	2.02	4.00	0.44	-0.04	0.69	-1.35	0.24	-0.05	0.20	-1.85	-0.29	-1.51	-0.85
9	ARG	O	-1.92	-1.22	1.09	0.56	-0.75	-0.18	-0.73	0.77	-0.44	1.72	-0.11	0.43	-0.22	0.24
10	ARG	CB	0.44	-1.11	-0.39	-0.98	-0.59	-1.31	-0.48	-1.53	-0.38	-1.39	-1.22	-0.67	-1.22	-1.04
11	ARG	CG	0.71	-0.48	-0.49	-0.81	-0.48	-0.95	-0.54	-1.34	-0.74	-1.59	-0.81	-1.03	-0.90	-1.11
12	ARG	CD	1.21	-0.36	-0.17	-0.42	-0.36	-1.41	-0.67	-1.82	-0.67	-1.85	-1.07	-1.21	-0.87	-1.00
13	ARG	NE	1.60	0.07	0.91	-0.58	-0.10	-1.23	-0.48	-1.16	-0.45	-1.06	-0.48	-0.75	-0.21	-0.80
14	ARG	CZ	1.86	-0.60	0.08	0.91	-0.90	-2.21	-1.41	-1.93	-0.90	-1.92	-0.71	-1.20	-0.38	-0.98
15	ARG	NH1	0.92	-0.55	-0.42	-0.50	-0.43	-1.03	-0.79	-0.42	-0.56	-0.59	0.17	-0.61	0.01	-0.36
16	ARG	NH2	0.30	-0.36	-0.21	-0.27	-0.42	-0.79	-0.53	-0.30	-0.12	-0.27	-0.07	-0.45	0.03	-0.20
17	ASN	N	2.29	0.09	-2.69	-2.09	1.35	1.03	0.22	0.76	0.51	0.66	0.07	0.60	-0.14	0.45
18	ASN	CA	1.23	-0.54	0.46	-0.80	-0.23	-0.45	-0.90	-0.33	-0.61	-0.52	-0.75	-0.88	-0.72	-0.71
19	ASN	C	-2.52	0.69	3.09	0.59	0.12	0.08	-1.10	-0.24	-0.11	-0.38	-0.70	-0.73	-0.31	-0.85
20	ASN	O	-1.95	-0.88	1.48	0.47	-0.89	0.14	-0.93	0.70	-0.64	1.20	0.28	-0.02	0.32	-0.04
21	ASN	CB	0.74	-0.71	-0.19	-1.19	-0.31	-0.59	-0.42	-1.16	-0.48	-1.18	-0.85	-0.84	-0.70	-0.76
22	ASN	CG	-0.17	-0.06	-0.69	-0.32	-0.28	-1.04	-0.80	-0.95	-0.83	-1.33	-0.63	-1.20	-0.70	-0.83
23	ASN	OD1	-0.72	-0.69	0.63	0.17	-0.29	0.00	-0.31	0.19	-0.97	0.08	0.06	-0.35	0.21	-0.04
24	ASN	ND2	0.32	-0.38	-0.35	-0.64	0.02	-0.20	-0.50	-0.55	-0.46	-0.78	-0.09	-0.43	-0.19	-0.22
25	ASP	N	2.14	1.21	-2.73	-1.58	0.46	0.89	0.16	0.97	0.42	0.68	0.73	0.40	-0.01	0.34
26	ASP	CA	0.66	-0.08	1.50	-0.10	-0.57	-0.61	-1.10	-0.67	-1.11	-0.38	-0.34	-0.87	-0.02	-0.79
27	ASP	C	-2.36	1.12	1.02	1.03	0.24	-0.35	-1.23	0.28	-0.21	-0.69	-0.13	-0.63	-0.50	-0.68
28	ASP	O	-1.93	-0.33	0.57	0.76	-0.77	0.84	-0.89	0.92	-0.43	0.85	0.79	0.02	0.21	0.23
29	ASP	CB	1.02	-0.31	0.49	-0.34	0.09	0.32	-0.70	0.07	-0.71	-0.48	0.05	-0.52	-0.20	-0.38
30	ASP	CG	-0.25	0.86	0.73	0.16	0.01	2.49	-0.44	2.07	-0.72	0.16	0.53	-0.48	0.44	-0.09
31	ASP	OD1	-0.69	0.33	0.60	1.08	0.00	1.44	0.15	2.18	-1.07	1.97	1.06	-0.02	1.21	0.83
32	ASP	OD2	-0.11	0.05	0.88	1.15	0.31	1.45	-0.10	1.90	-0.84	1.75	1.24	0.10	1.15	0.70
33	CYS	N	0.94	0.18	-2.17	-2.21	0.44	1.45	0.19	1.39	0.60	0.73	-0.62	-0.16	-0.61	0.23
34	CYS	CA	1.69	-0.89	1.23	-1.14	-0.50	-0.58	-0.41	-1.24	-0.50	0.07	-1.03	-0.38	-1.18	-0.64
35	CYS	C	-1.59	1.09	4.00	1.74	-0.78	0.26	-0.57	-0.16	0.04	1.37	-1.91	-0.67	-1.14	-0.90
36	CYS	O	-2.13	-1.62	0.50	0.47	-1.29	1.41	-0.13	1.22	-0.56	1.28	-0.60	-0.21	-0.47	0.14
37	CYS	CB	0.36	0.04	-0.37	-0.77	-0.77	-0.82	-0.54	-1.32	-0.47	-1.55	-0.78	-1.05	-1.01	-1.07
38	CYS	SG	-0.04	-0.76	-0.50	-0.32	-0.55	-0.51	-0.72	-0.26	-0.64	-0.25	-0.58	-0.45	-0.36	-0.24
39	GLN	N	2.06	0.75	-2.57	-1.99	1.14	1.00	0.14	-0.43	1.20	0.23	-0.44	1.12	-0.41	0.39
40	GLN	CA	0.53	-0.97	0.47	-0.79	-0.91	-1.41	-0.84	-1.06	-0.31	-1.00	-1.28	-0.44	-1.09	-0.63
41	GLN	C	-2.68	1.05	4.00	1.22	-0.36	-0.63	-1.28	-0.24	0.12	0.32	-1.36	-0.05	-1.25	-0.73
42	GLN	O	-1.81	-0.97	0.88	0.76	-0.75	0.15	-0.75	0.53	-0.23	1.10	0.33	0.31	0.11	0.00
43	GLN	CB	0.58	-0.94	-0.09	-1.09	-0.28	-1.06	-0.82	-1.27	-0.82	-1.40	-0.88	-0.54	-0.85	-0.56
44	GLN	CG	0.89	-0.78	-0.60	-0.69	-0.38	-0.72	-0.30	-1.23	-0.45	-1.06	-0.80	-0.73	-0.81	-0.82
45	GLN	CD	1.19	-1.08	-0.11	0.22	-0.62	-1.05	-0.52	-0.61	-0.83	-0.85	-0.89	-1.39	-0.42	-0.97
46	GLN	OE1	0.25	-0.52	1.09	0.66	0.06	-0.06	-0.29	0.13	-1.03	0.30	0.45	-0.65	0.16	0.00
47	GLN	NE2	0.49	-0.83	-0.15	-0.50	0.23	0.26	-0.24	-0.30	-0.22	-0.54	-0.18	-0.43	-0.14	-0.36
48	GLU	N	1.34	0.67	-2.72	-1.93	1.79	1.09	0.26	0.91	0.72	0.26	0.43	0.49	0.14	0.43
49	GLU	CA	1.05	-0.31	0.98	-0.53	-0.40	-0.57	-0.73	-0.99	-0.41	-0.71	-0.43	-0.45	-0.70	-0.56
50	GLU	C	-2.59	1.46	0.74	0.55	0.55	1.05	-0.81	-0.53	-0.13	0.57	-1.13	-0.50	-0.37	-0.36
51	GLU	O	-1.79	-0.37	0.86	1.00	-0.75	-0.18	-0.46	0.63	-0.22	1.61	0.29	0.30	0.29	0.34
52	GLU	CB	0.90	-0.98	1.26	-0.92	0.05	0.10	-0.40	-0.25	-0.48	-0.76	0.00	-0.59	-0.39	-0.43
53	GLU	CG	0.93	0.29	0.62	-0.33	0.17	0.05	-0.83	-0.06	-0.85	-0.79	-0.19	-0.76	-0.33	-0.66
54	GLU	CD	1.49	0.21	0.31	0.72	-0.13	0.07	-0.42	1.15	-0.65	0.35	-0.22	-1.31	-0.41	-0.88
55	GLU	OE1	0.54	-0.52	1.50	1.57	0.57	1.61	-0.06	1.59	-0.80	1.51	1.20	0.00	0.60	0.20
56	GLU	OE2	0.49	0.68	1.61	0.93	0.34	1.89	0.10	2.35	-1.02	1.77	0.76	-0.34	0.72	0.55
57	GLY	N	0.97	0.47	-2.33	-1.81	0.66	-0.78	-0.23	-1.24	-0.22	-0.93	-0.24	-0.13	-0.28	0.01
58	GLY	CA	0.58	-0.22	0.00	-0.78	-0.22	-0.54	-0.60	-0.94	-0.70	-1.25	-0.71	-0.94	-0.80	-0.81
59	GLY	C	-1.45	0.13	2.39	0.92	-0.69	-1.18	-1.41	-0.60	-0.89	-0.60	-1.21	-1.04	-0.85	-0.88
60	GLY	O	-1.68	-1.03	0.50	0.69	-0.63	0.17	-0.89	0.92	-0.81	0.84	-0.09	-0.26	-0.17	-0.02
61	HIS	N	2.58	1.62	-2.87	-2.14	0.62	1.62	0.08	1.05	-0.13	0.65	0.03	0.24	0.12	-0.04
62	HIS	CA	0.97	-0.05	2.61	-0.61	-0.81	-0.58	-0.70	-0.54	-0.91	-0.82	-0.70	-1.47	-0.97	-1.36
63	HIS	C	-2.59	3.06	3.05	0.03	0.14	0.43	-1.39	-0.72	-0.60	0.66	-1.29	-0.27	-0.78	-1.41
64	HIS	O	-2.06	-1.25	2.09	0.62	-1.04	-0.86	-0.71	-0.39	-1.03	0.75	0.16	-0.27	0.35	0.01
65	HIS	CB	0.52	-0.72	0.32	-0.97	-0.44	-1.15	-1.14	-1.29	-0.92	-1.45	-0.58	-1.03	-1.13	-1.15
66	HIS	CG	1.09	-0.82	3.34	1.06	-0.67	-1.31	-1.18	-1.61	-1.05	-2.20	-1.12	-1.81	-1.20	-1.57
67	HIS	ND1	-0.29	-0.66	1.00	-0.72	-0.28	-0.79	-0.11	-1.04	-1.34	-1.09	-0.25	-0.82	0.27	-0.39
68	HIS	CD2	0.88	-0.50	0.19	-0.67	-0.31	-1.41	-0.92	-1.57	-0.73	-1.42	-0.78	-1.27	-0.64	-1.00
69	HIS	CE1	1.06	-0.65	0.67	-0.05	-0.55	-1.08	-0.68	-0.78	-0.53	-0.64	-0.55	-0.73	-0.51	-0.94
70	HIS	NE2	0.75	-0.38	-0.05	-0.04	-0.42	-0.52	-0.25	-0.33	-0.59	-0.45	-0.20	-0.5		

Table 3. (continued)

