

Supplementary material for:

**Probing the urea dependence of residual structure in  
denatured human  $\alpha$ -lactalbumin**

Victoria A. Higman<sup>a</sup>, Heike I. Rösner<sup>b</sup>, Raffaella Ugolini<sup>a</sup>, Lesley H. Greene<sup>a</sup>,

Christina Redfield<sup>\*b</sup> and Lorna J. Smith<sup>\*a</sup>

<sup>a</sup>Department of Chemistry, Inorganic Chemistry Laboratory

and

<sup>b</sup>Department of Biochemistry,

University of Oxford, South Parks Road, Oxford, U.K.

## 4 M urea 15N Relaxation Data

Residue	NOE	NOE error	R1	R1 error	R2	R2 error	J(0)	J(0) error	J(N)	J(N) error	J(0.87H)	J(0.87H) error
1	-0.62	0.06	1.27	0.04	2.38	0.06	0.47	0.02	0.19	0.01	0.032	0.002
2	-0.35	0.08	1.48	0.06	4.10	0.14	0.93	0.04	0.23	0.01	0.031	0.002
3	0.00	0.12	1.42	0.10	4.02	0.27	0.92	0.08	0.23	0.02	0.022	0.003
5			0.99	0.42	7.56	1.20						
6			1.75	0.15	9.87	0.91						
7			1.20	0.18	5.64	0.73						
8			1.56	0.12								
9	0.43	0.15	1.60	0.13	11.25	0.81	2.96	0.23	0.28	0.02	0.014	0.004
13			1.77	0.26	6.47	1.52						
14	0.50	0.20	1.45	0.19	8.59	0.96	2.19	0.27	0.26	0.04	0.011	0.005
17	0.00	0.21	1.82	0.17	8.20	0.87	2.04	0.26	0.30	0.03	0.029	0.007
19	0.00	0.12	1.58	0.11	6.74	0.36	1.65	0.11	0.26	0.02	0.025	0.003
20	0.00	0.12	1.56	0.07	5.99	0.21	1.46	0.06	0.26	0.01	0.025	0.003
21	0.00	0.17	1.38	0.10	6.09	0.32	1.51	0.10	0.23	0.02	0.022	0.004
22	0.00	0.16	1.23	0.15	9.33	0.99	2.45	0.29	0.20	0.03	0.019	0.004
23			1.56	0.18	9.57	1.07						
26			1.74	0.17	7.20	0.61						
29	0.00	0.22	1.89	0.25	10.08	1.39	2.57	0.52	0.31	0.05	0.030	0.008
33	0.26	0.11	1.51	0.08	6.48	0.32	1.60	0.09	0.26	0.02	0.018	0.003
34	0.00	0.07	1.69	0.07	5.12	0.15	1.18	0.05	0.28	0.01	0.026	0.002
35	0.00	0.06	1.68	0.06	4.30	0.11	0.95	0.03	0.28	0.01	0.026	0.002
37	0.17	0.05	1.67	0.06	4.88	0.13	1.13	0.04	0.28	0.01	0.022	0.002
38	0.13	0.04	1.60	0.04	5.07	0.09	1.19	0.02	0.27	0.01	0.022	0.001
39	0.21	0.05	1.65	0.04	5.20	0.11	1.22	0.03	0.28	0.01	0.020	0.001
40	0.00	0.07	1.61	0.05	4.91	0.12	1.14	0.03	0.27	0.01	0.025	0.002
41	0.00	0.07	1.58	0.05	5.56	0.16	1.33	0.05	0.26	0.01	0.025	0.002
42	0.00	0.11	1.68	0.10	5.89	0.25	1.41	0.07	0.27	0.02	0.026	0.003
43	0.00	0.07	1.58	0.07	5.38	0.17	1.27	0.05	0.26	0.01	0.025	0.002
45	0.13	0.06	1.65	0.05	4.38	0.09	0.99	0.03	0.28	0.01	0.022	0.002
46	0.10	0.04	1.68	0.03	5.12	0.09	1.19	0.02	0.28	0.01	0.024	0.001
47	0.16	0.05	1.70	0.04	4.98	0.07	1.15	0.02	0.29	0.01	0.022	0.001
48	0.23	0.05	1.83	0.04	5.17	0.09	1.19	0.03	0.31	0.01	0.022	0.001
50	0.30	0.06	1.75	0.05	5.30	0.13	1.24	0.04	0.30	0.01	0.019	0.002
51	0.19	0.06	1.74	0.06	5.32	0.12	1.24	0.03	0.29	0.01	0.022	0.002

