

Rotamer probabilities for valine alpha helix region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclature

		-50			-40			-30			-20		
		M	P	T	M	P	T	M	P	T	M	P	T
Ceder		0.438	0.300	0.261	0.514	0.302	0.183	0.597	0.274	0.129	0.695	0.219	0.085
Charm		0.230	0.143	0.628	0.490	0.189	0.321	0.742	0.141	0.117	0.889	0.079	0.032
Amber		0.544	0.097	0.360	0.747	0.091	0.161	0.885	0.065	0.050	0.950	0.036	0.015
Hf		0.094	0.125	0.781	0.297	0.200	0.503	0.566	0.262	0.173	0.765	0.195	0.040
Dft		0.130	0.150	0.719	0.328	0.200	0.472	0.563	0.233	0.204	0.745	0.192	0.063
Mp2		0.070	0.180	0.750	0.231	0.313	0.456	0.466	0.379	0.155	0.681	0.282	0.037
Dun	-70	0.005	0.007	0.988	0.036	0.040	0.925	0.189	0.167	0.644	0.524	0.298	0.177
Ceder		0.451	0.308	0.241	0.526	0.307	0.167	0.613	0.272	0.116	0.720	0.205	0.074
Charm		0.271	0.153	0.576	0.547	0.160	0.293	0.773	0.133	0.094	0.913	0.065	0.022
Amber		0.581	0.102	0.318	0.775	0.094	0.132	0.897	0.062	0.040	0.957	0.032	0.011
Hf		0.107	0.161	0.732	0.316	0.232	0.452	0.568	0.281	0.151	0.785	0.183	0.032
Dft		0.144	0.176	0.680	0.325	0.220	0.455	0.549	0.262	0.189	0.758	0.187	0.054
Mp2		0.074	0.224	0.702	0.236	0.352	0.413	0.465	0.398	0.136	0.710	0.258	0.032
Dun	-60	0.005	0.012	0.983	0.030	0.052	0.918	0.159	0.222	0.619	0.451	0.393	0.156
Ceder		0.469	0.314	0.217	0.545	0.305	0.149	0.636	0.264	0.100	0.744	0.196	0.060
Charm		0.302	0.160	0.537	0.588	0.161	0.251	0.820	0.110	0.069	0.936	0.049	0.015
Amber		0.625	0.107	0.268	0.804	0.094	0.102	0.912	0.059	0.030	0.965	0.028	0.007
Hf		0.123	0.197	0.679	0.335	0.266	0.399	0.587	0.289	0.124	0.814	0.166	0.020
Dft		0.147	0.201	0.652	0.341	0.255	0.404	0.574	0.269	0.157	0.789	0.175	0.036
Mp2		0.080	0.253	0.667	0.244	0.355	0.401	0.495	0.381	0.123	0.747	0.229	0.024
Dun	-50	0.005	0.028	0.967	0.029	0.106	0.865	0.129	0.375	0.497	0.279	0.576	0.145
Ceder		0.490	0.315	0.195	0.570	0.299	0.131	0.665	0.251	0.084	0.780	0.173	0.047
Charm		0.356	0.149	0.495	0.640	0.152	0.209	0.851	0.094	0.055	0.953	0.036	0.011
Amber		0.666	0.111	0.223	0.832	0.091	0.077	0.928	0.052	0.020	0.973	0.023	0.004
Hf		0.146	0.237	0.617	0.364	0.310	0.326	0.628	0.293	0.078	0.824	0.167	0.009
Dft		0.172	0.235	0.593	0.370	0.289	0.341	0.614	0.279	0.107	0.811	0.176	0.013
Mp2		0.086	0.276	0.638	0.252	0.377	0.371	0.532	0.373	0.095	0.764	0.224	0.012
Dun	-40	0.032	0.073	0.894	0.082	0.287	0.632	0.147	0.612	0.241	0.390	0.285	0.325

Rotamer probabilities for valine beta strand region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclature

		110			120			130			140			150			160	
		M	P	T	M	P	T	M	P	T	M	P	T	M	P	T	M	P
Ceder		0.376	0.230	0.395	0.423	0.238	0.339	0.452	0.270	0.278	0.503	0.272	0.225	0.602	0.238	0.160	0.746	0.161
Charm		0.055	0.055	0.890	0.097	0.106	0.797	0.177	0.187	0.636	0.310	0.229	0.461	0.542	0.241	0.216	0.777	0.167
Amber		0.212	0.041	0.747	0.273	0.062	0.665	0.390	0.090	0.520	0.566	0.104	0.330	0.754	0.098	0.148	0.884	0.071
Hf		0.035	0.036	0.929	0.065	0.054	0.880	0.161	0.088	0.751	0.392	0.119	0.489	0.728	0.107	0.165	0.894	0.075
Dft		0.048	0.048	0.904	0.080	0.069	0.851	0.158	0.108	0.733	0.332	0.160	0.508	0.574	0.172	0.255	0.767	0.153
Mp2		0.030	0.036	0.934	0.055	0.055	0.890	0.126	0.103	0.771	0.313	0.157	0.530	0.627	0.163	0.210	0.852	0.106
Dun	-110	0.004	0.004	0.992	0.005	0.007	0.987	0.025	0.034	0.941	0.101	0.074	0.825	0.516	0.081	0.403	0.885	0.052
Ceder		0.387	0.231	0.382	0.429	0.249	0.321	0.464	0.262	0.274	0.527	0.258	0.215	0.629	0.217	0.154	0.746	0.167
Charm		0.043	0.055	0.902	0.072	0.106	0.823	0.123	0.225	0.652	0.283	0.263	0.454	0.531	0.265	0.203	0.746	0.200
Amber		0.220	0.046	0.734	0.283	0.069	0.649	0.399	0.097	0.503	0.572	0.111	0.317	0.752	0.105	0.143	0.880	0.076
Hf		0.033	0.042	0.926	0.062	0.064	0.874	0.153	0.106	0.740	0.386	0.152	0.462	0.707	0.136	0.158	0.873	0.097
Dft		0.044	0.055	0.901	0.079	0.084	0.837	0.158	0.133	0.709	0.308	0.191	0.501	0.540	0.208	0.252	0.735	0.186
Mp2		0.028	0.036	0.936	0.053	0.061	0.886	0.125	0.115	0.760	0.308	0.181	0.510	0.625	0.176	0.199	0.843	0.117
Dun	-120	0.004	0.006	0.989	0.010	0.013	0.977	0.038	0.048	0.914	0.144	0.097	0.760	0.600	0.084	0.316	0.929	0.026
Ceder		0.406	0.236	0.358	0.447	0.250	0.303	0.494	0.251	0.254	0.545	0.256	0.200	0.633	0.222	0.145	0.745	0.170
Charm		0.044	0.080	0.876	0.068	0.153	0.779	0.133	0.264	0.603	0.268	0.354	0.378	0.497	0.341	0.162	0.730	0.227
Amber		0.212	0.053	0.735	0.278	0.079	0.643	0.397	0.112	0.492	0.569	0.128	0.303	0.748	0.120	0.132	0.873	0.088
Hf		0.028	0.057	0.916	0.054	0.090	0.856	0.136	0.153	0.712	0.344	0.225	0.431	0.639	0.217	0.144	0.807	0.167
Dft		0.039	0.073	0.888	0.068	0.114	0.818	0.137	0.183	0.680	0.271	0.253	0.476	0.478	0.295	0.227	0.649	0.279
Mp2		0.024	0.043	0.933	0.047	0.076	0.877	0.112	0.146	0.742	0.276	0.236	0.488	0.580	0.235	0.185	0.796	0.169
Dun	-130	0.001	0.013	0.986	0.009	0.025	0.966	0.040	0.081	0.878	0.156	0.165	0.679	0.625	0.131	0.244	0.946	0.018
Ceder		0.412	0.273	0.315	0.449	0.292	0.259	0.487	0.298	0.214	0.538	0.291	0.172	0.621	0.265	0.115	0.735	0.200
Charm		0.049	0.166	0.785	0.058	0.295	0.647	0.104	0.450	0.446	0.198	0.563	0.239	0.363	0.549	0.088	0.540	0.437
Amber		0.222	0.072	0.706	0.253	0.113	0.634	0.372	0.160	0.468	0.545	0.184	0.271	0.723	0.170	0.108	0.845	0.127
Hf		0.026	0.102	0.873	0.043	0.165	0.792	0.105	0.282	0.613	0.259	0.410	0.331	0.475	0.427	0.098	0.613	0.371
Dft		0.034	0.124	0.842	0.053	0.184	0.763	0.108	0.291	0.601	0.204	0.424	0.372	0.342	0.502	0.157	0.470	0.485
Mp2		0.018	0.069	0.912	0.036	0.121	0.843	0.087	0.234	0.679	0.212	0.378	0.410	0.443	0.408	0.150	0.638	0.335
Dun	-140	0.003	0.021	0.976	0.006	0.054	0.940	0.030	0.171	0.799	0.138	0.311	0.551	0.570	0.231	0.199	0.922	0.040