		135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148
		TRP N	TRP CA	TRP C	TRP O	TRP CB	TRP CG	TRP CD1	TRP CD2	TRP NE1	TRP CE2	TRP CE3	TRP CZ2	TRP CZ3	TRP CH2
83 LEU	CB	0.80	-0.95	-0.35	-1.07	-0.91	-0.97	-0.61	-1.05	-0.58	-1.33	-1.15	-0.77	-1.12	-1.01
84 LEU	CG	0.82	-0.52	-0.69	-1.08	-0.94	-0.93	-0.59	-0.64	-0.32	-1.00	-0.89	-0.51	-1.06	-0.94
85 LEU	CD1	0.46	-0.79	-0.87	0.03	-1.02	-1.33	-0.60	-1.32	-0.26	-1.07	-1.28	-0.73	-1.16	-1.11
86 LEU	CD2	0.76	-0.51	-0.41	-0.12	-1.01	-1.24	-0.62	-1.23	-0.40	-0.96	-1.24	-0.80	-1.25	-0.98
87 LYS	N	2.05	0.86	-2.64	-2.13	0.69	0.97	0.26	0.96	0.31	0.77	0.05	1.05	-0.14	0.33
88 LYS	CA	0.71	-1.01	1.10	-1.22	-0.82	-1.02	-0.69	-1.07	-0.46	-0.86	-1.01	-0.47	-0.88	-0.92
89 LYS	C	-2.45	1.68	3.04	0.11	0.23	-0.21	-1.26	-0.74	-0.70	0.15	-1.46	-0.67	-0.94	-0.90
90 LYS	O	-1.88	-1.14	0.06	0.47	-0.71	-0.17	-0.61	0.25	-0.14	1.29	-0.16	0.33	0.37	0.36
91 LYS	CB	0.70	-0.98	0.56	-1.01	-0.24	-0.53	-0.44	-1.16	-0.24	-1.25	-0.58	-0.66	-0.62	-0.70
92 LYS	CG	0.83	-0.41	-0.42	-0.80	-0.25	-1.18	-0.35	-1.46	-0.33	-1.41	-0.89	-0.82	-0.72	-0.71
93 LYS	CD	1.05	-0.38	0.09	0.25	-0.09	-0.70	-0.15	-0.84	-0.50	-1.25	-0.18	-1.04	-0.11	-0.32
94 LYS	CE	1.59	0.12	-0.36	-0.08	0.01	-0.81	-0.28	-0.80	-0.40	-1.02	0.06	-0.69	0.06	-0.22
95 LYS	NZ	1.55	0.69	1.01	0.08	1.05	0.85	0.43	0.65	0.15	0.35	1.00	0.30	0.59	0.44
96 MET	N	1.13	0.94	-2.35	-2.03	0.74	1.78	0.52	3.17	0.70	1.88	-0.14	0.46	-0.06	0.21
97 MET	CA	0.12	-0.91	-0.01	-1.38	-1.20	-1.42	-0.81	-0.94	-0.74	-1.08	-0.74	-0.61	-1.27	-1.01
98 MET	C	-2.05	3.53	4.00	0.47	0.12	1.71	-1.21	0.58	-0.65	1.19	-1.63	-0.62	-0.72	-1.04
99 MET	O	-2.17	-1.25	0.17	0.12	-1.19	0.04	-0.44	0.50	-0.88	1.39	-0.20	-0.21	-0.05	-0.37
100 MET	CB	0.70	-0.80	-1.23	-1.10	-0.52	-0.68	-0.69	-1.24	-0.66	-1.29	-1.05	-0.92	-1.08	-0.93
101 MET	CG	1.15	-0.80	-0.55	-1.04	-0.52	-0.94	-0.76	-1.11	-0.49	-1.45	-1.07	-1.09	-1.28	-1.17
102 MET	SD	0.43	-1.29	-1.04	0.23	-1.09	-0.77	-0.76	-0.26	-0.69	-0.25	-0.84	-0.98	-0.95	-0.90
103 MET	CE	0.09	-1.11	-1.53	-0.75	-0.94	-1.43	-0.78	-1.59	-0.91	-1.66	-1.16	-1.08	-1.15	-1.16
104 PHE	N	1.81	0.61	-2.10	-2.15	0.52	1.42	0.13	1.59	0.68	0.63	-0.30	0.24	0.12	0.34
105 PHE	CA	1.23	-0.98	1.51	-1.16	-0.91	-1.05	-0.90	-0.66	-0.88	-1.04	-1.15	-0.98	-0.96	-0.82
106 PHE	C	-2.37	1.92	1.78	1.17	-0.06	-0.82	-1.02	1.52	-0.42	0.47	-2.07	-0.64	-1.27	-1.05
107 PHE	O	-2.29	-1.55	1.05	0.15	-1.19	0.63	-0.57	1.15	-0.78	2.01	-0.40	0.02	-0.27	0.25
108 PHE	CB	0.35	-0.73	-0.40	-0.90	-0.98	-0.91	-0.66	-1.02	-0.59	-1.26	-1.17	-0.89	-1.20	-1.10
109 PHE	CG	0.52	-0.23	0.72	-0.05	-1.23	-1.08	-0.97	-0.04	-1.16	-1.50	-1.20	-1.36	-1.27	-1.27
110 PHE	CD1	0.03	-0.85	-1.20	-0.89	-1.02	-1.38	-0.77	-1.45	-0.56	-1.12	-1.25	-0.87	-1.05	-0.91
111 PHE	CD2	0.28	-0.98	-1.02	-0.45	-1.17	-1.49	-0.62	-1.36	-0.32	-0.98	-1.26	-0.73	-1.18	-0.96
112 PHE	CE1	-0.07	-1.01	-1.06	0.18	-1.27	-1.53	-0.95	-1.15	-0.18	-0.82	-1.30	-0.83	-1.12	-0.85
113 PHE	CE2	-0.04	-1.09	-0.76	-0.04	-1.40	-1.46	-0.78	-1.25	-0.04	-0.65	-1.32	-0.67	-1.18	-1.07
114 PHE	CZ	0.02	-1.09	-0.45	0.37	-1.37	-1.50	-0.86	-1.15	-0.28	-0.98	-1.30	-0.83	-1.07	-1.14
115 PRO	N	2.23	0.09	-2.07	-1.01	-0.10	-0.63	-1.26	-1.15	-0.86	-1.41	-1.47	-0.96	-1.17	-0.67
116 PRO	CA	1.77	-0.78	1.63	-0.15	-0.61	-1.25	-0.93	-1.43	-0.66	-1.53	-0.70	-1.09	-0.70	-0.66
117 PRO	C	-2.58	2.22	0.45	1.78	0.23	-0.47	-0.71	-0.05	-0.54	0.46	-0.61	-0.60	-0.71	-0.60
118 PRO	O	-1.58	-0.37	0.82	0.91	-0.81	0.46	-0.78	1.11	-1.15	0.90	0.21	-0.48	0.23	0.04
119 PRO	CB	0.13	-0.65	0.05	0.16	-0.60	-1.29	-0.73	-1.46	-0.53	-1.48	-1.01	-0.70	-0.95	-0.87
120 PRO	CG	0.20	-0.64	-0.25	-0.17	-0.81	-1.46	-0.96	-1.52	-0.74	-1.27	-0.94	-1.08	-0.96	-1.01
121 PRO	CD	0.89	-0.35	-1.59	-1.01	-0.46	-1.39	-0.94	-1.73	-0.97	-1.78	-0.93	-1.19	-1.08	-0.97
122 SER	N	1.33	0.80	-2.47	-1.96	0.40	0.51	0.27	0.44	0.31	0.14	0.30	0.04	-0.16	-0.11