52	0.22	0.04	1.77	0.04	5.13	0.08	1.18	0.02	0.30	0.01	0.022	0.001
53	0.00	0.07	1.70	0.07	5.79	0.20	1.38	0.06	0.28	0.01	0.026	0.002
54	0.00	0.05	1.73	0.05	5.37	0.14	1.25	0.04	0.28	0.01	0.027	0.002
56	0.00	0.05	1.63	0.04	5.08	0.10	1.19	0.03	0.27	0.01	0.025	0.001
57	0.00	0.05	1.63	0.04	4.62	0.10	1.05	0.02	0.27	0.01	0.025	0.001
58	0.14	0.05	1.75	0.04	5.07	0.11	1.17	0.03	0.29	0.01	0.023	0.001
59	0.21	0.06	1.84	0.06	4.99	0.12	1.13	0.04	0.31	0.01	0.023	0.002
60	0.19	0.06	1.75	0.04	5.74	0.11	1.36	0.03	0.30	0.01	0.022	0.002
61	0.16	0.05	1.78	0.05	3.94	0.08	0.84	0.02	0.30	0.01	0.023	0.001
62	0.00	0.04	1.64	0.04	3.70	0.07	0.79	0.02	0.27	0.01	0.026	0.001
63	0.00	0.05	1.66	0.04	3.46	0.06	0.72	0.02	0.27	0.01	0.026	0.001
64	0.00	0.04	1.66	0.04	3.66	0.06	0.78	0.02	0.27	0.01	0.026	0.001
65	-0.18	0.04	1.62	0.03	3.46	0.05	0.72	0.02	0.26	0.01	0.030	0.001
66	0.00	0.05	1.60	0.04	3.86	0.08	0.85	0.02	0.26	0.01	0.025	0.001
68	-0.10	0.04	1.64	0.04	3.17	0.06	0.64	0.02	0.27	0.01	0.028	0.001
69	0.14	0.05	1.60	0.04	3.61	0.07	0.78	0.02	0.27	0.01	0.021	0.001
70	0.16	0.05	1.68	0.04	3.41	0.07	0.71	0.02	0.28	0.01	0.022	0.001
72	0.12	0.03	1.62	0.03	4.20	0.06	0.94	0.02	0.27	0.00	0.022	0.001
73	0.00	0.04	1.67	0.04	3.89	0.06	0.84	0.02	0.28	0.01	0.026	0.001
74	0.00	0.05	1.60	0.04	3.95	0.07	0.87	0.02	0.26	0.01	0.025	0.001
77	0.13	0.04	1.68	0.04	3.90	0.06	0.85	0.02	0.28	0.01	0.023	0.001
78	0.17	0.05	1.70	0.04	4.26	0.08	0.95	0.02	0.29	0.01	0.022	0.001
79	0.16	0.04	1.71	0.04	4.47	0.07	1.00	0.02	0.29	0.01	0.023	0.001
80	0.23	0.07	1.75	0.05	5.13	0.13	1.19	0.04	0.30	0.01	0.021	0.002
81	0.23	0.08	1.75	0.07	5.65	0.15	1.33	0.05	0.30	0.01	0.021	0.002
84	0.09	0.03	1.64	0.04	5.25	0.11	1.23	0.03	0.27	0.01	0.023	0.001
86	0.00	0.07	1.67	0.07	6.48	0.18	1.57	0.05	0.27	0.01	0.026	0.002
87	0.00	0.08	1.64	0.06	5.71	0.15	1.36	0.05	0.27	0.01	0.026	0.002
88	0.18	0.07	1.57	0.05	5.37	0.14	1.28	0.04	0.27	0.01	0.020	0.002
91	0.00	0.22	1.58	0.16	10.88	0.89	2.81	0.27	0.26	0.03	0.025	0.006
92			1.32	0.12	9.73	1.33						
98			1.45	0.24	8.53	1.79						
100	0.51	0.21	1.39	0.14	10.10	1.28	2.65	0.38	0.25	0.03	0.011	0.005
102	0.00	0.16	1.51	0.18	13.95	1.81	3.70	0.57	0.25	0.04	0.024	0.005
103	0.29	0.07	1.85	0.07	7.46	0.22	1.83	0.06	0.32	0.01	0.021	0.002
104	0.30	0.11	1.84	0.13	9.71	0.53	2.47	0.16	0.32	0.02	0.020	0.004

108	0.21	0.09	1.48	0.06	6.70	0.27	1.68	0.08	0.25	0.01	0.018	0.002
109	0.00	0.14	1.79	0.18	8.02	0.70	1.99	0.21	0.30	0.03	0.028	0.005
110	0.00	0.10	1.45	0.10	7.85	0.41	1.99	0.12	0.24	0.02	0.023	0.003
111	0.00	0.22	1.51	0.22	10.81	2.23	2.86	0.80	0.25	0.04	0.024	0.007
112	0.00	0.08	1.45	0.06	6.20	0.21	1.53	0.05	0.24	0.01	0.023	0.002
114			1.47	0.14	7.29	0.67						
117			1.88	0.19	6.30	1.41						
118	0.24	0.05	1.69	0.04	6.51	0.12	1.58	0.04	0.29	0.01	0.020	0.001
120			1.99	0.20	15.81	1.81						
121			1.20	0.28								
123	0.00	0.23	1.09	0.15	6.82	0.97	1.79	0.33	0.18	0.03	0.018	0.005

