

Figure S1

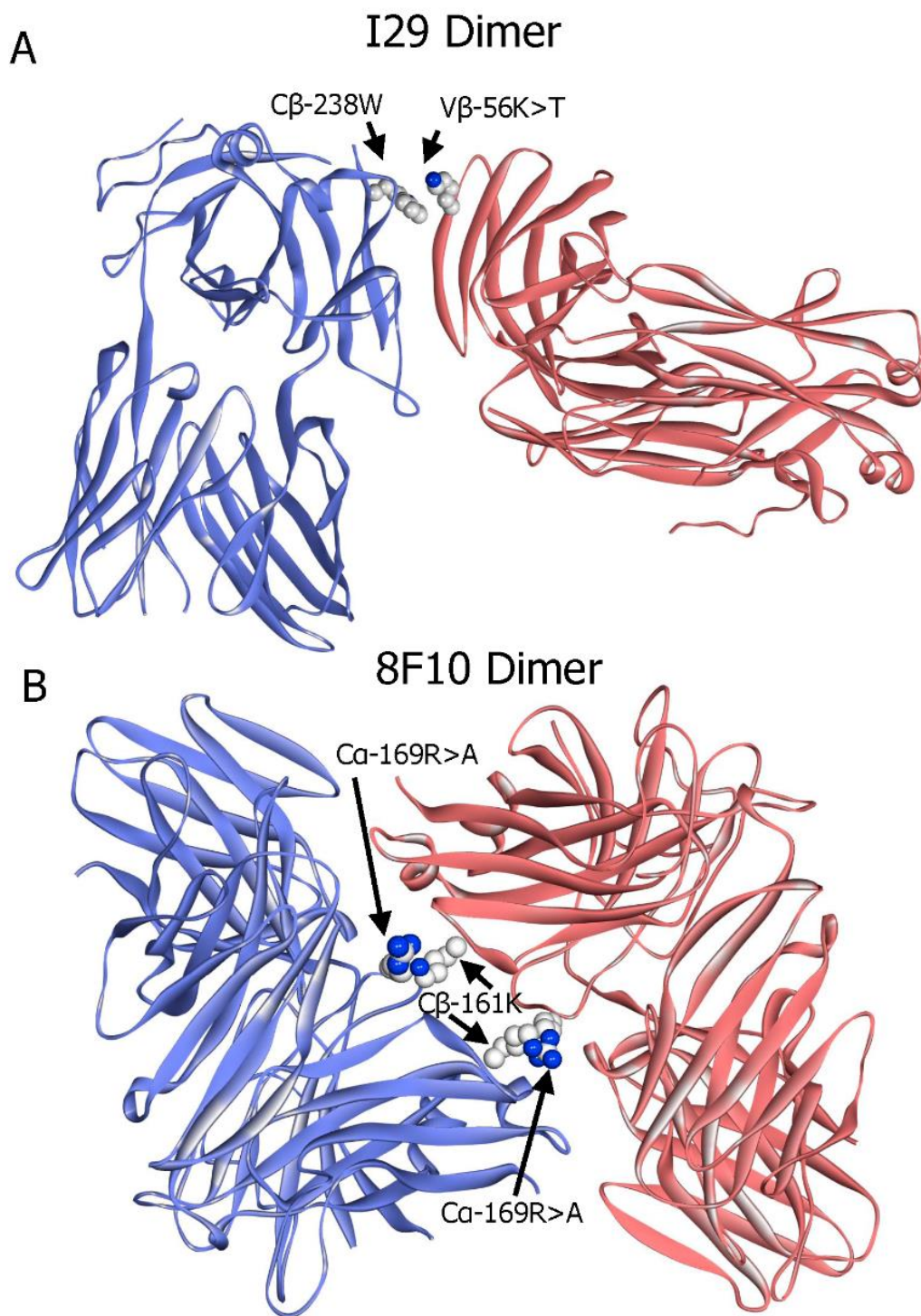


Figure S2

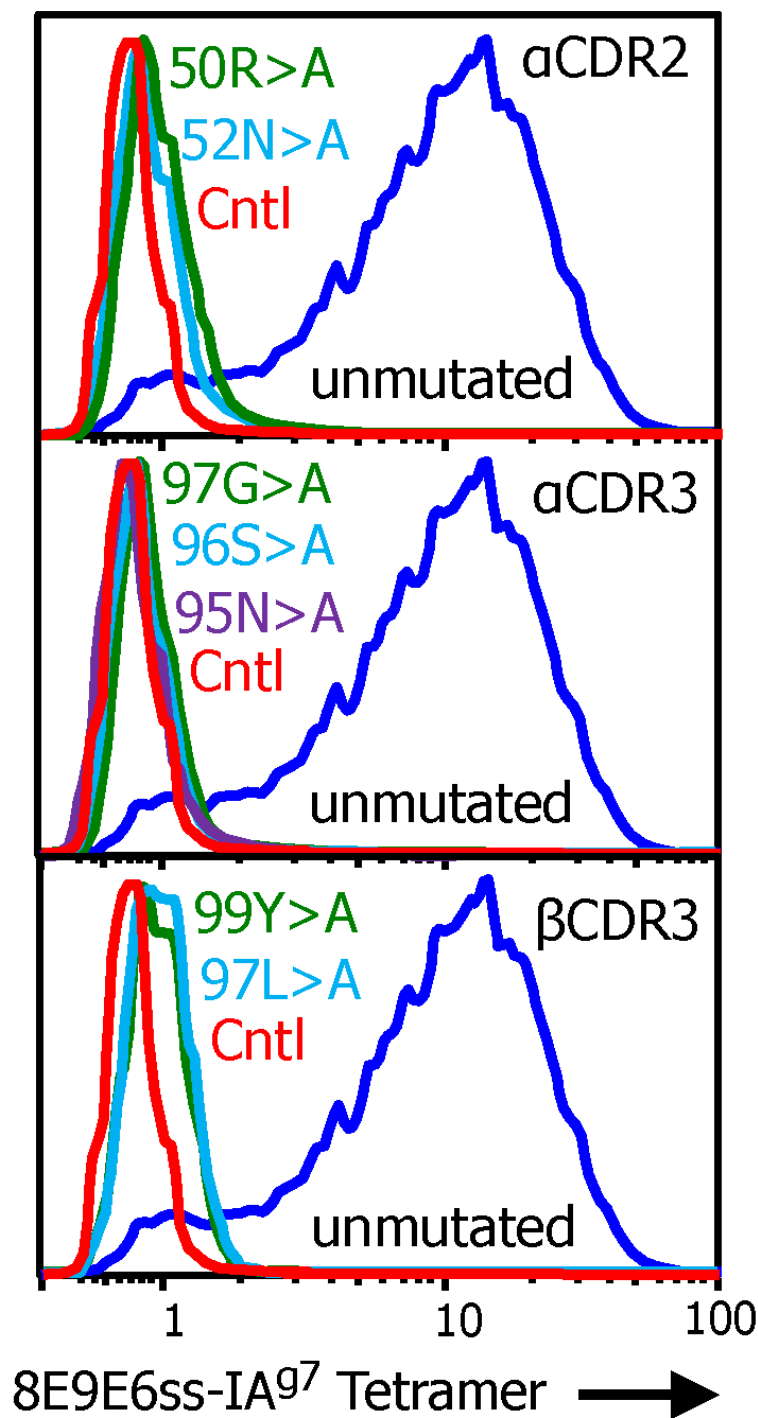


Fig. S2. Extension of the mutational analysis of the I.29 TCR shown in Fig. 2b in the main manuscript. Individual mutations to alanine were introduced into I.29 TCR amino acids within V α CDR2, V α CDR3 and V β CDR3 making the most contact with the IAg7-8E9E6ss ligand (Table 2). The mutated TCRs were introduced into 5KC to construct avatars expressing the TCR on the surface, which was confirmed by anti-C β staining. Each resulting T cell was tested for binding of the IAg7-8E9E6ss fluorescent tetramer. The positive control was the 5KC avatar expressing the unmutated TCR and the negative control was the 5KC recipient, which lacks functional TCR genes.