123 SER	CA	0.29	-0.19	1.83	-0.91	-0.55	-0.83	-0.76	-0.98	-0.42	-0.70	-0.89	-0.90	-0.96	-0.68
124 SER	C	-2.53	0.14	3.28	0.04	0.15	-0.24	-0.93	-0.05	-0.43	-0.73	-1.00	-0.87	-1.12	-1.12
125 SER	O	-1.89	-1.11	0.48	0.31	-0.65	0.75	-0.44	0.59	-0.44	0.67	0.09	-0.02	0.21	0.14
126 SER	CB	0.63	-0.21	0.30	-0.55	-0.24	-0.37	-0.49	-0.76	-0.50	-0.96	-0.39	-0.63	-0.64	-0.72
127 SER	OG	-0.33	-0.36	0.58	-0.20	-0.06	0.62	-0.29	0.88	-0.87	0.45	0.45	0.13	0.42	0.09
128 THR	N	2.27	1.30	-2.60	-1.74	0.46	1.55	0.09	1.24	0.06	0.85	0.53	0.49	0.50	0.90
129 THR	CA	0.46	0.11	2.49	-0.87	-0.63	-0.21	-0.65	0.30	-0.66	-0.03	-0.29	-0.81	-0.74	-0.42
130 THR	C	-2.40	1.37	2.49	1.31	-0.38	-0.47	-1.03	0.28	-0.81	0.04	-1.15	-1.09	-0.75	-0.63
131 THR	O	-1.77	-1.18	1.25	0.62	-0.76	0.33	-0.70	1.01	-0.58	1.63	0.05	0.10	0.31	0.58
132 THR	CB	0.54	-0.73	0.71	-0.82	-0.17	0.55	-0.58	0.39	-0.60	-0.31	-0.33	-0.16	-0.13	-0.34
133 THR	OG1	-0.35	-0.52	0.79	-0.42	-0.21	1.17	-0.18	1.11	-0.92	0.50	0.19	0.00	0.27	0.29
134 THR	CG2	0.69	-0.22	-0.06	0.06	-0.22	-0.51	-0.40	-0.62	-0.39	-0.82	-0.50	-0.55	-0.43	-0.46
135 TRP	N	0.82	0.73	-2.14	-1.96	0.51	1.03	0.33	0.50	0.68	0.16	0.06	0.45	0.12	-0.06
136 TRP	CA	0.72	-1.38	1.60	-1.02	-1.43	-0.96	-1.00	-1.18	-0.16	-0.86	-0.92	-0.78	-0.63	-0.91
137 TRP	C	-2.10	1.63	4.00	-0.06	-0.54	1.25	-0.28	0.01	-0.31	0.88	-1.03	0.11	-0.27	-0.69
138 TRP	O	-1.96	-1.08	-0.06	0.92	-1.18	0.10	-0.40	0.63	-0.68	1.74	-0.16	-0.55	0.28	0.29
139 TRP	CB	0.53	-1.42	-0.53	-1.15	-1.09	-0.77	-0.32	-1.03	-0.20	-1.02	-1.05	-0.97	-0.87	-0.85
140 TRP	CG	1.06	-0.97	1.24	0.14	-0.78	2.22	-0.25	0.17	0.02	-0.21	-1.15	-1.03	-0.94	-0.94
141 TRP	CD1	0.38	-1.00	-0.28	-0.45	-0.32	-0.25	-0.06	-0.41	0.09	-0.03	-0.79	-0.40	-0.83	-0.57
142 TRP	CD2	0.55	-1.18	0.00	0.66	-1.02	0.17	-0.41	0.53	-0.54	0.43	-1.25	-0.27	-0.70	-0.64
143 TRP	NE1	0.71	-0.17	-0.32	-0.73	-0.20	0.02	-0.10	-0.56	0.58	-0.22	-0.54	-0.11	-0.42	-0.26
144 TRP	CE2	0.22	-0.85	0.88	1.74	-1.03	-0.20	-0.02	0.43	-0.19	2.14	-0.85	0.19	-0.89	0.02
145 TRP	CE3	0.11	-0.92	-1.02	-0.19	-1.05	-1.16	-0.79	-1.26	-0.52	-0.85	-1.35	-0.69	-0.91	-0.82
146 TRP	CZ2	0.48	-0.75	0.12	-0.59	-0.96	-1.03	-0.40	-0.27	-0.11	0.18	-0.69	-0.03	-0.74	-0.58
147 TRP	CZ3	0.17	-0.62	-0.26	0.24	-0.87	-0.94	-0.83	-0.71	-0.41	-0.90	-0.91	-0.74	-1.14	-0.80
148 TRP	CH2	-0.03	-0.90	-0.67	0.24	-0.85	-0.94	-0.57	-0.64	-0.27	0.02	-0.82	-0.58	-0.79	-0.88
149 TYR	N	1.37	0.75	-2.22	-2.18	0.33	0.01	-0.08	0.43	-0.01	0.22	-0.56	0.48	0.28	0.18
150 TYR	CA	-0.10	-1.45	0.27	-1.25	-1.19	-0.96	-1.00	-0.22	-0.83	-0.60	-0.80	-0.79	-1.11	-0.79
151 TYR	C	-2.41	3.41	1.56	0.91	-0.41	-0.15	-1.06	-0.71	-0.75	0.06	-2.04	-0.84	-1.58	-1.25
152 TYR	O	-2.21	-1.29	0.33	0.12	-1.09	0.24	-0.84	0.75	-0.99	1.12	-0.50	-0.26	-0.28	0.05
153 TYR	CB	0.51	-1.23	-0.35	-1.12	-0.86	-0.95	-0.97	-1.27	-0.71	-1.47	-1.51	-1.00	-1.27	-1.16
154 TYR	CG	0.84	-0.09	0.45	0.53	-0.93	-0.80	-1.09	-0.52	-0.79	0.05	-1.71	-1.21	-1.17	-1.06
155 TYR	CD1	0.24	-1.06	-1.50	-0.65	-1.13	-1.34	-1.01	-1.23	-0.					

Table 3. (continued)

		149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	
		TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	TYR	
		N	CA	C	O	CB	CG	CD1	CD2	CE1	CE2	CZ	OH	
0	SAS	SAS	2.25	1.90	2.28	1.41	1.78	1.92	1.47	1.53	1.22	1.22	1.83	0.68
1	ALA	N	1.67	0.52	-2.18	-1.84	0.67	0.45	0.21	0.22	0.19	0.17	0.32	0.21
2	ALA	CA	0.72	-0.34	0.85	-0.75	-0.86	-0.88	-0.71	-1.00	-0.62	-0.74	-1.09	-0.45
3	ALA	C	-2.23	0.76	2.14	0.68	0.15	-0.20	-0.99	-0.77	-0.71	-0.51	-0.31	0.12
4	ALA	O	-1.93	-0.90	0.55	0.53	-0.92	0.40	-0.31	-0.39	0.08	0.17	1.01	0.36
5	ALA	CB	0.71	-0.64	-0.44	-0.57	-0.66	-0.81	-0.60	-0.58	-0.70	-0.63	-0.91	-0.34
6	ARG	N	1.51	0.90	-2.44	-1.98	0.51	1.42	0.37	0.40	0.15	0.06	-0.01	-0.15
7	ARG	CA	1.37	-0.72	0.07	-1.12	-0.78	-1.01	-0.90	-1.08	-0.80	-0.83	-1.12	-0.67