## 6 M urea 15N Relaxation Data

Residue	NOE	NOE error	R1	R1 error	R2	R2 error	J(0)	J(0) error	J(N)	J(N) error	J(0.87H)	J(0.87H) error
1	-0.50	0.02	1.08	0.01	1.48	0.01	0.25	0.00	0.16	0.00	0.025	0.000
2	-0.34	0.02	1.37	0.02	2.29	0.03	0.43	0.01	0.21	0.00	0.029	0.001
3	-0.19	0.02	1.45	0.02	2.96	0.04	0.61	0.01	0.23	0.00	0.027	0.001
4	0.16	0.03	1.58	0.03	5.55	0.11	1.33	0.03	0.27	0.00	0.021	0.001
5	0.15	0.03	1.63	0.03	4.32	0.08	0.98	0.02	0.27	0.01	0.022	0.001
6	0.15	0.03	1.62	0.03	6.02	0.11	1.45	0.03	0.27	0.00	0.021	0.001
7	0.16	0.03	1.59	0.03	4.63	0.10	1.07	0.03	0.27	0.01	0.021	0.001
8	0.25	0.03	1.69	0.03	6.33	0.15	1.53	0.05	0.29	0.01	0.020	0.001
9	0.23	0.02	1.59	0.02	6.00	0.09	1.45	0.02	0.27	0.00	0.019	0.001
10			1.60	0.04								
11	0.23	0.03	1.63	0.02	5.35	0.08	1.27	0.02	0.28	0.00	0.020	0.001
12	0.23	0.04	1.54	0.04	8.24	0.22	2.11	0.06	0.26	0.01	0.018	0.001
16	0.21	0.03	1.77	0.04	5.98	0.13	1.42	0.04	0.30	0.01	0.022	0.001
17	0.16	0.02	1.53	0.02	4.02	0.06	0.90	0.01	0.26	0.00	0.020	0.001
19	0.00	0.02	1.50	0.02	3.43	0.05	0.74	0.01	0.25	0.00	0.023	0.001
20	0.10	0.02	1.51	0.02	2.96	0.03	0.61	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
21	0.08	0.03	1.52	0.02	3.68	0.05	0.81	0.02	0.25	0.00	0.022	0.001
22	0.05	0.02	1.47	0.02	4.15	0.07	0.95	0.02	0.24	0.00	0.022	0.001
23	0.09	0.03	1.41	0.02	4.70	0.09	1.11	0.03	0.23	0.00	0.020	0.001
26	0.21	0.03	1.51	0.03	5.24	0.13	1.25	0.04	0.26	0.01	0.019	0.001
28			1.47	0.06								
29	0.11	0.03	1.49	0.03	5.49	0.13	1.33	0.03	0.25	0.00	0.021	0.001
31	0.19	0.04	1.47	0.04	7.93	0.25	2.02	0.07	0.25	0.01	0.019	0.001
33	0.12	0.02	1.49	0.02	3.70	0.06	0.82	0.02	0.25	0.00	0.020	0.001
34	0.09	0.02	1.52	0.02	3.39	0.04	0.72	0.01	0.25	0.00	0.022	0.001
35	0.00	0.02	1.47	0.02	2.88	0.03	0.59	0.01	0.24	0.00	0.023	0.000
37	0.15	0.02	1.62	0.02	3.34	0.04	0.70	0.01	0.27	0.00	0.021	0.001
38	0.10	0.02	1.57	0.02	3.41	0.04	0.72	0.01	0.26	0.00	0.022	0.000
39	0.15	0.02	1.61	0.02	3.52	0.04	0.75	0.01	0.27	0.00	0.021	0.001
40	0.07	0.02	1.49	0.02	3.30	0.03	0.71	0.01	0.25	0.00	0.022	0.001
42	0.11	0.03	1.57	0.03	3.67	0.06	0.80	0.02	0.26	0.01	0.022	0.001
43	0.11	0.02	1.54	0.02	3.68	0.05	0.80	0.02	0.26	0.00	0.021	0.001
44	0.17	0.02	1.50	0.02	3.39	0.05	0.73	0.01	0.25	0.00	0.020	0.001
45	0.18	0.02	1.60	0.02	3.43	0.04	0.73	0.01	0.27	0.00	0.020	0.001

47	0.16	0.02	1.57	0.02	3.45	0.03	0.74	0.01	0.26	0.00	0.021	0.000
48	0.24	0.02	1.60	0.02	3.64	0.04	0.79	0.01	0.27	0.00	0.019	0.001
50	0.25	0.02	1.71	0.02	3.91	0.05	0.85	0.01	0.29	0.00	0.020	0.001
51	0.15	0.02	1.63	0.02	3.44	0.04	0.73	0.01	0.27	0.00	0.021	0.001
52	0.19	0.02	1.66	0.02	3.69	0.04	0.79	0.01	0.28	0.00	0.021	0.001
53	0.13	0.02	1.61	0.02	3.67	0.05	0.79	0.02	0.27	0.00	0.022	0.001
54	0.13	0.03	1.64	0.03	3.71	0.05	0.80	0.02	0.27	0.00	0.022	0.001
55	0.07	0.02	1.55	0.02	3.73	0.05	0.82	0.02	0.26	0.00	0.022	0.001
56	0.15	0.01	1.63	0.01	3.69	0.03	0.80	0.01	0.27	0.00	0.022	0.000
57	0.07	0.02	1.55	0.02	3.60	0.05	0.78	0.01	0.26	0.00	0.022	0.001
58	0.13	0.02	1.63	0.02	3.74	0.05	0.81	0.01	0.27	0.00	0.022	0.001
59	0.25	0.02	1.67	0.02	3.83	0.05	0.83	0.01	0.29	0.00	0.019	0.001
60	0.10	0.02	1.56	0.02	3.67	0.05	0.80	0.01	0.26	0.00	0.022	0.001
61	0.11	0.02	1.55	0.02	3.24	0.04	0.68	0.01	0.26	0.00	0.021	0.000
62	0.05	0.02	1.45	0.02	3.21	0.04	0.69	0.01	0.24	0.00	0.021	0.000
63	0.09	0.02	1.47	0.02	3.16	0.04	0.67	0.01	0.25	0.00	0.021	0.001
64	-0.07	0.02	1.43	0.01	3.11	0.03	0.66	0.01	0.23	0.00	0.024	0.001
65	-0.06	0.02	1.48	0.02	2.97	0.03	0.61	0.01	0.24	0.00	0.024	0.001
66	0.00	0.02	1.48	0.02	3.14	0.04	0.66	0.01	0.24	0.00	0.023	0.001
68	-0.05	0.02	1.48	0.02	3.07	0.04	0.64	0.01	0.24	0.00	0.024	0.001
69	0.00	0.02	1.39	0.02	3.20	0.04	0.69	0.01	0.23	0.00	0.022	0.000
70	0.09	0.02	1.50	0.02	3.17	0.04	0.66	0.01	0.25	0.00	0.021	0.001
71	0.19	0.02	1.57	0.02	3.09	0.04	0.63	0.01	0.27	0.00	0.020	0.001
72	0.12	0.02	1.45	0.02	3.23	0.04	0.69	0.01	0.24	0.00	0.020	0.001
73			1.57	0.02								
74	0.07	0.02	1.49	0.02	3.25	0.04	0.69	0.01	0.25	0.00	0.022	0.001
77	0.08	0.02	1.49	0.01	3.17	0.03	0.67	0.01	0.25	0.00	0.022	0.000
78	0.14	0.02	1.52	0.01	3.44	0.03	0.74	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
80	0.22	0.02	1.68	0.02	3.77	0.05	0.81	0.01	0.29	0.00	0.021	0.001
81	0.20	0.02	1.67	0.02	3.78	0.05	0.81	0.01	0.28	0.00	0.021	0.001
86	0.18	0.02	1.61	0.02	4.04	0.05	0.89	0.01	0.27	0.00	0.021	0.001
88	0.00	0.02	1.59	0.02	3.52	0.04	0.75	0.01	0.26	0.00	0.025	0.001
89	0.08	0.02	1.51	0.02	3.56	0.04	0.77	0.01	0.25	0.00	0.022	0.001
90	0.09	0.03	1.53	0.03	5.96	0.12	1.45	0.03	0.25	0.00	0.022	0.001
91	0.09	0.02	1.39	0.02	4.09	0.06	0.95	0.02	0.23	0.00	0.020	0.001
92	-0.03	0.02	1.33	0.02	3.97	0.06	0.92	0.02	0.22	0.00	0.021	0.001