Table S1 – Crystallography Statistics

	I29 TCR	IA ⁹⁷ 8E9E6ss I29 TCR Complex	8F10 TCR	IA ⁹⁷ 8G9E 8F10 TCR Complex	DQ8 8E9E11ss T1D3 TCR Complex
PDB No.	6DFQ	6DFS	6DFV	6DFW	6DFX
Space Group	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	P6 ₃	P1	P2 ₁	P2 ₁
Data collection					
Dimensions (Å)	a 95.11 b 117.63 c 234.77	269.52	62.02 69.69 69.70	93.10 102.04 136.00	111.71 88.90 116.78
Angles (°) (Å)	α 90.00 β 90.00 γ 90.00	90.00	111.66 111.03 94.86	90.00 107.83 90.00	90.00 104.26 90.00
Resol. Range (Å)	50-2.60	50-3.10	50-1.71	50-3.20	50-2.03
R_{sym} or $R_{\text{merge}}^{*†}$	0.05(0.73)	0.03(0.66)	0.04(0.86)	0.07(0.86)	0.05(0.26)
$I/\sigma I^*$	12.4(1.2)	24.4(1.4)	11.6(1.2)	7.6(1.0)	14.4(2.1)
Completeness (%) [*]	98.1(99.5)	99.7(100)	91.5(91.1)	96.9(97.3)	98.1(88.3)
Redundancy [*]	3.7 (3.7)	6.3(6.8)	4.1(4.1)	3.4(3.4)	4.5(3.3)
Refinement					
Resol. Range (Å)	47.6-2.60	46.73-3.10	48.21-1.71	46.56-3.20	47.78-2.03
No. reflections	76175	32259	91564	36910	135207
Rwork‡	22.0	24.0	17.1	23.3	18.1
Rfree‡	25.3	28.5	23.1	29.7	21.7
No. atoms	13644	6254	7097	12189	13693
Protein	13467	6221	6770	12189	12872
Ligand/ion	9	14	8	N/A	46
Water	168	19	319	N/A	775
<u>B-factors</u>					
Protein	74.98	69.59	41.64	132.2	49.56
Ligand/ion	69.97	72.10	45.95	N/A	54.61
Water	52.85	18.14	38.65	N/A	46.85
<u>R.m.s deviations</u>					
Bond lengths (Å)	0.014	0.019	0.015	0.019	0.019
Bond angles (°)	1.746	1.939	1.747	1.934	1.937

*All data (outer shell).

† $R_{\text{merge}} = \sum(|I - \langle I \rangle|) / \sum(I)$.

‡ R_{work} or $R_{\text{free}} = \sum||F_o| - |F_c|| / \sum|F_o|$, R_{free} is calculated from a set of ~5% of the total reflections randomly chosen and set aside.

Diffraction data collection, indexing and merging, model building and refinement statistics are shown for the 5 structures reported in this paper.

Supplemental Spreadsheet S1

Contact of I.29 TCR wiith IAg7-8E9E6ss

TCR V	TCR AA	TCR atom	pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	dist Å	Hbond salt	VDW		MHC		
								VDWC-C	other	α	PEP	β
Va	26D	OD1	P	-1E	OE1	4.48			1			1
Va	27T	CB	B	85E	OE1	4.29			1			1
Va	27T	CG2	B	85E	OE1	4.20			1			1
Va	27T	O	B	81H	CE1	4.39			1			1
Va	27T	O	B	81H	ND1	4.34			1			1
Va	27T	OG1	B	81H	CE1	4.19			1			1
Va	27T	OG1	B	85E	CD	4.38			1			1
Va	27T	OG1	B	85E	OE1	3.37	1					1
Va	28A	CB	P	-1E	OE1	4.04			1			1
Va	28A	CB	P	2L	CD1	4.30		1				1
Va	28A	O	P	2L	CD1	4.28			1			1
Va	30S	CB	B	77T	CB	4.23		1				1
Va	30S	CB	B	77T	CG2	4.34		1				1
Va	30S	OG	B	77T	CB	4.12			1			1
Va	30S	OG	B	77T	CG2	4.21			1			1
Va	50R	CD	B	69E	C	4.40		1				1
Va	50R	CD	B	69E	O	4.19			1			1
Va	50R	CD	B	70R	CA	4.34		1				1
Va	50R	CD	B	73A	CB	4.00		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	CA	3.79		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	CB	4.03		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	N	4.14			1			1
Va	50R	NE	B	69E	C	4.21			1			1
Va	50R	NE	B	69E	CB	4.47			1			1
Va	50R	NE	B	69E	O	4.41			1			1
Va	50R	NE	B	70R	CA	4.00			1			1
Va	50R	NE	B	70R	N	4.06			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CA	4.00			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CB	4.08			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CG	4.08			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	CA	4.05			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	CB	3.94			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	N	4.19			1			1
Va	52N	CA	B	76D	CB	4.11		1				1
Va	52N	CA	B	76D	CG	4.19		1				1
Va	52N	CA	B	76D	OD1	3.85			1			1
Va	52N	CB	B	73A	CA	4.42		1				1
Va	52N	CB	B	76D	CB	4.34		1				1
Va	52N	CB	B	76D	CG	4.07		1				1
Va	52N	CB	B	76D	OD1	3.29			1			1
Va	52N	CG	B	73A	CA	4.13		1				1