T
0.093
0.056
0.045
0.031
0.080
0.042
0.064
0.087
0.054
0.044
0.029
0.079
0.039
0.045
0.085
0.042
0.039
0.026
0.073
0.035
0.036
0.065
0.023
0.028
0.016
0.045
0.026
0.038

Rotamer probabilities for isoleucine alpha helix region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclatur

		-50								-40								
		MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP
Ceder		0.146	0.039	0.079	0.118	0.015	0.154	0.015	0.311	0.123	0.103	0.026	0.050	0.144	0.029	0.208	0.009	0.298
Charm		0.280	0.033	0.218	0.045	0.003	0.116	0.003	0.162	0.141	0.137	0.016	0.102	0.078	0.009	0.269	0.002	0.194
Amber		0.075	0.008	0.038	0.103	0.008	0.193	0.006	0.309	0.260	0.030	0.003	0.012	0.137	0.012	0.315	0.003	0.280
Hf		0.196	0.021	0.379	0.002	0.000	0.045	0.003	0.221	0.133	0.091	0.012	0.180	0.006	0.003	0.140	0.003	0.374
Dft		0.154	0.027	0.281	0.004	0.001	0.063	0.007	0.319	0.144	0.079	0.016	0.144	0.009	0.004	0.137	0.006	0.420
Mp2		0.180	0.038	0.177	0.002	0.000	0.018	0.007	0.479	0.099	0.086	0.020	0.080	0.007	0.003	0.054	0.005	0.601
Dun	-70	0.138	0.002	0.852	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.005	0.143	0.005	0.789	0.000	0.001	0.008	0.002	0.027
Ceder		0.138	0.034	0.071	0.128	0.018	0.157	0.015	0.315	0.124	0.091	0.022	0.047	0.145	0.031	0.218	0.008	0.305
Charm		0.258	0.029	0.176	0.051	0.003	0.144	0.003	0.166	0.169	0.122	0.014	0.069	0.088	0.010	0.306	0.002	0.204
Amber		0.060	0.006	0.029	0.107	0.009	0.211	0.006	0.316	0.257	0.023	0.002	0.009	0.139	0.014	0.335	0.003	0.275
Hf		0.171	0.019	0.318	0.002	0.001	0.048	0.004	0.266	0.171	0.075	0.010	0.142	0.006	0.003	0.144	0.003	0.402
Dft		0.132	0.025	0.236	0.004	0.001	0.063	0.008	0.359	0.170	0.067	0.015	0.118	0.009	0.004	0.133	0.008	0.444
Mp2		0.159	0.031	0.143	0.002	0.000	0.019	0.008	0.521	0.116	0.076	0.017	0.065	0.007	0.003	0.057	0.006	0.609
Dun	-60	0.135	0.003	0.849	0.000	0.000	0.001	0.001	0.004	0.008	0.134	0.004	0.790	0.000	0.001	0.009	0.002	0.031
Ceder		0.111	0.029	0.057	0.139	0.021	0.178	0.015	0.306	0.144	0.073	0.019	0.039	0.161	0.039	0.219	0.007	0.319
Charm		0.195	0.023	0.215	0.033	0.002	0.107	0.004	0.237	0.184	0.118	0.012	0.080	0.068	0.008	0.240	0.003	0.267
Amber		0.045	0.004	0.021	0.118	0.010	0.231	0.006	0.324	0.241	0.017	0.001	0.007	0.146	0.018	0.357	0.003	0.263
Hf		0.149	0.016	0.258	0.002	0.001	0.054	0.004	0.310	0.207	0.063	0.008	0.113	0.006	0.003	0.157	0.003	0.421
Dft		0.123	0.023	0.192	0.005	0.001	0.067	0.010	0.387	0.192	0.060	0.013	0.095	0.009	0.005	0.141	0.007	0.457
Mp2		0.151	0.027	0.123	0.003	0.001	0.021	0.009	0.540	0.126	0.076	0.016	0.061	0.007	0.003	0.067	0.006	0.583
Dun	-50	0.157	0.007	0.802	0.000	0.000	0.002	0.002	0.012	0.018	0.144	0.007	0.729	0.000	0.000	0.008	0.003	0.056
Ceder		0.092	0.023	0.045	0.155	0.026	0.193	0.014	0.311	0.139	0.061	0.013	0.027	0.179	0.045	0.259	0.006	0.281
Charm		0.234	0.026	0.129	0.041	0.003	0.126	0.003	0.253	0.184	0.117	0.013	0.059	0.068	0.009	0.262	0.002	0.270
Amber		0.035	0.003	0.014	0.122	0.013	0.257	0.005	0.310	0.241	0.013	0.001	0.004	0.152	0.023	0.380	0.002	0.254
Hf		0.124	0.012	0.202	0.002	0.001	0.062	0.004	0.355	0.238	0.047	0.006	0.084	0.006	0.003	0.175	0.003	0.443
Dft		0.107	0.018	0.154	0.005	0.002	0.072	0.010	0.410	0.223	0.045	0.009	0.070	0.008	0.004	0.146	0.007	0.493
Mp2		0.144	0.023	0.109	0.003	0.001	0.024	0.009	0.545	0.142	0.068	0.013	0.052	0.007	0.003	0.075	0.006	0.586
Dun	-40	0.252	0.005	0.672	0.000	0.000	0.004	0.000	0.046	0.020	0.185	0.005	0.529	0.000	0.001	0.070	0.001	0.109