93	0.04	0.02	1.30	0.02	4.63	0.09	1.11	0.02	0.21	0.00	0.019	0.001
94	0.08	0.04	1.54	0.04	6.53	0.20	1.61	0.06	0.26	0.01	0.022	0.001
95	0.15	0.04	1.49	0.05	6.53	0.25	1.62	0.07	0.25	0.01	0.020	0.001
96	0.09	0.04	1.49	0.04	7.48	0.25	1.89	0.08	0.25	0.01	0.021	0.001
97	0.12	0.03	1.52	0.03	5.25	0.12	1.26	0.03	0.25	0.00	0.021	0.001
98	0.19	0.03	1.46	0.02	4.52	0.07	1.06	0.02	0.25	0.00	0.019	0.001
99	0.14	0.03	1.56	0.03	6.50	0.14	1.60	0.04	0.26	0.00	0.021	0.001
100	0.14	0.03	1.57	0.02	4.33	0.07	0.99	0.02	0.26	0.00	0.021	0.001
101	0.32	0.03	1.57	0.02	4.52	0.07	1.05	0.02	0.27	0.00	0.017	0.001
102	0.21	0.03	1.65	0.03	5.44	0.09	1.29	0.03	0.28	0.00	0.020	0.001
103	0.36	0.02	1.68	0.02	5.03	0.06	1.17	0.01	0.29	0.00	0.017	0.001
104	0.36	0.03	1.78	0.03	5.69	0.09	1.34	0.03	0.31	0.00	0.018	0.001
105	0.24	0.04	1.71	0.04	6.71	0.19	1.64	0.05	0.29	0.01	0.020	0.001
106	0.28	0.03	1.59	0.03	6.53	0.14	1.61	0.04	0.27	0.00	0.018	0.001
107	0.14	0.04	1.52	0.03	4.56	0.09	1.06	0.02	0.26	0.00	0.020	0.001
108	0.14	0.03	1.48	0.02	4.04	0.06	0.91	0.02	0.25	0.00	0.020	0.001
109	0.04	0.02	1.48	0.02	4.34	0.06	1.00	0.02	0.24	0.00	0.022	0.001
112	-0.04	0.02	1.45	0.02	3.53	0.05	0.77	0.01	0.24	0.00	0.024	0.001
113	0.13	0.02	1.50	0.02	3.75	0.05	0.83	0.02	0.25	0.00	0.020	0.001
114	0.11	0.03	1.54	0.03	5.08	0.09	1.20	0.02	0.26	0.00	0.021	0.001
115	0.09	0.03	1.59	0.03	4.74	0.08	1.10	0.03	0.27	0.00	0.023	0.001
117	0.21	0.02	1.62	0.02	4.18	0.06	0.94	0.02	0.27	0.00	0.020	0.001
118	0.17	0.02	1.70	0.02	3.86	0.05	0.83	0.01	0.29	0.00	0.022	0.001
119	0.21	0.03	1.67	0.03	5.82	0.12	1.39	0.04	0.28	0.01	0.020	0.001
120	0.06	0.02	1.54	0.02	4.69	0.06	1.09	0.02	0.26	0.00	0.023	0.001
121	-0.16	0.03	1.49	0.02	3.73	0.06	0.82	0.02	0.24	0.00	0.027	0.001
122	-0.14	0.02	1.44	0.02	3.48	0.05	0.76	0.02	0.23	0.00	0.026	0.001
123					2.35	0.03						