8	ARG	C	-2.41	0.80	1.14	0.55	-0.14	0.34	-1.26	-1.07	-1.06	-0.65	0.07	0.04
9	ARG	O	-1.96	-1.16	0.19	0.46	-0.90	-0.28	-0.69	-0.48	-0.03	-0.24	0.88	0.04
10	ARG	CB	0.85	-0.71	0.31	-0.90	-0.50	-0.84	-0.71	-0.66	-1.08	-1.00	-1.41	-0.73
11	ARG	CG	1.09	-0.33	-0.30	-0.75	-0.59	-1.17	-0.72	-0.67	-0.90	-0.94	-1.45	-0.83
12	ARG	CD	1.14	-0.27	-0.30	-0.23	-0.22	-1.26	-0.65	-0.58	-1.06	-0.88	-1.65	-1.11
13	ARG	NE	1.65	-0.17	0.53	-0.24	-0.22	-0.91	-0.43	-0.45	-0.47	-0.44	-0.87	-0.77
14	ARG	CZ	0.64	-0.57	0.78	0.94	-0.67	-1.60	-1.09	-1.06	-0.92	-1.07	-1.20	-0.38
15	ARG	NH1	0.87	-0.04	0.08	-0.25	-0.09	-0.44	-0.25	-0.28	-0.35	-0.57	-0.45	-0.75
16	ARG	NH2	0.96	-0.24	0.31	-0.11	0.03	-0.19	-0.20	-0.16	-0.20	-0.26	-0.30	-0.42
17	ASN	N	1.62	0.70	-2.54	-1.83	0.68	0.47	0.33	0.13	0.24	0.03	0.23	-0.03
18	ASN	CA	1.06	-0.18	1.01	-0.90	-0.47	-0.32	-0.85	-0.84	-0.68	-0.67	-1.03	-0.70
19	ASN	C	-2.25	1.57	0.77	0.63	0.26	0.61	-1.04	-1.10	-0.86	-1.00	-0.24	-0.30
20	ASN	O	-1.75	-0.90	0.26	0.52	-0.84	0.37	-0.39	-0.49	0.00	-0.19	0.66	0.21
21	ASN	CB	0.81	-0.41	-0.15	-0.90	-0.18	-0.68	-0.45	-0.62	-0.80	-0.88	-1.24	-0.60
22	ASN	CG	0.24	-0.35	0.39	-0.17	-0.52	-0.87	-0.92	-0.70	-0.94	-0.80	-0.94	-0.05
23	ASN	OD1	-0.91	-0.43	0.30	0.20	-0.45	0.39	-0.09	-0.07	-0.12	-0.13	0.52	-0.54
24	ASN	ND2	0.27	-0.32	-0.09	-0.53	-0.02	0.21	-0.10	0.05	-0.41	-0.23	-0.53	-0.57
25	ASP	N	1.51	0.29	-2.59	-1.64	0.41	0.98	0.51	0.13	0.06	-0.04	0.31	-0.36
26	ASP	CA	0.90	0.32	1.51	-0.64	-0.67	-0.41	-0.61	-0.71	-0.87	-0.89	-1.17	-1.05
27	ASP	C	-2.54	0.62	2.18	0.12	0.69	0.11	-0.75	-0.86	-0.97	-0.66	-0.08	-0.04
28	ASP	O	-1.87	-0.56	0.47	0.63	-0.85	0.52	-0.30	-0.39	0.01	-0.06	0.85	0.09
29	ASP	CB	0.69	-0.43	0.27	-0.40	-0.02	0.07	-0.21	-0.11	-0.78	-0.84	-0.76	-0.86
30	ASP	CG	0.04	0.18	0.59	0.21	-0.38	0.25	-0.31	-0.12	-0.64	-0.70	0.12	-0.52
31	ASP	OD1	-0.47	0.15	0.68	0.93	-0.04	1.74	0.80	0.41	-0.29	-0.29	0.89	-0.96
32	ASP	OD2	-0.16	-0.15	0.76	0.95	0.29	1.44	0.34	0.32	-0.42	-0.28	1.03	-1.09
33	CYS	N	1.10	0.38	-2.21	-2.21	0.23	0.74	-0.06	0.58	0.17	0.39	0.29	-0.09
34	CYS	CA	1.21	-0.57	1.27	-1.02	-0.67	-0.20	-0.79	-0.77	-0.53	-0.35	-0.77	-0.69
35	CYS	C	-1.97	0.30	1.05	0.39	-0.02	1.14	-1.42	-1.16	-0.80	-0.65	-0.20	-0.27
36	CYS	O	-2.03	-1.57	-0.04	0.10	-0.84	0.58	-0.84	-0.31	-0.20	0.03	0.66	0.06
37	CYS	CB	0.56	-0.72	-0.38	-0.87	-0.82	-1.03	-0.74	-0.78	-0.68	-0.81	-1.05	-0.44
38	CYS	SG	-0.14	-0.77	-0.94	-0.03	-0.94	-0.34	-0.56	-0.70	-0.28	-0.42	-0.28	0.25
39	GLN	N	1.65	0.65	-2.56	-2.09	0.92	1.40	0.20	0.14	0.21	0.39	0.13	
40	GLN	CA	0.97	-0.66	0.39	-0.93	-0.55	-0.39	-0.79	-0.78	-0.25	-0.78	-1.10	-0.50
41	GLN	C	-2.44	-0.12	1.91	0.49	-0.15	-0.39	-0.62	-1.01	-0.37	-0.32	-0.05	0.17
42	GLN	O	-1.87	-1.08	0.71	0.54	-0.88	0.47	-0.38	-0.44	-0.03	0.15	1.20	0.28
43	GLN	CB	1.31	-0.55	0.66	-0.97	-0.31	-0.71	-0.64	-0.54	-0.70	-0.85	-1.00	-0.47
44	GLN	CG	1.00	-0.50	-0.13	-0.94	-0.03	-0.96	-0.64	-0.74	-0.86	-0.87	-1.44	-0.56
45	GLN	CD	1.38	-0.75	0.14	0.45	-0.55	-0.95	-1.17	-0.88	-1.03	-1.06	-1.13	-0.48
46	GLN	OE1	-0.19	-0.81	0.17	0.49	-0.10	0.51	-0.39	-0.13	-0.44	-0.34	0.24	-0.69
47	GLN	NE2	0.65	-0.24	0.00	-0.20	0.02	0.21	-0.24	-0.14	-0.40	-0.42	-0.55	-0.60
48	GLU	N	1.54	0.53	-2.51	-1.65	1.03	1.08	0.30	0.08	0.05	0.28	0.24	0.33
49	GLU	CA	0.99	-0.37	0.81	-0.95	-0.60	-0.46	-0.68	-0.80	-0.53	-0.58	-0.79	-0.35
50	GLU	C	-2.50	1.28	1.27	0.77	0.68	0.39	-1.01	-0.91	-0.72	-0.23	-0.03	0.02
51	GLU	O	-1.72	-0.92	0.56	0.93	-0.75	0.40	-0.34	-0.20	0.11	0.19	1.09	0.39
52	GLU	CB	1.15	-0.45	0.18	-0.55	-0.01	-0.06	-0.27	-0.35	-0.74	-0.64	-0.86	-0.39
53	GLU	CG	1.18	0.03	0.45	-0.20	0.07	-0.38	-0.22	-0.36	-0.71	-0.75	-0.93	-0.77
54	GLU	CD	1.18	-0.24	0.81	0.87	-0.15	-0.04	-0.50	-0.43	-0.93	-0.87	0.04	-0.52
55	GLU	OE1	0.60	-0.34	0.75	1.39	0.40	1.38	0.40	0.38	-0.36	-0.34	0.96	-0.94