TT	-30									-20								
	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.134	0.076	0.016	0.031	0.160	0.078	0.250	0.003	0.274	0.112	0.045	0.009	0.018	0.173	0.170	0.301	0.001	0.193	0.088
0.194	0.051	0.005	0.028	0.116	0.020	0.462	0.001	0.169	0.148	0.014	0.001	0.007	0.135	0.038	0.638	0.000	0.090	0.077
0.207	0.010	0.001	0.003	0.165	0.028	0.459	0.001	0.204	0.129	0.003	0.000	0.001	0.169	0.069	0.591	0.000	0.103	0.064
0.193	0.029	0.004	0.053	0.013	0.009	0.315	0.001	0.394	0.182	0.008	0.001	0.013	0.019	0.017	0.519	0.001	0.254	0.170
0.185	0.033	0.006	0.058	0.016	0.010	0.240	0.004	0.458	0.174	0.013	0.002	0.022	0.024	0.025	0.401	0.002	0.335	0.177
0.143	0.033	0.007	0.027	0.017	0.009	0.133	0.003	0.601	0.169	0.012	0.002	0.009	0.030	0.020	0.260	0.001	0.515	0.152
0.025	0.137	0.011	0.521	0.000	0.007	0.077	0.005	0.120	0.122	0.039	0.004	0.130	0.000	0.010	0.345	0.005	0.207	0.261
0.133	0.056	0.013	0.029	0.159	0.081	0.264	0.003	0.282	0.112	0.033	0.008	0.015	0.171	0.179	0.315	0.001	0.189	0.089
0.186	0.041	0.004	0.021	0.115	0.025	0.505	0.000	0.158	0.130	0.009	0.001	0.004	0.133	0.041	0.680	0.000	0.062	0.069
0.199	0.008	0.001	0.002	0.166	0.031	0.485	0.001	0.190	0.116	0.002	0.000	0.000	0.165	0.086	0.599	0.000	0.089	0.058
0.216	0.024	0.003	0.042	0.013	0.009	0.322	0.002	0.388	0.197	0.006	0.001	0.010	0.018	0.018	0.530	0.001	0.250	0.168
0.200	0.030	0.006	0.050	0.017	0.011	0.249	0.004	0.452	0.182	0.011	0.002	0.018	0.025	0.030	0.412	0.002	0.318	0.183
0.159	0.030	0.006	0.023	0.016	0.010	0.141	0.003	0.602	0.169	0.011	0.002	0.008	0.035	0.022	0.289	0.001	0.474	0.158
0.029	0.119	0.007	0.496	0.000	0.007	0.068	0.006	0.146	0.151	0.045	0.005	0.121	0.000	0.010	0.250	0.006	0.232	0.330
0.123	0.044	0.010	0.021	0.165	0.097	0.285	0.003	0.267	0.108	0.027	0.006	0.012	0.187	0.199	0.315	0.001	0.180	0.073
0.204	0.052	0.004	0.028	0.093	0.022	0.408	0.001	0.224	0.168	0.038	0.013	0.003	0.393	0.164	0.275	0.000	0.068	0.047
0.187	0.005	0.000	0.002	0.167	0.038	0.514	0.001	0.171	0.101	0.001	0.000	0.000	0.165	0.106	0.605	0.000	0.072	0.051
0.226	0.019	0.002	0.033	0.012	0.009	0.345	0.001	0.365	0.213	0.003	0.000	0.006	0.017	0.018	0.547	0.000	0.253	0.156
0.213	0.023	0.005	0.038	0.016	0.011	0.258	0.003	0.454	0.192	0.006	0.001	0.010	0.025	0.031	0.452	0.001	0.291	0.183
0.179	0.029	0.005	0.021	0.016	0.011	0.158	0.003	0.600	0.157	0.008	0.001	0.005	0.049	0.028	0.338	0.001	0.407	0.164
0.053	0.097	0.003	0.387	0.000	0.006	0.059	0.006	0.218	0.225	0.066	0.001	0.125	0.000	0.021	0.150	0.002	0.309	0.326
0.129	0.040	0.009	0.018	0.188	0.125	0.280	0.003	0.234	0.102	0.019	0.004	0.008	0.187	0.243	0.316	0.001	0.158	0.063
0.200	0.035	0.004	0.019	0.101	0.024	0.452	0.001	0.212	0.151	0.011	0.001	0.004	0.128	0.041	0.611	0.000	0.107	0.097
0.170	0.003	0.000	0.001	0.166	0.053	0.541	0.001	0.144	0.091	0.001	0.000	0.000	0.185	0.137	0.588	0.000	0.052	0.037
0.232	0.010	0.001	0.019	0.013	0.009	0.377	0.001	0.339	0.230	0.001	0.000	0.002	0.017	0.019	0.551	0.000	0.261	0.148
0.218	0.012	0.003	0.021	0.016	0.012	0.290	0.003	0.434	0.209	0.002	0.000	0.003	0.027	0.033	0.448	0.001	0.306	0.180
0.189	0.019	0.003	0.014	0.019	0.012	0.176	0.002	0.592	0.163	0.002	0.000	0.002	0.054	0.028	0.336	0.001	0.417	0.159
0.100	0.059	0.005	0.305	0.001	0.009	0.262	0.003	0.136	0.221	0.037	0.003	0.145	0.003	0.026	0.549	0.003	0.071	0.164

Rotamer probabilities for isoleucine beta strand region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclature

		110								120								
		MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP
Ceder		0.261	0.043	0.112	0.081	0.013	0.110	0.033	0.256	0.091	0.238	0.037	0.093	0.097	0.016	0.130	0.028	0.266
Charm		0.543	0.019	0.292	0.001	0.001	0.033	0.001	0.083	0.027	0.464	0.019	0.300	0.002	0.001	0.047	0.002	0.136
Amber		0.332	0.020	0.184	0.021	0.007	0.149	0.005	0.216	0.066	0.277	0.016	0.154	0.030	0.007	0.172	0.006	0.252
Hf		0.341	0.025	0.527	0.001	0.000	0.024	0.001	0.038	0.042	0.341	0.022	0.492	0.001	0.001	0.041	0.002	0.043
Dft		0.369	0.034	0.436	0.002	0.001	0.038	0.003	0.061	0.057	0.365	0.028	0.415	0.003	0.002	0.053	0.003	0.064
Mp2		0.623	0.024	0.267	0.001	0.000	0.011	0.002	0.046	0.026	0.602	0.024	0.256	0.002	0.001	0.018	0.002	0.058
Dun	-110	0.234	0.029	0.724	0.000	0.000	0.002	0.000	0.003	0.009	0.218	0.032	0.729	0.000	0.001	0.001	0.000	0.004
Ceder		0.245	0.028	0.116	0.088	0.016	0.123	0.034	0.257	0.093	0.210	0.024	0.098	0.108	0.019	0.136	0.028	0.282
Charm		0.473	0.019	0.317	0.001	0.001	0.035	0.002	0.115	0.037	0.434	0.016	0.288	0.001	0.001	0.058	0.003	0.138
Amber		0.272	0.018	0.194	0.022	0.009	0.163	0.006	0.244	0.074	0.229	0.013	0.158	0.031	0.008	0.183	0.007	0.275
Hf		0.327	0.026	0.530	0.001	0.000	0.022	0.001	0.042	0.050	0.320	0.022	0.496	0.001	0.001	0.040	0.002	0.048
Dft		0.382	0.037	0.414	0.002	0.001	0.035	0.003	0.064	0.062	0.380	0.033	0.385	0.003	0.002	0.050	0.004	0.068
Mp2		0.618	0.027	0.269	0.001	0.000	0.011	0.002	0.044	0.028	0.604	0.024	0.254	0.002	0.001	0.017	0.003	0.055
Dun	-120	0.152	0.034	0.792	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.018	0.134	0.031	0.799	0.000	0.001	0.001	0.000	0.007
Ceder		0.180	0.021	0.097	0.098	0.019	0.139	0.038	0.301	0.106	0.148	0.018	0.097	0.110	0.024	0.158	0.031	0.304
Charm		0.335	0.022	0.324	0.001	0.001	0.041	0.003	0.207	0.065	0.274	0.017	0.269	0.001	0.001	0.048	0.005	0.290
Amber		0.177	0.015	0.206	0.021	0.010	0.171	0.007	0.302	0.090	0.146	0.011	0.161	0.029	0.009	0.189	0.008	0.332
Hf		0.300	0.028	0.518	0.001	0.000	0.020	0.002	0.057	0.074	0.299	0.023	0.474	0.001	0.001	0.037	0.003	0.065
Dft		0.358	0.042	0.394	0.002	0.001	0.035	0.004	0.078	0.086	0.328	0.038	0.369	0.003	0.002	0.052	0.005	0.087
Mp2		0.562	0.035	0.297	0.001	0.000	0.011	0.003	0.053	0.037	0.534	0.031	0.286	0.002	0.001	0.018	0.004	0.069
Dun	-130	0.102	0.026	0.839	0.000	0.000	0.001	0.000	0.006	0.025	0.098	0.020	0.818	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013
Ceder		0.115	0.011	0.077	0.111	0.022	0.155	0.042	0.352	0.116	0.101	0.009	0.067	0.118	0.026	0.167	0.034	0.352
Charm		0.166	0.013	0.271	0.001	0.001	0.046	0.006	0.378	0.117	0.121	0.009	0.196	0.001	0.001	0.050	0.009	0.464
Amber		0.122	0.010	0.169	0.015	0.011	0.141	0.009	0.404	0.119	0.097	0.007	0.124	0.020	0.009	0.156	0.010	0.433
Hf		0.267	0.024	0.452	0.000	0.000	0.018	0.004	0.098	0.136	0.255	0.019	0.391	0.001	0.000	0.032	0.005	0.111
Dft		0.310	0.043	0.374	0.001	0.001	0.032	0.007	0.106	0.125	0.283	0.037	0.325	0.002	0.002	0.047	0.008	0.126
Mp2		0.510	0.039	0.295	0.001	0.000	0.010	0.005	0.079	0.061	0.484	0.033	0.265	0.002	0.001	0.017	0.006	0.102
Dun	-140	0.081	0.024	0.833	0.000	0.000	0.001	0.000	0.016	0.044	0.095	0.015	0.748	0.000	0.000	0.002	0.001	0.027