## 8 M urea 15N Relaxation Data

Residue	NOE	NOE error	R1	R1 error	R2	R2 error	J(0)	J(0) error	J(N)	J(N) error	J(0.87H)	J(0.87H) error
1	-0.67	0.03	1.20	0.01	1.79	0.01	0.31	0.00	0.18	0.00	0.031	0.001
2	-0.25	0.01	1.41	0.01	2.54	0.02	0.50	0.01	0.22	0.00	0.028	0.000
3	0.15	0.00	1.56	0.01	4.00	0.03	0.89	0.01	0.26	0.00	0.021	0.000
5	0.22	0.01	1.62	0.02	4.63	0.07	1.06	0.02	0.28	0.00	0.020	0.000
6	0.24	0.02	1.56	0.02	5.67	0.09	1.37	0.03	0.27	0.00	0.018	0.001
7	0.20	0.02	1.58	0.02	4.95	0.08	1.16	0.02	0.27	0.00	0.020	0.000
9	0.28	0.01	1.59	0.02	5.86	0.08	1.41	0.02	0.27	0.00	0.018	0.000
11	0.33	0.01	1.64	0.02	5.72	0.09	1.37	0.03	0.28	0.00	0.017	0.000
16	0.34	0.01	1.68	0.02	5.54	0.09	1.31	0.03	0.29	0.00	0.017	0.000
17	0.19	0.01	1.53	0.01	4.17	0.04	0.95	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
19	0.09	0.00	1.56	0.01	3.70	0.04	0.81	0.01	0.26	0.00	0.022	0.000
20	0.13	0.00	1.51	0.01	3.41	0.03	0.73	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
21	0.17	0.00	1.47	0.01	4.14	0.04	0.94	0.01	0.25	0.00	0.019	0.000
22	0.00	0.00	1.49	0.01	4.36	0.06	1.00	0.02	0.24	0.00	0.023	0.000
23	0.18	0.00	1.43	0.02	4.80	0.07	1.14	0.02	0.24	0.00	0.018	0.000
25	0.18	0.02	1.50	0.03	6.71	0.21	1.67	0.06	0.25	0.00	0.019	0.001
26	0.19	0.02	1.51	0.02	5.39	0.11	1.29	0.03	0.26	0.00	0.019	0.001
28	0.14	0.02	1.52	0.03	7.56	0.23	1.91	0.06	0.26	0.00	0.020	0.001
29	0.11	0.01	1.38	0.02	5.31	0.11	1.29	0.03	0.23	0.00	0.019	0.000
32	0.16	0.00	1.57	0.02	4.52	0.08	1.04	0.02	0.26	0.00	0.020	0.000
33	0.16	0.01	1.52	0.02	4.10	0.05	0.93	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
34	0.17	0.01	1.54	0.01	3.91	0.04	0.87	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
35	0.09	0.00	1.53	0.01	3.31	0.03	0.70	0.01	0.26	0.00	0.022	0.000
38	0.24	0.01	1.59	0.01	3.97	0.04	0.88	0.01	0.27	0.00	0.019	0.000
39	0.28	0.02	1.62	0.01	4.32	0.04	0.97	0.01	0.28	0.00	0.018	0.001
40	0.12	0.00	1.50	0.01	3.99	0.04	0.90	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
42	0.21	0.00	1.55	0.02	4.41	0.07	1.01	0.02	0.26	0.00	0.019	0.000
43	0.22	0.01	1.54	0.02	4.39	0.07	1.01	0.02	0.26	0.00	0.019	0.000
44	0.15	0.01	1.56	0.01	4.13	0.05	0.93	0.01	0.26	0.00	0.021	0.000
45	0.16	0.01	1.53	0.01	3.99	0.04	0.89	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
46	0.17	0.01	1.57	0.01	4.08	0.04	0.92	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
47	0.18	0.01	1.55	0.01	4.04	0.04	0.90	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
50	0.30	0.01	1.65	0.02	4.47	0.05	1.01	0.02	0.28	0.00	0.018	0.000
51	0.28	0.01	1.64	0.01	4.00	0.04	0.89	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000