56	GLU	OE2	0.51	0.07	0.81	1.29	0.49	1.17	0.64	0.32	-0.31	-0.34	0.84	-0.96
57	GLY	N	1.08	0.32	-2.11	-1.67	0.21	-0.41	-0.16	-0.44	-0.37	-0.26	-0.43	-0.21
58	GLY	CA	0.55	-0.23	-0.31	-0.73	-0.27	-0.96	-0.45	-0.67	-0.84	-0.87	-1.37	-0.73
59	GLY	C	-1.71	0.10	0.97	0.18	-0.25	-0.50	-1.21	-1.03	-1.26	-0.91	-0.96	-0.63
60	GLY	O	-1.62	-1.00	0.35	0.40	-0.67	0.50	-0.66	-0.51	-0.46	-0.20	0.74	-0.11
61	HIS	N	2.16	0.91	-2.55	-1.87	0.64	2.23	0.67	0.00	0.24	0.12	0.23	0.22
62	HIS	CA	0.54	-0.58	0.40	-0.91	-0.73	-0.36	-0.52	-0.92	-0.65	-1.08	-0.94	-1.21
63	HIS	C	-2.37	-0.28	-0.22	0.15	-0.43	-0.04	-1.13	-1.44	-0.78	-0.95	-0.82	-0.26
64	HIS	O	-2.05	-1.22	0.53	0.32	-0.87	0.11	-0.54	-0.67	-0.09	-0.55	0.37	-0.18
65	HIS	CB	0.17	-0.64	0.22	-0.70	-0.56	-1.24	-0.91	-0.79	-1.16	-1.14	-1.47	-0.80
66	HIS	CG	1.58	-0.39	-0.22	0.19	-1.07	-1.34	-1.19	-1.39	-1.14	-1.76	-0.67	
67	HIS	ND1	-0.29	-0.47	-0.06	-0.61	-0.30	-0.64	-0.63	-0.41	-0.82	-0.67	-0.88	-1.42
68	HIS	CD2	0.35	-0.49	-0.06	-0.13	-0.47	-1.27	-0.83	-0.63	-0.84	-0.76	-1.11	-0.83
69	HIS	CE1	0.50	-0.26	-0.11	0.05	-0.30	-1.13	-0.67	-0.56	-0.93	-0.78	-0.98	-0.63
70	HIS	NE2	0.89	0.03	0.27	0.15	-0.24	-0.27	-0.27	-0.55	-0.61	-0.74	-0.97	
71	ILE	N	1.20	0.40	-2.15	-2.30	0.75	1.89	0.69	0.68	0.27	0.86	0.99	0.12
72	ILE	CA	0.50	-0.70	0.65	-1.43	-0.88	-0.43	-0.45	-0.71	-0.20	-0.59	-0.63	-0.38
73	ILE	C	-2.45	0.85	2.65	0.99	-0.09	1.90	-0.99	-1.08	-0.32	-0.22	1.60	0.60
74	ILE	O	-2.25	-1.45	0.53	0.14	-0.90	0.77	-0.64	-0.52	0.10	0.30	1.11	0.22
75	ILE	CB	0.94	-1.17	0.15	-1.23	-1.16	-0.26	-0.63	-0.65	-0.70	-0.63	-0.80	-0.33
76	ILE	CG1	0.67	-0.73	-1.14	-0.96	-1.11	-1.20	-0.96	-0.95	-0.74	-0.71	-0.90	-0.13
77	ILE	CG2	0.05	-0.51	-0.41	-0.18	-0.98	-1.25	-1.12	-1.00	-0.97	-0.87	-1.15	-0.42
78	ILE	CD1	0.51	-0.83	-0.81	0.00	-1.09	-1.58	-1.05	-1.11	-0.85	-0.82	-0.98	-0.30
79	LEU	N	1.55	0.35	-2.25	-2.13	1.01	1.09	0.32	0.29	0.26	0.36	0.35	0.04
80	LEU	CA	0.94	-0.70	2.23	-1.18	-1.32	-0.25	-1.01</					

Table 3. (continued)

		149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160
		TYR											
		N	CA	C	O	CB	CG	CD1	CD2	CE1	CE2	CZ	OH
83 LEU	CB	0.81	-0.96	0.01	-1.07	-0.84	-0.80	-0.86	-0.76	-0.85	-0.77	-1.02	-0.47
84 LEU	CG	0.64	-0.78	-0.90	-1.19	-0.73	-0.70	-0.77	-0.79	-0.77	-0.60	-0.73	-0.17
85 LEU	CD1	0.43	-0.85	-0.97	-0.03	-1.03	-1.39	-1.02	-1.05	-0.75	-0.81	-0.98	-0.44
86 LEU	CD2	0.57	-0.67	-0.58	-0.04	-0.94	-1.24	-0.95	-1.06	-0.86	-0.88	-0.90	-0.45
87 LYS	N	1.80	0.30	-2.49	-1.92	0.62	1.28	0.32	-0.27	0.30	0.13	0.29	-0.01
88 LYS	CA	0.58	-0.90	-0.06	-1.24	-0.82	-1.44	-1.02	-1.20	-0.89	-0.90	-1.11	-0.77
89 LYS	C	-2.41	0.87	3.45	1.03	-0.14	0.11	-1.14	-1.43	-0.99	-0.73	0.46	0.27
90 LYS	O	-1.74	-1.32	0.37	0.43	-0.73	0.28	-0.44	-0.51	-0.22	-0.21	0.78	0.02
91 LYS	CB	1.02	-0.76	0.04	-0.85	-0.06	-0.86	-0.60	-0.66	-0.97	-1.17	-1.37	-0.52
92 LYS	CG	0.81	-0.12	-0.61	-0.71	-0.09	-0.91	-0.58	-0.54	-0.94	-0.85	-1.52	-0.67
93 LYS	CD	1.58	-0.27	-0.13	-0.08	0.23	-0.56	-0.31	-0.23	-0.72	-0.81	-1.39	-1.05
94 LYS	CE	1.54	0.19	0.44	0.09	0.24	-0.56	-0.11	0.06	-0.52	-0.31	-0.89	-0.79
95 LYS	NZ	1.97	0.81	0.97	-0.04	1.16	1.06	0.83	1.03	0.40	0.45	0.35	-0.34
96 MET	N	1.80	0.41	-2.34	-2.03	1.17	1.25	0.27	0.43	0.54	0.25	0.80	0.13
97 MET	CA	0.41	-0.37	1.74	-1.18	-1.07	-0.91	-1.12	-1.13	-0.92	-0.71	-0.89	-0.42
98 MET	C	-2.30	1.78	1.63	0.02	-0.41	0.04	-0.94	-1.21	-0.96	-1.05	-0.38	-0.01
99 MET	O	-2.37	-1.24	-0.27	0.18	-1.31	-0.07	-0.83	-0.63	0.00	-0.27	0.60	0.16
100 MET	CB	0.63	-1.09	-0.38	-1.20	-0.95	-1.29	-0.94	-1.07	-0.80	-1.01	-1.15	-0.60
101 MET	CG	0.25	-0.99	-1.08	-0.93	-0.88	-1.18	-0.99	-0.72	-0.90	-0.91	-1.25	-0.39
102 MET	SD	0.12	-1.32	-0.86	0.49	-1.26	-0.93	-1.11	-1.12	-0.74	-0.76	-0.12	-0.02
103 MET	CE	0.28	-0.67	-0.86	-0.26	-1.20	-1.51	-1.09	-1.05	-0.92	-0.88	-1.18	-0.69
104 PHE	N	1.44	1.33	-2.13	-2.19	0.50	1.41	0.40	0.33	0.27	0.42	0.15	-0.03