Va	52N	CG	B	73A	CB	3.94	1		1
Va	52N	ND2	B	73A	CA	3.83		1	1
Va	52N	ND2	B	73A	CB	3.77		1	1
Va	52N	ND2	B	73A	N	4.28		1	1
Va	52N	OD1	B	73A	CB	4.13		1	1
Va	94S	O	P	5V	CG2	3.65		1	1
Va	94S	OG	B	77T	CG2	4.44		1	1
Va	95N	C	P	2L	CB	4.26	1		1
Va	95N	C	P	2L	CD1	4.47	1		1
Va	95N	C	P	2L	CD2	3.72	1		1
Va	95N	C	P	2L	CG	4.36	1		1
Va	95N	C	P	3Y	CD1	3.89	1		1
Va	95N	C	P	3Y	CE1	4.26	1		1
Va	95N	C	P	3Y	N	4.15		1	1
Va	95N	C	P	3Y	O	4.18		1	1
Va	95N	CA	P	3Y	O	3.86		1	1
Va	95N	CB	B	77T	OG1	3.97		1	1
Va	95N	CB	B	78A	CB	4.27	1		1
Va	95N	CB	P	2L	CB	4.25	1		1
Va	95N	CB	P	2L	CD1	4.34	1		1
Va	95N	CB	P	3Y	C	4.36	1		1
Va	95N	CB	P	3Y	N	4.21		1	1
Va	95N	CB	P	3Y	O	3.54		1	1
Va	95N	CG	B	74E	CG	4.13	1		1
Va	95N	CG	B	77T	CB	4.27	1		1
Va	95N	CG	B	77T	OG1	3.10		1	1
Va	95N	CG	B	78A	CB	4.19	1		1
Va	95N	CG	P	3Y	O	3.85		1	1
Va	95N	CG	P	5V	CG2	4.29	1		1
Va	95N	ND2	B	74E	CB	4.44		1	1
Va	95N	ND2	B	74E	CD	3.66		1	1
Va	95N	ND2	B	74E	CG	3.11		1	1
Va	95N	ND2	B	74E	OE2	3.73		1	1
Va	95N	ND2	B	77T	OG1	3.53		1	1
Va	95N	ND2	B	78A	CB	3.89		1	1
Va	95N	ND2	P	3Y	C	4.00		1	1
Va	95N	ND2	P	3Y	O	3.19	1		1
Va	95N	ND2	P	4L	CA	4.06		1	1
Va	95N	ND2	P	4L	N	4.41		1	1
Va	95N	ND2	P	5V	CG2	3.62		1	1
Va	95N	ND2	P	5V	N	4.47		1	1
Va	95N	O	P	2L	C	3.73		1	1
Va	95N	O	P	2L	CA	3.47		1	1
Va	95N	O	P	2L	CB	3.31		1	1
Va	95N	O	P	2L	CD1	4.15		1	1
Va	95N	O	P	2L	CD2	3.14		1	1
Va	95N	O	P	2L	CG	3.67		1	1