52	0.35	0.01	1.62	0.01	4.43	0.04	1.01	0.01	0.28	0.00	0.016	0.000
53	0.26	0.01	1.59	0.02	4.41	0.06	1.01	0.02	0.27	0.00	0.018	0.000
54	0.27	0.01	1.59	0.02	4.41	0.06	1.01	0.02	0.27	0.00	0.018	0.000
57	0.25	0.01	1.53	0.01	4.29	0.05	0.98	0.02	0.26	0.00	0.018	0.000
59	0.26	0.01	1.62	0.02	4.59	0.06	1.05	0.02	0.28	0.00	0.019	0.000
60	0.29	0.02	1.53	0.02	4.36	0.06	1.00	0.02	0.26	0.00	0.017	0.000
61	0.23	0.01	1.55	0.01	3.97	0.04	0.89	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
62	0.16	0.02	1.50	0.01	3.99	0.05	0.90	0.01	0.25	0.00	0.020	0.000
63	0.10	0.01	1.47	0.01	3.92	0.04	0.88	0.01	0.24	0.00	0.021	0.000
64	0.10	0.02	1.47	0.01	3.87	0.04	0.87	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
65	0.06	0.00	1.53	0.01	3.61	0.04	0.79	0.01	0.25	0.00	0.022	0.000
69	0.14	0.01	1.48	0.01	4.02	0.05	0.91	0.01	0.25	0.00	0.020	0.000
70	0.20	0.02	1.53	0.02	3.97	0.05	0.89	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
71	0.19	0.01	1.62	0.01	3.87	0.04	0.85	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
72	0.19	0.01	1.51	0.01	3.86	0.04	0.86	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
73	0.16	0.01	1.62	0.01	4.32	0.04	0.98	0.01	0.27	0.00	0.021	0.000
74	0.15	0.01	1.52	0.01	4.01	0.04	0.90	0.01	0.25	0.00	0.020	0.000
77	0.16	0.01	1.55	0.01	3.91	0.04	0.87	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
78	0.23	0.00	1.56	0.01	4.12	0.04	0.93	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
79	0.24	0.01	1.61	0.01	4.75	0.04	1.10	0.01	0.27	0.00	0.019	0.000
81	0.30	0.01	1.66	0.02	4.57	0.05	1.04	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
86	0.23	0.02	1.60	0.02	4.67	0.06	1.08	0.02	0.27	0.00	0.019	0.000
87	0.21	0.01	1.61	0.01	4.40	0.05	1.00	0.02	0.27	0.00	0.020	0.000
89	0.18	0.00	1.55	0.01	4.17	0.05	0.94	0.01	0.26	0.00	0.020	0.000
90	0.12	0.01	1.55	0.02	4.92	0.08	1.16	0.02	0.26	0.00	0.021	0.000
91	0.07	0.00	1.45	0.02	4.08	0.05	0.93	0.01	0.24	0.00	0.021	0.000
92	0.00	0.00	1.39	0.01	4.18	0.05	0.97	0.02	0.23	0.00	0.022	0.000
93	0.14	0.01	1.40	0.02	4.52	0.07	1.07	0.02	0.24	0.00	0.019	0.000
94	0.17	0.01	1.50	0.02	4.96	0.10	1.18	0.03	0.25	0.00	0.019	0.000
95	0.15	0.01	1.51	0.03	5.19	0.12	1.23	0.04	0.25	0.00	0.020	0.000
96	0.22	0.01	1.55	0.02	5.50	0.13	1.32	0.03	0.26	0.00	0.019	0.000
97	0.20	0.01	1.53	0.02	4.98	0.08	1.18	0.02	0.26	0.00	0.019	0.000
98	0.23	0.01	1.43	0.02	4.83	0.07	1.15	0.02	0.24	0.00	0.017	0.000
99	0.26	0.02	1.57	0.02	5.31	0.09	1.27	0.02	0.27	0.00	0.018	0.000
100	0.23	0.01	1.53	0.02	4.67	0.07	1.09	0.02	0.26	0.00	0.018	0.000
101	0.32	0.01	1.54	0.02	5.43	0.08	1.31	0.02	0.27	0.00	0.016	0.000

103	0.38	0.01	1.59	0.02	5.94	0.08	1.45	0.02	0.28	0.00	0.015	0.000
104	0.44	0.02	1.72	0.02	6.65	0.11	1.63	0.03	0.30	0.00	0.015	0.001
105	0.39	0.01	1.68	0.02	6.67	0.13	1.64	0.04	0.29	0.00	0.016	0.000
106	0.37	0.01	1.59	0.02	5.82	0.08	1.41	0.02	0.28	0.00	0.016	0.000
107	0.27	0.01	1.50	0.02	5.05	0.08	1.20	0.02	0.26	0.00	0.017	0.000
108			1.51	0.02								
109	0.18	0.01	1.51	0.02	4.48	0.06	1.04	0.02	0.25	0.00	0.019	0.000
111	0.13	0.00	1.47	0.01	4.31	0.06	1.00	0.02	0.25	0.00	0.020	0.000
112	0.09	0.02	1.43	0.01	4.05	0.05	0.92	0.01	0.24	0.00	0.020	0.000
113	0.21	0.01	1.53	0.01	4.17	0.05	0.95	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
114	0.19	0.02	1.55	0.02	4.60	0.07	1.06	0.02	0.26	0.00	0.020	0.001
115	0.28	0.01	1.60	0.02	4.45	0.06	1.02	0.02	0.27	0.00	0.018	0.000
116	0.26	0.01	1.61	0.02	4.69	0.07	1.08	0.02	0.28	0.00	0.019	0.000
117	0.28	0.02	1.67	0.02	4.33	0.06	0.97	0.02	0.29	0.00	0.019	0.001
118	0.32	0.02	1.63	0.01	4.17	0.05	0.93	0.01	0.28	0.00	0.017	0.001
119	0.24	0.01	1.69	0.02	4.71	0.07	1.07	0.02	0.29	0.00	0.020	0.000
120	0.19	0.00	1.59	0.01	4.01	0.04	0.89	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
121	0.12	0.01	1.52	0.01	3.41	0.04	0.73	0.01	0.25	0.00	0.021	0.000
123	-0.42	0.05	1.28	0.01	2.22	0.02	0.42	0.01	0.20	0.00	0.028	0.001