105 PHE	CA	0.79	-1.02	-0.33	-1.52	-0.71	-0.73	-0.94	-0.78	-0.78	-0.61	-1.04	-0.58
106 PHE	C	-2.24	0.68	2.33	0.06	-0.32	1.01	-1.03	-0.91	-0.74	-0.70	-0.17	0.45
107 PHE	O	-2.24	-1.40	0.48	0.13	-1.03	1.08	-0.66	-0.29	0.07	0.14	1.42	0.26
108 PHE	CB	0.53	-1.01	-0.51	-0.97	-0.69	-0.91	-0.88	-0.81	-0.89	-0.97	-1.12	-0.51
109 PHE	CG	0.40	-0.48	0.04	0.52	-0.96	-1.07	-1.17	-0.99	-0.93	-0.79	-0.51	0.12
110 PHE	CD1	0.15	-0.94	-1.23	-0.76	-1.03	-1.25	-0.96	-1.08	-0.78	-0.87	-0.96	-0.20
111 PHE	CD2	0.19	-0.99	-0.92	-0.45	-0.83	-1.21	-0.99	-0.84	-0.72	-0.85	-0.92	-0.20
112 PHE	CE1	0.08	-0.81	-1.02	0.09	-1.30	-1.60	-1.11	-1.08	-0.72	-0.77	-0.72	-0.20
113 PHE	CE2	0.14	-0.90	-0.74	0.08	-1.23	-1.43	-1.02	-1.03	-0.69	-0.74	-0.67	-0.15
114 PHE	CZ	0.46	-0.98	-0.47	0.28	-1.22	-1.65	-1.08	-1.07	-0.63	-0.79	-0.93	-0.35
115 PRO	N	2.88	0.12	-1.59	-1.35	0.05	-0.92	-1.35	-1.51	-1.27	-1.39	-1.32	-1.01
116 PRO	CA	0.97	-0.80	0.47	-0.94	-0.38	-1.67	-1.03	-1.14	-0.98	-1.23	-1.52	-0.94
117 PRO	C	-2.68	0.22	2.22	0.48	0.16	0.47	-0.91	-0.92	-0.64	-0.49	0.18	-0.18
118 PRO	O	-1.78	-0.62	0.44	0.44	-0.82	0.45	-0.54	-0.62	-0.46	-0.52	0.60	-0.68
119 PRO	CB	0.23	0.02	-0.57	-0.11	-0.37	-1.20	-0.66	-0.77	-0.96	-1.04	-1.45	-0.84
120 PRO	CG	0.62	-0.30	-0.36	0.01	-0.53	-1.43	-0.83	-0.76	-1.04	-1.07	-1.48	-0.90
121 PRO	CD	1.13	-0.19	-1.61	-1.08	-0.42	-1.64	-0.91	-1.00	-1.03	-1.12	-1.56	-1.10
122 SER	N	1.37	0.91	-2.47	-1.92	0.24	1.12	0.27	0.05	0.21	0.25	0.02	-0.12
123 SER	CA	1.07	-0.40	0.63	-0.92	-0.61	-1.00	-0.64	-0.51	-0.67	-0.68	-0.84	-0.68
124 SER	C	-2.49	1.20	1.46	0.70	0.29	0.14	-1.26	-0.67	-0.64	-0.43	0.03	-0.21
125 SER	O	-1.91	-1.02	0.57	0.38	-0.91	0.49	-0.47	-0.27	-0.17	0.02	0.91	0.06
126 SER	CB	0.44	-0.31	-0.13	-0.58	-0.26	-0.43	-0.48	-0.36	-0.71	-0.59	-0.88	-0.46
127 SER	OG	-0.75	-0.49	0.00	-0.57	-0.36	0.56	-0.11	0.09	-0.17	-0.03	0.52	-0.25
128 THR	N	1.08	0.61	-2.34	-1.90	0.59	1.66	0.77	0.45	0.61	0.77	1.69	0.44
129 THR	CA	1.05	-0.44	0.91	-1.36	-0.58	-0.21	-0.62	-0.63	-0.41	-0.59	-0.27	-0.50
130 THR	C	-2.12	-0.23	1.93	0.82	-0.25	0.19	-0.79	-1.08	-0.66	-0.61	0.03	-0.23
131 THR	O	-1.88	-1.28	0.42	0.41	-0.73	0.58	-0.38	-0.47	0.01	0.04	1.20	0.30
132 THR	CB	0.56	-0.60	-0.46	-0.86	-0.25	-0.27	-0.31	-0.65	-0.34	-0.64	-0.50	-0.42
133 THR	OG1	-0.31	-0.79	0.04	-0.50	-0.34	0.58	-0.14	-0.04	-0.14	-0.07	0.37	-0.21
134 THR	CG2	0.34	-0.05	-0.54	-0.16	-0.48	-0.51	-0.46	-0.50	-0.60	-0.68	-0.99	-0.38
135 TRP	N	1.37	-0.10	-2.44	-2.21	0.47	0.80	0.20	0.29	0.26	0.45	-0.02	-0.31
136 TRP	CA	0.77	-1.44	3.40	-1.25	-1.24	-1.11	-0.77	-1.10	-0.61	-0.66	-0.88	-0.58
137 TRP	C	-2.18	0.29	1.56	0.29	-0.36	0.47	-1.51	-1.28	-0.86	-0.76	1.25	-0.30
138 TRP	O	-2.18	-1.29	0.97	0.12	-1.13	0.54	-0.64	-0.59	-0.06	-0.08	2.00	0.15
139 TRP	CB	0.37	-1.17	-0.40	-1.07	-0.86	-0.93	-1.13	-0.99	-1.10	-0.93	-0.99	-0.52
140 TRP	CG	0.06	-0.94	-0.17	0.27	-0.95	-0.80	-1.34	-0.96	-0.98	-0.90	-0.33	-0.23
141 TRP	CD1	-0.04	-1.01	-1.06	-0.86	-0.97	-1.09	-1.01	-0.87	-0.71	-0.90	-1.13	-0.34
142 TRP	CD2	0.47	-0.81	-0.69	0.77	-1.28	-0.52	-1.23	-1.17	-0.49	0.10	1.20	0.36
143 TRP	NE1	0.02	-0.60	-0.75	-1.00	-0.71	-0.80	-0.69	-0.43	-0.57	-0.51	-0.91	-0.88
144 TRP	CE2	0.28	-0.60	0.08	1.12	-1.48	0.05	-1.25	-0.78	-0.29	0.10	0.85	0.56
145 TRP	CE3	-0.52	-0.88	-2.02	-0.50	-1.51	-1.71	-1.05	-1.15	-0.55	-0.57	-0.83	-0.01
146 TRP	CZ2	0.52	-0.78	-0.83	-0.28	-1.00	-1.21	-0.78	-0.85	-0.45	-0.78	-0.75	-0.44
147 TRP	CZ3	-0.24	-1.10	-1.57	-0.32	-1.27	-1.17	-0.78	-1.05	-0.73	-0.76	-0.44	0.10
148 TRP	CH2	0.21	-0.78	-1.23	0.01	-1.15	-1.06	-0.79	-1.16	-0.72	-0.66	-0.88	-0.25
149 TYR	N	1.14	0.31	-1.96	-2.04	0.36	1.12	0.33	0.09	0.08	0.49	0.43	-0.25
150 TYR	CA	0.34	-0.90	1.52	-1.41	-0.78	-0.94	-0.77	-1.10	-0.61	-0.66	-0.88	-0.58
151 TYR	C	-1.92	1.55	2.77	0.59	-0.24	0.93	-0.80	-1.33	-0.75	-0.45	0.31	0.04