TT	130									140								
	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.095	0.200	0.033	0.086	0.117	0.022	0.170	0.015	0.255	0.104	0.155	0.025	0.071	0.129	0.043	0.212	0.007	0.255	0.103
0.029	0.394	0.012	0.201	0.004	0.002	0.116	0.002	0.200	0.070	0.217	0.006	0.127	0.007	0.007	0.194	0.002	0.317	0.123
0.087	0.206	0.010	0.105	0.041	0.009	0.239	0.005	0.272	0.113	0.119	0.005	0.053	0.053	0.018	0.351	0.003	0.281	0.118
0.057	0.312	0.018	0.409	0.003	0.003	0.103	0.001	0.057	0.094	0.208	0.009	0.249	0.007	0.011	0.291	0.001	0.084	0.139
0.069	0.322	0.026	0.337	0.005	0.006	0.111	0.003	0.081	0.108	0.237	0.017	0.232	0.009	0.014	0.232	0.002	0.106	0.150
0.038	0.559	0.028	0.220	0.004	0.003	0.045	0.003	0.077	0.062	0.469	0.022	0.163	0.010	0.011	0.130	0.002	0.100	0.093
0.014	0.229	0.027	0.697	0.000	0.002	0.009	0.000	0.007	0.029	0.215	0.022	0.607	0.000	0.005	0.068	0.002	0.015	0.066
0.094	0.178	0.020	0.085	0.118	0.027	0.187	0.015	0.269	0.102	0.146	0.015	0.067	0.132	0.050	0.235	0.007	0.244	0.102
0.060	0.329	0.011	0.164	0.003	0.002	0.119	0.004	0.261	0.107	0.171	0.006	0.104	0.005	0.006	0.173	0.003	0.395	0.137
0.096	0.163	0.009	0.107	0.042	0.010	0.249	0.005	0.292	0.123	0.089	0.004	0.052	0.052	0.019	0.356	0.003	0.301	0.123
0.070	0.279	0.017	0.410	0.003	0.003	0.101	0.002	0.065	0.119	0.172	0.010	0.220	0.009	0.012	0.294	0.002	0.101	0.181
0.076	0.325	0.027	0.331	0.005	0.006	0.104	0.004	0.079	0.120	0.217	0.018	0.221	0.010	0.015	0.221	0.002	0.118	0.179
0.041	0.556	0.019	0.227	0.005	0.004	0.046	0.003	0.075	0.066	0.422	0.014	0.169	0.013	0.015	0.145	0.003	0.107	0.110
0.026	0.156	0.026	0.745	0.000	0.003	0.015	0.000	0.009	0.046	0.166	0.022	0.616	0.000	0.005	0.092	0.000	0.013	0.085
0.110	0.125	0.015	0.079	0.124	0.032	0.197	0.016	0.292	0.120	0.100	0.010	0.057	0.141	0.059	0.247	0.008	0.266	0.114
0.095	0.187	0.011	0.176	0.002	0.002	0.114	0.006	0.361	0.140	0.078	0.005	0.072	0.004	0.005	0.182	0.004	0.487	0.163
0.115	0.103	0.007	0.104	0.039	0.010	0.239	0.006	0.347	0.145	0.055	0.003	0.048	0.048	0.019	0.328	0.004	0.353	0.142
0.098	0.261	0.017	0.368	0.003	0.003	0.093	0.002	0.085	0.169	0.150	0.009	0.185	0.008	0.011	0.245	0.002	0.133	0.258
0.116	0.281	0.030	0.312	0.005	0.006	0.097	0.005	0.104	0.160	0.189	0.019	0.202	0.010	0.015	0.188	0.003	0.147	0.228
0.056	0.472	0.027	0.254	0.005	0.004	0.049	0.004	0.093	0.092	0.348	0.018	0.171	0.014	0.017	0.142	0.003	0.135	0.151
0.050	0.103	0.018	0.744	0.000	0.001	0.017	0.000	0.013	0.103	0.093	0.017	0.581	0.002	0.004	0.118	0.000	0.019	0.166
0.126	0.089	0.008	0.053	0.131	0.037	0.203	0.019	0.329	0.132	0.068	0.005	0.040	0.154	0.058	0.250	0.008	0.294	0.124
0.149	0.070	0.005	0.103	0.002	0.001	0.078	0.008	0.530	0.204	0.027	0.002	0.038	0.003	0.003	0.114	0.005	0.622	0.187
0.144	0.064	0.004	0.075	0.027	0.010	0.194	0.007	0.442	0.178	0.032	0.002	0.032	0.034	0.013	0.249	0.004	0.453	0.179
0.186	0.194	0.012	0.262	0.002	0.002	0.075	0.004	0.144	0.303	0.090	0.005	0.105	0.005	0.006	0.167	0.003	0.203	0.415
0.170	0.214	0.026	0.234	0.004	0.004	0.085	0.007	0.149	0.276	0.120	0.013	0.135	0.007	0.011	0.138	0.004	0.212	0.359
0.091	0.423	0.025	0.214	0.004	0.003	0.038	0.006	0.138	0.148	0.270	0.015	0.126	0.011	0.012	0.102	0.005	0.208	0.251
0.113	0.088	0.012	0.636	0.000	0.000	0.012	0.001	0.031	0.221	0.062	0.010	0.433	0.003	0.004	0.107	0.001	0.053	0.327