**10 M urea** 15N Relaxation Data

Residue	NOE	NOE error	R1	R1 error	R2	R2 error	J(0)	J(0) error	J(N)	J(N) error	J(0.87H)	J(0.87H) error
1	-0.23	0.01	1.37	0.01	1.91	0.01	0.32	0.00	0.22	0.00	0.026	0.000
4	0.23	0.02	1.70	0.01	3.95	0.03	0.86	0.01	0.29	0.00	0.020	0.001
7	0.27	0.02	1.65	0.01	4.52	0.04	1.03	0.01	0.28	0.00	0.019	0.000
8	0.31	0.02	1.71	0.01	4.86	0.04	1.12	0.01	0.29	0.00	0.019	0.001
9	0.31	0.02	1.60	0.01	5.00	0.04	1.17	0.01	0.28	0.00	0.017	0.000
10	0.25	0.02	1.68	0.01	5.08	0.04	1.18	0.01	0.29	0.00	0.020	0.000
11	0.34	0.02	1.67	0.01	5.21	0.04	1.22	0.02	0.29	0.00	0.017	0.000
13	0.39	0.02	1.63	0.01	5.18	0.06	1.22	0.01	0.28	0.00	0.015	0.001
14			1.71	0.01	5.21	0.06						
17	0.27	0.02	1.64	0.01	4.07	0.03	0.91	0.01	0.28	0.00	0.019	0.000
19	0.23	0.02	1.68	0.01	3.78	0.03	0.81	0.01	0.28	0.00	0.020	0.000
20	0.21	0.01	1.65	0.01	3.58	0.02	0.76	0.01	0.28	0.00	0.020	0.000
21	0.21	0.02	1.55	0.01	4.38	0.03	1.00	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
22	0.20	0.02	1.61	0.01	4.41	0.03	1.00	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
23	0.17	0.02	1.47	0.01	4.85	0.04	1.15	0.01	0.25	0.00	0.019	0.000
25			1.57	0.01	5.61	0.07						
26	0.32	0.02	1.58	0.01	5.25	0.06	1.25	0.01	0.27	0.00	0.017	0.001
28	0.17	0.02	1.54	0.01	5.68	0.07	1.37	0.02	0.26	0.00	0.020	0.001
29	0.16	0.02	1.47	0.01	5.07	0.06	1.21	0.02	0.25	0.00	0.019	0.000
31	0.24	0.02	1.58	0.01	4.80	0.05	1.12	0.01	0.27	0.00	0.019	0.000
32	0.23	0.02	1.66	0.01	4.81	0.05	1.11	0.01	0.28	0.00	0.020	0.001
33	0.29	0.02	1.63	0.01	4.55	0.04	1.04	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
34	0.19	0.02	1.62	0.01	4.40	0.03	0.99	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
35	0.21	0.01	1.63	0.01	3.72	0.02	0.80	0.01	0.28	0.00	0.020	0.000
37	0.25	0.02	1.62	0.01	4.64	0.05	1.07	0.01	0.28	0.00	0.019	0.001
38	0.25	0.02	1.63	0.01	4.55	0.04	1.04	0.01	0.28	0.00	0.019	0.000
39	0.31	0.02	1.64	0.01	5.21	0.05	1.23	0.02	0.28	0.00	0.018	0.001
40	0.31	0.02	1.59	0.01	4.56	0.03	1.05	0.01	0.27	0.00	0.017	0.000
42	0.25	0.02	1.57	0.02	4.96	0.06	1.17	0.02	0.27	0.00	0.018	0.001
43	0.22	0.02	1.65	0.01	5.24	0.06	1.23	0.02	0.28	0.00	0.020	0.001
44	0.28	0.02	1.60	0.01	4.75	0.04	1.11	0.01	0.27	0.00	0.018	0.000
45	0.29	0.02	1.62	0.01	4.67	0.04	1.08	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
46	0.30	0.02	1.69	0.01	4.63	0.04	1.06	0.01	0.29	0.00	0.019	0.000
47	0.31	0.02	1.68	0.01	4.68	0.03	1.07	0.01	0.29	0.00	0.018	0.000

48	0.34	0.02	1.66	0.01	4.89	0.04	1.13	0.01	0.29	0.00	0.017	0.000
50	0.37	0.02	1.71	0.01	5.11	0.04	1.19	0.01	0.30	0.00	0.017	0.000
51	0.32	0.02	1.74	0.01	4.57	0.04	1.03	0.01	0.30	0.00	0.019	0.001
52	0.36	0.02	1.70	0.01	5.03	0.04	1.17	0.01	0.29	0.00	0.017	0.000
53	0.31	0.02	1.64	0.01	4.85	0.05	1.13	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
54	0.33	0.02	1.65	0.01	4.92	0.04	1.15	0.01	0.29	0.00	0.017	0.000
58	0.30	0.02	1.63	0.01	5.11	0.04	1.20	0.02	0.28	0.00	0.018	0.000
59	0.39	0.02	1.70	0.01	5.31	0.05	1.25	0.02	0.30	0.00	0.016	0.001
62	0.19	0.02	1.57	0.01	4.75	0.04	1.10	0.01	0.27	0.00	0.020	0.000
63	0.21	0.02	1.56	0.01	4.69	0.04	1.09	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
64	0.12	0.02	1.56	0.01	4.63	0.04	1.07	0.01	0.26	0.00	0.021	0.000
65	0.22	0.02	1.65	0.01	4.38	0.04	0.99	0.01	0.28	0.00	0.020	0.000
68	0.33	0.02	1.70	0.01	4.54	0.04	1.03	0.01	0.29	0.00	0.018	0.001
69	0.21	0.02	1.56	0.01	4.77	0.04	1.11	0.01	0.26	0.00	0.019	0.000
70	0.26	0.02	1.63	0.01	4.80	0.04	1.11	0.01	0.28	0.00	0.019	0.000
71			1.67	0.01	4.62	0.05						
72	0.22	0.02	1.56	0.01	4.47	0.04	1.03	0.01	0.27	0.00	0.019	0.000
73	0.31	0.02	1.67	0.01	5.04	0.04	1.18	0.01	0.29	0.00	0.018	0.000
74	0.29	0.02	1.58	0.01	4.76	0.04	1.11	0.01	0.27	0.00	0.017	0.000
75	0.29	0.01	1.60	0.01	4.58	0.03	1.06	0.01	0.27	0.00	0.018	0.000
76			1.61	0.01	5.16	0.04						
78	0.29	0.02	1.63	0.01	4.81	0.03	1.11	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
79	0.35	0.02	1.65	0.01	4.95	0.04	1.15	0.01	0.29	0.00	0.017	0.000
80			1.69	0.01	4.30	0.02						
81	0.37	0.02	1.71	0.01	5.31	0.05	1.25	0.02	0.30	0.00	0.017	0.001
84			1.66	0.01	5.15	0.04						
85	0.35	0.02	1.65	0.01	4.87	0.04	1.13	0.01	0.29	0.00	0.017	0.000
86	0.33	0.02	1.68	0.01	5.40	0.05	1.28	0.02	0.29	0.00	0.017	0.001
87			1.66	0.01	5.11	0.05						
88	0.27	0.02	1.64	0.01	4.80	0.04	1.11	0.01	0.28	0.00	0.019	0.000
89	0.27	0.02	1.61	0.01	4.85	0.04	1.13	0.01	0.28	0.00	0.018	0.000
90	0.27	0.02	1.61	0.01	5.38	0.06	1.28	0.02	0.28	0.00	0.018	0.001
92	0.14	0.02	1.42	0.01	4.62	0.04	1.09	0.01	0.24	0.00	0.019	0.000
93	0.19	0.02	1.48	0.01	5.10	0.05	1.22	0.02	0.25	0.00	0.019	0.000
95	0.22	0.02	1.55	0.02	5.61	0.08	1.35	0.03	0.26	0.00	0.019	0.001
96	0.26	0.02	1.58	0.02	5.84	0.08	1.42	0.02	0.27	0.00	0.018	0.001