152 TYR	O	-2.04	-1.45	0.61	0.37	-0.95	0.95	-0.39	-0.47	-0.03	0.13	0.87	0.06
153 TYR	CB	0.37	-0.76	-0.23	-0.93	-0.90	-1.19	-0.81	-0.97	-0.96	-0.91	-1.23	-0.48
154 TYR	CG	1.17	-0.93	0.94	0.96	-1.19	-1.52	-1.27	-1.34	-0.80	-0.96	-0.84	0.01
155 TYR	CD1	0.37	-0.76	-0.80	-0.41	-0.80	-1.28	-1.06	-1.03	-0.72	-0.85	-0.98	-0.12
156 TYR	CD2	0.13	-1.09	-1.32	-0.49	-0.96	-1.34	-1.03	-0.87	-0.84	-0.74	-0.91	-0.39
157 TYR	CE1	0.12	-0.59	-0.74	-0.06	-0.96	-0.80	-0.71	-0.84	-0.39	-0.45	-0.35	0.05
158 TYR	CE2	0.54	-0.64	-0.44	0.08	-0.91	-0.96	-0.84	-0.74	-0.45	-0.51	-0.28	-0.28
159 TYR	CZ	0.48	-0.86	0.33	0.83	-1.23	-0.84	-0.98	-0.90	-0.35	-0.27	0.87	0.61
160 TYR	OH	-0.25	-0.60	0.01	0.02	-0.47	0.03	-0.10	-0.38	0.09	-0.25	0.62	-0.21
161 VAL	N	1.41	0.25	-1.94	-2.29	0.70	1.11	0.35	0.50	0.56	0.82	0.76	0.21
162 VAL	CA	1.35	-0.80	0.91	-1.55	-0.79	-0.32	-0.72	-0.74	-0.36	-0.47	-0.23	-0.39
163 VAL	C	-2.10	0.63	3.70	1.23	-0.20	1.04	-1.25	-1.14	-0.66	-0.11	0.50	-0.02
164 VAL	O	-2.23	-1.45	0.61	0.10	-0.91	0.74	-0.61	-0.43	0.05	0.23	1.27	0.22
165 VAL	CB	0.61	-0.80	0.20	-1.05	-1.09	-0.89	-0.68	-0.73	-0.79	-0.67		

Table 3. (continued)

		161 VAL N	162 VAL CA	163 VAL C	164 VAL O	165 VAL CB	166 VAL CG1	167 VAL CG2		161 VAL N	162 VAL CA	163 VAL C	164 VAL O	165 VAL CB	166 VAL CG1	167 VAL CG2			
0	SAS	2.27	1.99	2.18	1.46	1.77	1.43	1.54	83	LEU	CB	1.11	-1.26	0.28	-1.14	-1.00	-0.97	-1.09	
1	ALA	N	1.33	0.86	-2.64	-2.08	0.61	0.07	0.20	84	LEU	CG	0.87	-0.69	-0.47	-1.36	-0.32	-1.20	-1.21
2	ALA	CA	0.79	-0.58	0.59	-0.91	-1.10	-0.74	-0.94	85	LEU	CD1	0.41	-1.10	-0.90	-0.08	-0.84	-1.32	-1.28
3	ALA	C	-2.12	1.39	2.71	0.71	0.16	-0.78	-0.77	86	LEU	CD2	0.71	-0.71	-0.51	0.07	-0.93	-1.29	-1.26
4	ALA	O	-2.10	-0.92	1.06	0.37	-1.13	-0.16	-0.57	87	LYS	N	1.64	0.93	-2.65	-1.92	1.16	0.32	0.69
5	ALA	CB	0.67	-0.93	-0.48	-0.73	-0.70	-0.96	-0.90	88	LYS	CA	1.04	-0.58	1.23	-0.91	-1.07	-0.39	-0.53
6	ARG	N	1.21	1.46	-2.65	-1.85	1.10	0.34	0.63	89	LYS	C	-2.21	0.97	3.59	1.09	0.15	-0.59	-0.61
7	ARG	CA	0.70	-0.58	1.55	-1.04	-0.67	-0.50	-0.56	90	LYS	O	-1.88	-1.16	0.94	0.45	-1.01	0.06	-0.20
8	ARG	C	-2.15	1.52	2.59	1.30	0.39	-0.60	-0.55	91	LYS	CB	1.09	-0.61	-0.09	-0.73	-0.35	-0.32	-0.37
9	ARG	O	-1.93	-1.27	1.31	0.51	-0.89	-0.09	-0.33	92	LYS	CG	1.11	0.25	-0.57	-0.69	-0.10	-0.58	-0.30
10	ARG	CB	1.15	-0.60	0.38	-0.69	-0.36	-0.33	-0.35	93	LYS	CD	1.29	-0.12	-0.34	0.07	0.28	-0.27	0.03
11	ARG	CG	0.76	-0.08	-0.53	-0.54	-0.36	-0.48	-0.46	94	LYS	CE	1.41	0.56	0.48	0.17	0.30	-0.19	0.28
12	ARG	CD	1.39	0.03	0.29	-0.03	0.14	-0.27	-0.11	95	LYS	NZ	1.93	1.22	1.13	0.15	1.70	1.09	1.45
13	ARG	NE	1.48	0.18	0.57	-0.12	0.23	-0.23	0.03	96	MET	N	1.12	1.16	-2.45	-2.24	0.67	0.45	0.80
14	ARG	CZ	1.72	-0.47	0.21	0.91	-0.23	-0.89	-0.67	97	MET	CA	0.93	-0.74	3.54	-1.16	-1.26	-0.36	-0.71
15	ARG	NH1	1.00	-0.10	0.20	0.08	0.30	0.02	0.22	98	MET	C	-1.99	0.72	2.19	0.61	0.24	-0.52	-0.57
16	ARG	NH2	1.20	0.10	0.28	0.07	0.15	0.10	0.22	99	MET	O	-2.28	-1.12	1.09	0.36	-1.30	-0.09	-0.50
17	ASN	N	1.34	0.94	-2.74	-1.78	0.52	0.44	0.84	100	MET	CB	0.95	-1.20	0.68	-1.20	-0.73	-0.87	-0.92
18	ASN	CA	0.77	0.01	0.70	-0.92	-1.02	-0.26	-0.40	101	MET	CG	0.52	-0.80	-0.59	-0.86	-0.61	-1.02	-1.07
19	ASN	C	-2.18	1.12	1.91	0.41	0.53	-0.32	-0.44	102	MET	SD	0.61	-1.24	-0.97	0.51	-0.82	-1.21	-1.11
20	ASN	O	-1.79	-0.76	1.21	0.55	-0.99	0.14	-0.38	103	MET	CE	0.29	-1.03	-1.02	-0.24	-0.70	-1.01	-0.92
21	ASN	CB	1.10	-0.37	0.14	-0.65	-0.36	-0.23	-0.30	104	PHE	N	1.23	0.81	-2.24	-2.28	0.77	0.25	0.55
22	ASN	CG	0.44	0.18	0.12	-0.46	-0.35	-0.72	-0.69	105	PHE	CA	0.23	-0.78	1.53	-1.47	-1.24	-0.59	-0.87
23	ASN	OD1	-0.71	-0.14	0.77	0.45	-0.33	0.01	0.08	106	PHE	C	-2.12	0.35	-1.23	0.76	0.22	-0.55	-0.95
24	ASN	OD2	0.42	0.04	0.07	-0.35	0.14	-0.12	0.12	107	PHE	O	-2.39	-1.65	0.69	0.01	-1.20	-0.25	-0.55
25	ASP	N	1.26	1.18	-2.69	-1.67	0.07	0.34	0.59	108	PHE	CB	0.79	-1.10	-0.33	-0.97	-0.94	-0.91	-1.06