150									160								
MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.122	0.015	0.048	0.146	0.090	0.257	0.003	0.223	0.097	0.069	0.007	0.023	0.164	0.161	0.332	0.001	0.172	0.071
0.076	0.001	0.038	0.010	0.020	0.399	0.001	0.350	0.104	0.023	0.000	0.006	0.021	0.053	0.566	0.000	0.259	0.070
0.050	0.002	0.018	0.062	0.037	0.497	0.001	0.248	0.086	0.015	0.000	0.004	0.068	0.093	0.615	0.000	0.155	0.051
0.065	0.003	0.071	0.014	0.028	0.620	0.000	0.078	0.121	0.011	0.000	0.011	0.017	0.053	0.805	0.000	0.039	0.063
0.132	0.008	0.115	0.016	0.040	0.398	0.001	0.123	0.167	0.050	0.003	0.040	0.023	0.083	0.574	0.000	0.099	0.127
0.258	0.008	0.075	0.030	0.038	0.329	0.001	0.141	0.120	0.081	0.002	0.020	0.057	0.101	0.548	0.000	0.108	0.083
0.091	0.012	0.293	0.001	0.017	0.467	0.006	0.018	0.095	0.015	0.000	0.051	0.001	0.022	0.874	0.000	0.006	0.031
0.102	0.010	0.043	0.157	0.095	0.275	0.002	0.220	0.095	0.057	0.004	0.020	0.181	0.172	0.332	0.001	0.165	0.068
0.056	0.002	0.030	0.009	0.015	0.360	0.001	0.427	0.099	0.015	0.000	0.008	0.015	0.052	0.478	0.000	0.351	0.080
0.036	0.001	0.017	0.060	0.039	0.494	0.001	0.262	0.090	0.010	0.000	0.004	0.065	0.095	0.607	0.000	0.165	0.053
0.056	0.003	0.064	0.015	0.029	0.592	0.001	0.090	0.150	0.009	0.000	0.009	0.019	0.053	0.781	0.000	0.048	0.081
0.104	0.008	0.108	0.019	0.039	0.399	0.001	0.135	0.186	0.042	0.003	0.035	0.027	0.075	0.573	0.000	0.104	0.142
0.176	0.007	0.079	0.040	0.046	0.360	0.001	0.150	0.142	0.047	0.002	0.019	0.069	0.111	0.555	0.000	0.108	0.090
0.064	0.005	0.234	0.001	0.024	0.564	0.001	0.019	0.088	0.003	0.000	0.025	0.001	0.043	0.898	0.000	0.006	0.022
0.074	0.006	0.038	0.160	0.112	0.295	0.003	0.210	0.103	0.037	0.003	0.017	0.194	0.190	0.323	0.001	0.162	0.073
0.023	0.001	0.021	0.006	0.015	0.292	0.002	0.505	0.134	0.006	0.000	0.006	0.010	0.045	0.419	0.001	0.430	0.085
0.023	0.001	0.015	0.055	0.039	0.457	0.001	0.307	0.103	0.007	0.000	0.003	0.062	0.083	0.579	0.000	0.202	0.064
0.042	0.002	0.046	0.015	0.026	0.511	0.001	0.129	0.228	0.006	0.000	0.007	0.019	0.043	0.708	0.000	0.076	0.140
0.087	0.008	0.090	0.017	0.036	0.343	0.002	0.165	0.252	0.028	0.003	0.027	0.025	0.064	0.509	0.001	0.134	0.208
0.147	0.007	0.067	0.039	0.044	0.328	0.002	0.181	0.186	0.033	0.002	0.015	0.071	0.097	0.520	0.000	0.138	0.124
0.041	0.001	0.205	0.006	0.018	0.571	0.001	0.028	0.129	0.005	0.000	0.018	0.004	0.046	0.894	0.000	0.008	0.024
0.050	0.003	0.024	0.166	0.108	0.274	0.003	0.256	0.116	0.024	0.001	0.011	0.177	0.181	0.324	0.001	0.200	0.081
0.008	0.001	0.010	0.004	0.009	0.183	0.002	0.626	0.158	0.002	0.000	0.002	0.005	0.027	0.304	0.001	0.545	0.114
0.013	0.001	0.009	0.042	0.031	0.342	0.002	0.423	0.139	0.004	0.000	0.002	0.051	0.066	0.476	0.000	0.307	0.094
0.023	0.001	0.023	0.011	0.015	0.314	0.001	0.215	0.397	0.003	0.000	0.004	0.015	0.024	0.488	0.000	0.156	0.309
0.050	0.006	0.058	0.012	0.022	0.234	0.002	0.232	0.384	0.014	0.002	0.017	0.017	0.041	0.359	0.001	0.215	0.334
0.094	0.005	0.045	0.025	0.029	0.222	0.002	0.276	0.302	0.019	0.001	0.010	0.049	0.058	0.380	0.001	0.245	0.235
0.023	0.001	0.150	0.008	0.010	0.453	0.001	0.070	0.284	0.007	0.000	0.019	0.009	0.033	0.819	0.001	0.026	0.086

Rotamer probabilities for leucine alpha helix region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclature

		-50								-40								
		MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP
Ceder		0.080	0.098	0.328	0.003	0.008	0.088	0.062	0.298	0.034	0.079	0.096	0.362	0.006	0.015	0.126	0.040	0.254
Charm		0.040	0.040	0.469	0.000	0.001	0.031	0.014	0.390	0.014	0.045	0.041	0.509	0.001	0.005	0.064	0.007	0.319
Amber		0.006	0.012	0.049	0.000	0.000	0.007	0.027	0.875	0.025	0.007	0.014	0.061	0.000	0.001	0.017	0.013	0.870
Hf		0.008	0.041	0.308	0.000	0.000	0.001	0.004	0.623	0.015	0.010	0.051	0.415	0.000	0.001	0.004	0.003	0.505
Dft		0.013	0.054	0.342	0.000	0.001	0.003	0.006	0.559	0.023	0.016	0.065	0.426	0.000	0.003	0.007	0.004	0.460
Mp2		0.008	0.028	0.145	0.000	0.001	0.004	0.017	0.766	0.030	0.011	0.037	0.226	0.000	0.007	0.017	0.011	0.663
Dun	-70	0.004	0.018	0.487	0.000	0.000	0.000	0.006	0.455	0.030	0.007	0.021	0.605	0.000	0.002	0.000	0.003	0.341
Ceder		0.080	0.092	0.324	0.003	0.010	0.100	0.055	0.303	0.033	0.074	0.096	0.356	0.007	0.018	0.134	0.036	0.258
Charm		0.045	0.042	0.464	0.000	0.001	0.037	0.012	0.385	0.012	0.052	0.045	0.477	0.001	0.006	0.078	0.006	0.327
Amber		0.005	0.011	0.042	0.000	0.000	0.008	0.025	0.883	0.024	0.007	0.013	0.054	0.000	0.001	0.023	0.012	0.873
Hf		0.007	0.040	0.290	0.000	0.000	0.001	0.004	0.640	0.017	0.010	0.050	0.413	0.000	0.001	0.004	0.003	0.507
Dft		0.013	0.055	0.335	0.000	0.001	0.003	0.007	0.561	0.025	0.016	0.065	0.444	0.000	0.003	0.008	0.005	0.442
Mp2		0.007	0.024	0.144	0.000	0.001	0.005	0.017	0.770	0.032	0.010	0.033	0.229	0.000	0.009	0.018	0.011	0.660
Dun	-60	0.004	0.015	0.458	0.000	0.000	0.000	0.007	0.474	0.042	0.006	0.020	0.570	0.000	0.001	0.000	0.005	0.372
Ceder		0.067	0.087	0.346	0.004	0.011	0.115	0.051	0.286	0.032	0.073	0.090	0.338	0.009	0.021	0.154	0.031	0.263
Charm		0.046	0.036	0.462	0.000	0.002	0.041	0.011	0.391	0.011	0.048	0.043	0.505	0.001	0.007	0.080	0.005	0.305
Amber		0.005	0.010	0.039	0.000	0.000	0.011	0.024	0.887	0.024	0.007	0.013	0.049	0.000	0.002	0.034	0.012	0.866
Hf		0.007	0.039	0.284	0.000	0.000	0.001	0.005	0.645	0.019	0.010	0.047	0.434	0.000	0.002	0.005	0.003	0.488
Dft		0.012	0.052	0.347	0.000	0.001	0.004	0.007	0.550	0.026	0.016	0.063	0.462	0.000	0.003	0.008	0.005	0.424
Mp2		0.006	0.021	0.149	0.000	0.001	0.005	0.016	0.769	0.032	0.009	0.030	0.248	0.000	0.011	0.019	0.009	0.644
Dun	-50	0.005	0.013	0.378	0.000	0.000	0.000	0.007	0.533	0.064	0.004	0.019	0.478	0.000	0.001	0.001	0.007	0.446
Ceder		0.066	0.082	0.333	0.005	0.015	0.137	0.045	0.288	0.030	0.071	0.087	0.327	0.014	0.032	0.198	0.023	0.231
Charm		0.051	0.041	0.438	0.000	0.001	0.042	0.009	0.413	0.006	0.067	0.051	0.621	0.001	0.001	0.037	0.002	0.218
Amber		0.005	0.010	0.037	0.000	0.000	0.016	0.023	0.885	0.023	0.006	0.012	0.047	0.000	0.002	0.050	0.010	0.854
Hf		0.007	0.036	0.291	0.000	0.000	0.002	0.005	0.640	0.020	0.009	0.043	0.448	0.000	0.002	0.005	0.003	0.477
Dft		0.012	0.048	0.355	0.000	0.001	0.004	0.007	0.545	0.028	0.014	0.059	0.449	0.000	0.004	0.009	0.004	0.443
Mp2		0.006	0.019	0.153	0.000	0.002	0.005	0.015	0.770	0.031	0.009	0.029	0.268	0.000	0.012	0.023	0.008	0.622
Dun	-40	0.011	0.004	0.170	0.000	0.000	0.000	0.014	0.718	0.083	0.002	0.007	0.308	0.000	0.018	0.002	0.016	0.604