**RDC values**

Residue	4 M urea	6 M urea	8 M urea	10 M urea
1	1.03	0.88	0.42	0.46
2	1.26	0.67	0.82	0.76
4		0.61		1.06
5		0.76	1.18	
6		-0.67		
7		1.00	0.76	0.42
8		0.36	1.03	0.88
9			1.15	0.97
11			0.61	0.52
13				1.03
14			2.00	1.43
16		-0.06	1.09	1.09
17		-0.39	-0.03	0.27
19		0.06	0.39	0.58
20		0.52	0.58	0.46
21		2.25	1.79	
22		2.49	1.58	0.79
23		2.55	3.07	2.58
25			2.31	2.34
26		2.94	2.16	1.21
28			0.30	1.88
29		0.27	1.43	1.31
31				2.00
32			1.37	1.55
33		2.00	1.52	1.58
34	1.18	1.49	1.21	1.31
35	0.90	0.91	1.00	0.70
37	1.13			
38	0.76	0.82	0.82	0.91
39	0.54	1.09	0.52	
40		0.88	0.97	1.24
41	2.09			
42		2.03	2.49	1.67
43		1.76	1.79	2.19
44		1.67	1.49	
45	0.43	1.24	1.03	1.09
46	0.09		0.42	0.30
47	0.65	0.27	0.58	0.06
48	0.29			0.91
50	0.02	0.06	0.49	0.30
51	-0.04	0.21	0.64	0.61
52	0.27	0.27	0.73	0.79
53		1.06	1.06	1.24
54	1.12		2.00	1.37
55		0.94		
57		1.15	1.94	1.27
58	0.16	1.12		0.55
59		0.79	0.94	0.94
60		0.79	0.94	
61	0.44	0.58	1.15	
62	0.92	1.58	1.91	1.43
63	1.03	1.64	1.67	1.58
64		1.49	1.46	1.58
65		1.49	1.70	1.73

66		1.88		1.06
68	1.42			
69		1.94	1.91	1.70
70	0.98	1.73	1.73	1.67
71		1.00	1.21	
72	0.78	1.09	1.43	1.31
73		0.73	1.00	0.70
74	0.54	0.79	0.88	1.21
76				0.70
77	-0.13	0.03	0.58	
78	-0.02	0.58	0.88	0.82
79	0.02		0.85	0.88
80	-1.11	0.39		
81		0.15	0.42	0.64
84				0.67
86		0.94	0.79	1.15
87	0.22		0.85	1.18
88	0.52	0.64	0.94	1.03
89		0.76		1.31
90		1.24	0.76	1.40
91		1.27	2.34	
92		1.49	1.94	1.94
93		1.58	2.00	2.12
94		2.19		
95		2.52	2.85	2.25
96		1.00	2.31	2.06
97		1.37	1.82	2.12
98		1.67	1.55	
99		1.37	1.49	1.27
100		1.24	1.15	1.61
101		0.52	0.73	
102		0.76		
103		-0.46	-0.24	-0.18
104		-0.61	-0.64	-0.55
105		-0.64	-0.30	-0.70
106		0.46	1.46	0.73
107		0.91	1.09	1.40
108		1.58		
109		0.76	1.43	1.64
111			1.55	1.88
112	0.95	0.88	1.12	1.18
113		1.31		1.09
114		0.88	1.73	0.97
115		1.27	1.43	1.40
116			1.06	1.09
117		1.06	1.21	1.12
118	-0.73	0.12	0.55	
119		-0.33	0.18	0.03
120		0.21	0.55	0.91
121		0.58	0.94	0.61
122		0.94		
123		0.36	0.36	0.55