26	ASP	CA	1.36	-0.07	0.31	-0.65	-1.07	-0.03	-0.33	109	PHE	CG	1.55	-0.36	1.67	0.27	-0.90	-1.24	-1.23
27	ASP	C	-2.42	1.64	1.52	0.82	0.58	-0.46	-0.33	110	PHE	CD1	0.74	-0.79	-0.98	-0.81	-1.02	-1.13	-1.07
28	ASP	O	-1.80	-0.50	1.12	0.74	-0.96	0.21	-0.24	111	PHE	CD2	0.42	-0.60	-1.09	-0.54	-0.90	-1.16	-1.13
29	ASP	CB	0.84	0.18	0.54	-0.40	-0.33	-0.32	-0.24	112	PHE	CE1	0.53	-0.71	-0.76	0.08	-0.94	-1.15	-1.15
30	ASP	CG	0.53	0.40	1.28	0.04	-0.17	-0.05	0.01	113	PHE	CE2	0.32	-0.72	-0.75	0.11	-1.06	-1.21	-1.23
31	ASP	OD1	-0.27	0.36	1.01	1.02	0.11	0.76	0.69	114	PHE	CZ	0.60	-0.59	-0.64	0.16	-0.85	-1.25	-1.12
32	ASP	OD2	-0.26	-0.03	1.33	1.15	0.11	0.66	0.59	115	PRO	N	2.92	1.56	-1.92	-1.31	0.69	-0.85	-0.25
33	CYS	N	2.46	1.03	-2.32	-2.01	1.06	0.16	0.61	116	PRO	CA	1.26	-0.55	-0.17	-0.98	-0.90	-0.53	-0.58
34	CYS	CA	0.74	-0.74	0.03	-1.25	-1.01	-0.34	-0.89	117	PRO	C	-2.33	2.52	0.96	0.84	0.57	-0.07	-0.36
35	CYS	C	-1.56	1.34	2.46	0.06	-0.44	-0.66	-0.69	118	PRO	O	-1.81	-0.58	0.34	0.57	-1.11	0.10	-0.43
36	CYS	O	-2.03	-1.18	1.25	0.09	-0.98	-0.03	-0.52	119	PRO	CB	0.50	-0.03	-0.54	-0.05	-0.09	-0.54	-0.58
37	CYS	CB	0.71	-0.66	-0.40	-0.72	-0.91	-0.74	-0.80	120	PRO	CG	1.09	-0.10	-0.17	-0.01	-0.21	-0.45	-0.51
38	CYS	SG	0.15	-0.66	-0.69	-0.13	-0.70	-0.88	-0.99	121	PRO	CD	1.05	-0.07	-1.69	-1.01	0.14	-0.20	-0.08
39	GLN	N	1.40	1.05	-2.86	-1.89	0.92	0.39	0.62	122	SER	N	1.53	1.14	-2.48	-1.78	0.51	0.20	0.57
40	GLN	CA	1.17	-0.42	1.60	-0.86	-1.19	-0.46	-0.62	123	SER	CA	1.16	0.13	1.00	-0.96	-0.79	-0.40	-0.48
41	GLN	C	-2.34	1.54	2.10	1.39	0.35	-0.65	-0.41	124	SER	C	-2.25	1.67	3.08	0.70	0.37	-0.44	-0.27
42	GLN	O	-1.84	-0.92	0.56	0.60	-1.08	0.13	-0.26	125	SER	O	-1.79	-1.10	0.47	0.35	-0.85	-0.01	-0.24
43	GLN	CB	1.40	-0.68	0.55	-0.73	-0.44	-0.40	-0.44	126	SER	CB	0.76	-0.51	-0.15	-0.51	-0.26	-0.45	-0.35
44	GLN	CG	0.95	-0.14	-0.61	-0.50	-0.13	-0.41	-0.29	127	SER	OG	-0.55	-0.42	0.63	-0.31	-0.35	0.01	0.09
45	GLN	CD	1.22	-0.73	0.81	0.74	-0.14	-0.85	-0.51	128	THR	N	1.24	1.24	-2.30	-2.01	0.49	0.48	0.70
46	GLN	OE1	0.15	-0.60	0.34	0.39	-0.02	0.05	0.12	129	THR	CA	0.70	-0.77	0.87	-1.54	-0.74	-0.42	-0.35
47	GLN	NE2	0.81	-0.13	0.20	-0.10	0.15	-0.09	0.12	130	THR	C	-2.12	0.94	0.72	0.64	0.33	-0.69	-0.49
48	GLU	N	1.72	1.14	-2.78	-1.74	0.86	0.39	0.71	131	THR	O	-2.03	-1.29	1.40	0.34	-0.87	-0.01	-0.40
49	GLU	CA	1.09	-0.45	0.14	-1.01	-1.13	-0.39	-0.52	132	THR	CB	0.91	-0.85	0.40	-0.90	-0.71	-0.32	-0.51
50	GLU	C	-2.50	1.59	2.20	1.21	0.14	-0.51	-0.32	133	THR	OG1	-0.21	-0.25	0.10	-0.52	-0.51	-0.16	-0.05
51	GLU	O	-1.79	-0.92	1.69	0.77	-1.05	0.07	-0.25	134	THR	CG2	0.43	-0.16	-0.77	-0.33	-0.45	-0.73	-0.71
52	GLU	CB	1.46	-0.36	0.50	-0.48	-0.29	-0.39	-0.19	135	TRP	N	2.20	0.95	-2.44	-2.12	1.08	0.23	0.53
53	GLU	CG	0.93	0.29	0.02	-0.36	-0.07	-0.45	-0.37	136	TRP	CA	0.62	-0.58	1.40	-1.43	-1.09	-0.52	-0.75
54	GLU	CD	1.46	0.27	0.52	0.98	-0.26	-0.59	-0.34	137	TRP	C	-2.20	2.12	0.57	-0.07	-0.39	-0.53	-0.97
55	GLU	OE1	0.75	0.03	0.66	1.41	0.63	0.46	0.54	138	TRP	O	-2.23	-1.31	1.79	0.25	-1.28	-0.12	-0.55
56	GLU	OE2	0.61	0.57	1.12	1.21	0.44	0.38	0.58	139	TRP	CB	0.79	-0.99	0.76	-0.96	-1.05	-0.58	-0.91
57	GLY	N	1.16	0.30	-2.30	-1.73	0.02	0.17	0.37	140	TRP	CG	2.06	-0.67	0.21	0.38	-1.01	-1.11	-0.90
58	GLY	CA	0.79	-0.24	0.05	-0.65	-0.37	-0.55	-0.33	141	TRP	CD1	0.60	-0.65	-1.11	-0.52	-0.56	-0.76	-0.64
59	GLY	C	-1.67	0.25	1.06	0.35	-0.53	-0.88	-0.57	142	TRP	CD2	1.21	-0.39	0.22	1.02	-0.76	-1.14	-1.03
60	GLY	O	-1.72	-0.99	0.42	0.39	-0.63	-0.20	-0.37	143	TRP	NE1	0.58	-0.38	0.04	-0.40	-0.72	-0.47	-0.53
61	HIS	N	1.31	1.39	-2.22	-2.09	0.77	0.37	0.45	144	TRP	CE2	1.32	0.25	-0.52	1.39	-0.93	-1.12	-1.13
62	HIS	CA	0.47	-0.19	2.06	-1.00	-0.97	-0.12	-0.62	145	TRP	CE3	-0.18	-0.84	-2.06	-0.37	-1.09	-1.15	-1.10
63	HIS	C	-2.20	1.23	1.75	0.16	0.21												