TT	-30									-20								
	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.023	0.084	0.093	0.375	0.015	0.039	0.159	0.020	0.201	0.013	0.080	0.088	0.386	0.033	0.085	0.162	0.007	0.153	0.006
0.009	0.050	0.043	0.553	0.002	0.014	0.106	0.002	0.225	0.004	0.052	0.045	0.606	0.005	0.026	0.133	0.001	0.132	0.001
0.018	0.009	0.018	0.086	0.001	0.004	0.052	0.004	0.813	0.012	0.013	0.023	0.119	0.004	0.008	0.141	0.001	0.685	0.006
0.012	0.013	0.058	0.580	0.000	0.004	0.010	0.001	0.326	0.007	0.013	0.057	0.697	0.000	0.009	0.022	0.000	0.198	0.002
0.018	0.019	0.077	0.547	0.000	0.007	0.015	0.002	0.322	0.010	0.022	0.087	0.624	0.000	0.015	0.028	0.001	0.220	0.004
0.028	0.015	0.050	0.363	0.001	0.028	0.059	0.004	0.466	0.015	0.019	0.058	0.507	0.003	0.044	0.135	0.001	0.230	0.005
0.020	0.011	0.032	0.753	0.000	0.005	0.001	0.001	0.188	0.009	0.009	0.049	0.867	0.001	0.006	0.003	0.001	0.063	0.002
0.021	0.082	0.087	0.366	0.018	0.046	0.169	0.017	0.202	0.013	0.082	0.090	0.351	0.038	0.098	0.186	0.007	0.144	0.005
0.008	0.055	0.044	0.541	0.003	0.016	0.117	0.002	0.219	0.003	0.058	0.045	0.584	0.006	0.030	0.159	0.000	0.118	0.001
0.018	0.009	0.017	0.074	0.001	0.005	0.069	0.004	0.809	0.012	0.012	0.021	0.101	0.005	0.011	0.182	0.001	0.661	0.005
0.013	0.012	0.055	0.585	0.000	0.005	0.012	0.001	0.323	0.007	0.013	0.052	0.709	0.000	0.009	0.026	0.000	0.188	0.002
0.018	0.019	0.076	0.557	0.000	0.008	0.016	0.002	0.313	0.010	0.021	0.086	0.631	0.000	0.015	0.030	0.001	0.212	0.004
0.029	0.014	0.045	0.378	0.001	0.034	0.069	0.004	0.441	0.015	0.018	0.051	0.517	0.003	0.051	0.150	0.001	0.205	0.004
0.026	0.008	0.033	0.724	0.000	0.005	0.001	0.001	0.217	0.010	0.008	0.055	0.814	0.002	0.009	0.004	0.002	0.101	0.006
0.021	0.078	0.085	0.346	0.022	0.056	0.190	0.013	0.198	0.011	0.069	0.078	0.334	0.054	0.137	0.191	0.005	0.128	0.004
0.007	0.057	0.043	0.554	0.003	0.018	0.124	0.001	0.197	0.003	0.064	0.043	0.576	0.006	0.036	0.173	0.000	0.100	0.001
0.019	0.008	0.016	0.066	0.002	0.006	0.096	0.003	0.792	0.011	0.010	0.019	0.091	0.007	0.016	0.244	0.001	0.607	0.005
0.013	0.011	0.049	0.594	0.000	0.006	0.014	0.001	0.318	0.006	0.011	0.047	0.720	0.000	0.012	0.035	0.000	0.173	0.002
0.019	0.018	0.073	0.551	0.000	0.009	0.018	0.002	0.321	0.009	0.019	0.079	0.643	0.000	0.018	0.039	0.001	0.198	0.003
0.029	0.014	0.043	0.412	0.001	0.038	0.080	0.003	0.394	0.014	0.015	0.045	0.517	0.002	0.060	0.176	0.001	0.181	0.003
0.044	0.004	0.033	0.638	0.000	0.008	0.003	0.003	0.289	0.021	0.003	0.034	0.725	0.000	0.025	0.003	0.001	0.186	0.024
0.017	0.071	0.083	0.329	0.034	0.083	0.206	0.012	0.172	0.009	0.067	0.078	0.317	0.059	0.147	0.209	0.004	0.115	0.004
0.002	0.060	0.039	0.556	0.003	0.020	0.131	0.001	0.187	0.002	0.061	0.039	0.600	0.006	0.040	0.179	0.000	0.075	0.000
0.018	0.008	0.014	0.060	0.003	0.008	0.140	0.003	0.756	0.009	0.010	0.017	0.081	0.011	0.026	0.347	0.001	0.505	0.004
0.013	0.010	0.044	0.595	0.000	0.008	0.020	0.001	0.317	0.005	0.010	0.043	0.713	0.000	0.018	0.055	0.000	0.159	0.001
0.019	0.015	0.064	0.556	0.000	0.011	0.024	0.001	0.320	0.008	0.013	0.062	0.665	0.001	0.024	0.058	0.000	0.174	0.002
0.028	0.013	0.040	0.440	0.001	0.046	0.104	0.003	0.340	0.013	0.011	0.035	0.484	0.003	0.077	0.244	0.000	0.143	0.002
0.043	0.003	0.015	0.487	0.000	0.062	0.007	0.002	0.408	0.015	0.009	0.040	0.686	0.001	0.021	0.010	0.003	0.212	0.019

Rotamer probabilities for leucine beta strand region by phi (vertical) and psi (horizontal) see methods for rotamer nomenclature

		110								120								
		MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP
Ceder		0.059	0.055	0.458	0.002	0.005	0.045	0.064	0.248	0.064	0.055	0.051	0.450	0.003	0.007	0.060	0.063	0.263
Charm		0.018	0.012	0.453	0.000	0.000	0.001	0.030	0.463	0.022	0.017	0.011	0.445	0.000	0.000	0.002	0.031	0.474
Amber		0.009	0.010	0.163	0.000	0.000	0.005	0.050	0.721	0.043	0.009	0.010	0.187	0.000	0.000	0.009	0.044	0.712
Hf		0.007	0.018	0.516	0.000	0.000	0.001	0.010	0.418	0.031	0.008	0.022	0.605	0.000	0.000	0.001	0.006	0.341
Dft		0.012	0.020	0.548	0.000	0.001	0.003	0.017	0.340	0.059	0.014	0.023	0.646	0.000	0.001	0.004	0.010	0.274
Mp2		0.018	0.020	0.574	0.000	0.000	0.002	0.025	0.309	0.051	0.020	0.023	0.652	0.000	0.001	0.002	0.014	0.264
Dun	-110	0.008	0.040	0.395	0.000	0.000	0.000	0.006	0.500	0.051	0.006	0.037	0.387	0.000	0.000	0.000	0.008	0.521
Ceder		0.052	0.034	0.484	0.002	0.005	0.044	0.065	0.262	0.052	0.052	0.035	0.484	0.003	0.007	0.059	0.061	0.249
Charm		0.016	0.010	0.419	0.000	0.000	0.001	0.035	0.496	0.024	0.014	0.009	0.387	0.000	0.000	0.002	0.034	0.532
Amber		0.007	0.006	0.175	0.000	0.000	0.005	0.052	0.713	0.043	0.007	0.006	0.204	0.000	0.000	0.009	0.046	0.699
Hf		0.007	0.014	0.519	0.000	0.000	0.001	0.011	0.417	0.032	0.009	0.017	0.608	0.000	0.000	0.001	0.006	0.340
Dft		0.011	0.018	0.583	0.000	0.001	0.003	0.016	0.314	0.055	0.013	0.022	0.666	0.000	0.002	0.004	0.009	0.257
Mp2		0.016	0.019	0.630	0.000	0.000	0.001	0.022	0.264	0.046	0.019	0.022	0.696	0.000	0.001	0.002	0.012	0.226
Dun	-120	0.001	0.030	0.371	0.000	0.000	0.000	0.005	0.538	0.055	0.006	0.029	0.360	0.000	0.000	0.000	0.003	0.552
Ceder		0.032	0.018	0.508	0.003	0.007	0.062	0.069	0.235	0.067	0.031	0.017	0.498	0.003	0.008	0.077	0.064	0.252
Charm		0.007	0.006	0.325	0.000	0.000	0.001	0.041	0.592	0.027	0.006	0.006	0.304	0.000	0.000	0.002	0.042	0.616
Amber		0.003	0.002	0.149	0.000	0.000	0.005	0.056	0.739	0.046	0.003	0.003	0.174	0.000	0.000	0.009	0.050	0.730
Hf		0.006	0.011	0.477	0.000	0.000	0.001	0.012	0.456	0.038	0.007	0.012	0.565	0.000	0.001	0.001	0.007	0.383
Dft		0.010	0.017	0.564	0.000	0.001	0.003	0.017	0.329	0.060	0.012	0.018	0.654	0.000	0.002	0.004	0.011	0.266
Mp2		0.020	0.013	0.591	0.000	0.000	0.002	0.026	0.292	0.057	0.024	0.014	0.661	0.000	0.001	0.003	0.015	0.256
Dun	-130	0.001	0.014	0.267	0.000	0.000	0.000	0.007	0.624	0.086	0.003	0.024	0.278	0.000	0.000	0.000	0.004	0.613
Ceder		0.013	0.011	0.437	0.003	0.009	0.081	0.085	0.289	0.074	0.013	0.010	0.408	0.004	0.012	0.103	0.073	0.311
Charm		0.002	0.003	0.220	0.000	0.000	0.001	0.050	0.691	0.032	0.002	0.003	0.207	0.000	0.000	0.003	0.052	0.707
Amber		0.001	0.001	0.115	0.000	0.000	0.005	0.060	0.771	0.047	0.001	0.001	0.137	0.000	0.000	0.010	0.054	0.765
Hf		0.003	0.008	0.339	0.000	0.000	0.001	0.017	0.579	0.053	0.004	0.010	0.421	0.000	0.001	0.002	0.010	0.517
Dft		0.007	0.015	0.485	0.000	0.001	0.004	0.022	0.391	0.076	0.009	0.016	0.556	0.000	0.003	0.006	0.015	0.350
Mp2		0.012	0.013	0.520	0.000	0.001	0.002	0.033	0.345	0.074	0.015	0.014	0.588	0.000	0.002	0.004	0.020	0.319
Dun	-140	0.001	0.013	0.115	0.000	0.000	0.000	0.023	0.766	0.083	0.001	0.012	0.146	0.000	0.000	0.000	0.021	0.735

TT	130									140								
	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.049	0.061	0.058	0.435	0.004	0.010	0.081	0.058	0.260	0.033	0.063	0.059	0.465	0.007	0.016	0.100	0.034	0.234	0.021
0.020	0.018	0.012	0.445	0.000	0.001	0.005	0.024	0.481	0.015	0.020	0.013	0.513	0.000	0.003	0.008	0.012	0.420	0.010
0.028	0.011	0.012	0.243	0.000	0.001	0.018	0.026	0.670	0.019	0.014	0.015	0.329	0.001	0.005	0.037	0.011	0.575	0.015
0.017	0.010	0.028	0.720	0.000	0.001	0.002	0.002	0.227	0.010	0.012	0.031	0.829	0.000	0.003	0.003	0.001	0.117	0.005
0.028	0.016	0.032	0.716	0.000	0.003	0.006	0.004	0.208	0.014	0.016	0.035	0.799	0.000	0.006	0.008	0.001	0.126	0.008
0.024	0.021	0.027	0.733	0.000	0.001	0.004	0.005	0.195	0.013	0.019	0.031	0.821	0.000	0.004	0.006	0.001	0.110	0.008
0.041	0.010	0.054	0.518	0.000	0.000	0.000	0.007	0.377	0.034	0.011	0.078	0.739	0.000	0.000	0.000	0.002	0.143	0.028
0.048	0.050	0.031	0.498	0.004	0.010	0.083	0.052	0.242	0.029	0.046	0.031	0.535	0.007	0.016	0.098	0.032	0.213	0.020
0.021	0.013	0.009	0.401	0.000	0.001	0.004	0.027	0.527	0.016	0.015	0.012	0.472	0.000	0.003	0.009	0.015	0.462	0.012
0.028	0.009	0.007	0.255	0.000	0.002	0.018	0.027	0.662	0.020	0.010	0.008	0.340	0.001	0.006	0.037	0.012	0.571	0.016
0.019	0.011	0.020	0.723	0.000	0.001	0.002	0.002	0.230	0.011	0.012	0.021	0.837	0.000	0.003	0.004	0.001	0.117	0.006
0.027	0.015	0.026	0.746	0.000	0.003	0.005	0.004	0.186	0.015	0.017	0.027	0.815	0.000	0.007	0.007	0.001	0.116	0.008
0.022	0.024	0.025	0.760	0.000	0.002	0.004	0.005	0.168	0.013	0.026	0.024	0.828	0.000	0.005	0.007	0.001	0.101	0.008
0.051	0.007	0.054	0.472	0.000	0.000	0.000	0.004	0.413	0.050	0.010	0.084	0.691	0.000	0.000	0.002	0.002	0.182	0.030
0.049	0.030	0.016	0.479	0.006	0.013	0.094	0.053	0.279	0.031	0.030	0.016	0.502	0.009	0.020	0.109	0.034	0.259	0.020
0.024	0.006	0.006	0.317	0.000	0.001	0.005	0.036	0.607	0.020	0.007	0.007	0.368	0.000	0.004	0.011	0.020	0.569	0.014
0.030	0.004	0.003	0.219	0.000	0.002	0.018	0.030	0.702	0.021	0.004	0.004	0.293	0.001	0.006	0.038	0.013	0.623	0.017
0.024	0.009	0.015	0.683	0.000	0.002	0.003	0.003	0.271	0.014	0.010	0.017	0.804	0.000	0.005	0.006	0.001	0.149	0.008
0.033	0.015	0.018	0.740	0.000	0.005	0.006	0.004	0.196	0.017	0.017	0.021	0.801	0.000	0.010	0.010	0.002	0.130	0.010
0.027	0.028	0.014	0.734	0.000	0.003	0.005	0.006	0.193	0.016	0.032	0.015	0.805	0.001	0.007	0.010	0.002	0.118	0.010
0.077	0.003	0.046	0.401	0.000	0.000	0.002	0.005	0.465	0.078	0.006	0.061	0.636	0.000	0.009	0.011	0.005	0.224	0.048
0.065	0.012	0.010	0.397	0.007	0.017	0.124	0.063	0.331	0.039	0.011	0.010	0.420	0.012	0.030	0.145	0.040	0.308	0.024
0.027	0.002	0.003	0.210	0.000	0.002	0.006	0.044	0.709	0.024	0.003	0.003	0.247	0.000	0.006	0.013	0.024	0.686	0.018
0.032	0.001	0.002	0.169	0.000	0.002	0.019	0.032	0.754	0.021	0.001	0.002	0.231	0.001	0.006	0.037	0.014	0.690	0.018
0.035	0.005	0.012	0.557	0.000	0.003	0.005	0.004	0.392	0.022	0.005	0.014	0.709	0.000	0.010	0.011	0.001	0.235	0.013
0.045	0.011	0.018	0.636	0.000	0.008	0.009	0.007	0.285	0.026	0.012	0.021	0.709	0.001	0.018	0.016	0.003	0.202	0.017
0.038	0.018	0.015	0.660	0.000	0.005	0.008	0.009	0.259	0.025	0.020	0.017	0.737	0.001	0.014	0.017	0.003	0.175	0.016
0.084	0.001	0.019	0.242	0.000	0.002	0.007	0.018	0.612	0.099	0.005	0.028	0.478	0.000	0.024	0.019	0.010	0.363	0.072

150									160								
MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT	MM	MP	MT	PM	PP	PT	TM	TP	TT
0.073	0.062	0.488	0.013	0.032	0.113	0.014	0.194	0.010	0.073	0.056	0.520	0.023	0.056	0.128	0.004	0.136	0.003
0.023	0.015	0.596	0.001	0.008	0.014	0.004	0.336	0.004	0.021	0.016	0.699	0.001	0.022	0.026	0.001	0.213	0.001
0.017	0.018	0.455	0.003	0.012	0.072	0.003	0.412	0.008	0.018	0.019	0.560	0.007	0.031	0.115	0.000	0.247	0.002
0.013	0.032	0.886	0.000	0.006	0.005	0.000	0.056	0.002	0.012	0.028	0.913	0.000	0.012	0.009	0.000	0.024	0.000
0.017	0.038	0.839	0.001	0.012	0.011	0.000	0.080	0.003	0.018	0.039	0.860	0.001	0.024	0.014	0.000	0.043	0.001
0.021	0.033	0.873	0.001	0.009	0.013	0.000	0.049	0.002	0.021	0.030	0.881	0.001	0.020	0.022	0.000	0.023	0.000
0.012	0.079	0.867	0.000	0.000	0.000	0.000	0.031	0.010	0.010	0.070	0.906	0.000	0.004	0.001	0.000	0.008	0.000
0.050	0.031	0.536	0.014	0.033	0.116	0.013	0.198	0.009	0.051	0.032	0.572	0.023	0.057	0.127	0.004	0.130	0.003
0.017	0.013	0.563	0.001	0.009	0.017	0.005	0.370	0.005	0.018	0.013	0.664	0.002	0.025	0.026	0.002	0.250	0.001
0.013	0.010	0.459	0.003	0.014	0.072	0.003	0.417	0.009	0.013	0.010	0.552	0.008	0.038	0.114	0.000	0.262	0.003
0.012	0.019	0.897	0.000	0.007	0.007	0.000	0.056	0.002	0.011	0.016	0.920	0.000	0.016	0.011	0.000	0.026	0.000
0.018	0.027	0.853	0.001	0.014	0.011	0.000	0.073	0.003	0.019	0.025	0.870	0.001	0.029	0.016	0.000	0.041	0.001
0.030	0.025	0.868	0.001	0.011	0.014	0.000	0.048	0.002	0.031	0.021	0.865	0.002	0.028	0.027	0.000	0.025	0.000
0.017	0.084	0.852	0.000	0.007	0.003	0.000	0.033	0.005	0.018	0.075	0.866	0.000	0.027	0.003	0.000	0.011	0.000
0.033	0.017	0.523	0.016	0.040	0.134	0.014	0.212	0.011	0.031	0.016	0.553	0.030	0.071	0.145	0.004	0.146	0.003
0.008	0.009	0.453	0.001	0.013	0.019	0.007	0.483	0.006	0.009	0.011	0.547	0.002	0.036	0.033	0.003	0.357	0.002
0.005	0.006	0.407	0.004	0.017	0.076	0.003	0.473	0.010	0.005	0.006	0.494	0.009	0.047	0.125	0.001	0.310	0.003
0.010	0.018	0.869	0.000	0.012	0.011	0.000	0.078	0.002	0.009	0.017	0.883	0.001	0.032	0.020	0.000	0.039	0.000
0.018	0.023	0.824	0.001	0.022	0.014	0.000	0.094	0.004	0.017	0.023	0.844	0.001	0.039	0.020	0.000	0.055	0.001
0.033	0.016	0.852	0.002	0.018	0.019	0.000	0.058	0.003	0.028	0.016	0.843	0.003	0.042	0.037	0.000	0.030	0.001
0.016	0.055	0.814	0.000	0.035	0.021	0.000	0.047	0.011	0.020	0.061	0.802	0.001	0.072	0.031	0.000	0.012	0.001
0.011	0.010	0.459	0.023	0.054	0.166	0.017	0.248	0.012	0.010	0.010	0.483	0.040	0.094	0.186	0.005	0.168	0.004
0.003	0.004	0.333	0.001	0.016	0.024	0.009	0.601	0.008	0.003	0.005	0.430	0.002	0.044	0.042	0.004	0.467	0.003
0.001	0.003	0.326	0.004	0.018	0.080	0.004	0.553	0.011	0.001	0.003	0.400	0.010	0.056	0.141	0.001	0.385	0.003
0.005	0.015	0.790	0.001	0.024	0.022	0.000	0.139	0.004	0.004	0.015	0.800	0.001	0.060	0.039	0.000	0.081	0.001
0.012	0.022	0.735	0.002	0.041	0.027	0.001	0.154	0.007	0.010	0.023	0.744	0.002	0.078	0.041	0.000	0.099	0.002
0.019	0.018	0.784	0.004	0.037	0.035	0.001	0.097	0.006	0.014	0.017	0.739	0.006	0.091	0.074	0.000	0.057	0.001
0.009	0.032	0.676	0.001	0.102	0.049	0.001	0.108	0.021	0.008	0.058	0.612	0.002	0.206	0.087	0.000	0.026	0.001