Va	95N	O	P	3Y	C	4.32		1	1
Va	95N	O	P	3Y	CA	4.03		1	1
Va	95N	O	P	3Y	CB	4.27		1	1
Va	95N	O	P	3Y	CD1	3.45		1	1
Va	95N	O	P	3Y	CE1	4.20		1	1
Va	95N	O	P	3Y	CG	4.16		1	1
Va	95N	O	P	3Y	N	3.02	1		1
Va	95N	O	P	3Y	O	3.74		1	1
Va	95N	OD1	B	74E	CG	4.43		1	1
Va	95N	OD1	B	77T	CB	3.72		1	1
Va	95N	OD1	B	77T	CG2	4.30		1	1
Va	95N	OD1	B	77T	OG1	2.79	1		1
Va	96S	C	P	3Y	CE1	4.22		1	1
Va	96S	CA	P	-1E	OE2	3.99		1	1
Va	96S	CA	P	2L	CD2	3.80		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	CD1	4.47		1	1
Va	96S	CB	P	-1E	CD	3.86		1	1
Va	96S	CB	P	-1E	OE1	4.07		1	1
Va	96S	CB	P	-1E	OE2	3.07		1	1
Va	96S	CB	P	2L	CD2	3.49		1	1
Va	96S	N	P	2L	CD2	3.94		1	1
Va	96S	N	P	3Y	CD1	4.46		1	1
Va	96S	OG	A	55E	CB	4.12		1	1
Va	96S	OG	A	55E	CG	4.28		1	1
Va	96S	OG	P	-1E	CD	3.76		1	1
Va	96S	OG	P	-1E	OE1	3.95		1	1
Va	96S	OG	P	-1E	OE2	2.81	1		1
Va	97G	C	A	57Q	C	4.40		1	1
Va	97G	C	A	57Q	CB	4.05		1	1
Va	97G	C	A	57Q	CG	4.19		1	1
Va	97G	C	A	58G	N	4.24		1	1
Va	97G	CA	A	57Q	C	4.30		1	1
Va	97G	CA	A	58G	CA	3.84		1	1
Va	97G	CA	A	58G	N	3.76		1	1
Va	97G	CA	P	3Y	CD1	4.26		1	1
Va	97G	CA	P	3Y	CE1	3.57		1	1
Va	97G	CA	P	3Y	CZ	4.48		1	1
Va	97G	N	A	55E	CB	4.48		1	1
Va	97G	N	P	3Y	CD1	3.96		1	1
Va	97G	N	P	3Y	CE1	3.67		1	1
Va	97G	O	A	57Q	C	4.21		1	1
Va	97G	O	A	57Q	CB	3.60		1	1
Va	97G	O	A	57Q	CG	3.34		1	1
Va	97G	O	A	57Q	O	4.36		1	1
Va	97G	O	A	58G	N	4.40		1	1
Va	98G	CA	A	55E	CB	4.45		1	1
Va	98G	CA	A	55E	CD	4.43		1	1

Va	98G	CA	A	55E	OE2	4.12		1	1
Va	98G	N	A	55E	CB	3.97		1	1
Va	98G	N	A	57Q	CB	4.48		1	1
Va	100N	CG	P	3Y	CE1	4.38		1	1
Va	100N	CG	P	3Y	OH	4.21		1	1
Va	100N	ND2	P	3Y	CE1	3.50		1	1
Va	100N	ND2	P	3Y	CZ	3.71		1	1
Va	100N	ND2	P	3Y	OH	3.11	1		1
Va	100N	OD1	P	3Y	CE1	4.41		1	1
Vb	29Q	C	B	64Q	OE1	4.29		1	1
Vb	29Q	CA	B	64Q	OE1	4.15		1	1
Vb	29Q	CB	B	64Q	OE1	4.09		1	1
Vb	29Q	CD	B	63K	NZ	4.18		1	1
Vb	29Q	CD	B	64Q	OE1	3.97		1	1
Vb	29Q	CG	B	63K	NZ	4.42		1	1
Vb	29Q	CG	B	64Q	OE1	4.35		1	1
Vb	29Q	NE2	B	60Y	CE2	3.56		1	1
Vb	29Q	NE2	B	60Y	CZ	4.13		1	1
Vb	29Q	NE2	B	60Y	OH	3.89		1	1
Vb	29Q	NE2	B	63K	CE	4.24		1	1
Vb	29Q	NE2	B	63K	NZ	3.25	1		1
Vb	29Q	NE2	B	64Q	CD	4.08		1	1
Vb	29Q	NE2	B	64Q	OE1	3.04	1		1
Vb	29Q	O	B	64Q	CD	4.33		1	1
Vb	29Q	O	B	64Q	NE2	4.37		1	1
Vb	29Q	O	B	64Q	OE1	3.54		1	1
Vb	51R	CZ	P	8E	OE2	3.67		1	1
Vb	51R	NE	P	8E	OE2	3.93	1		1
Vb	51R	NH2	P	8E	CD	3.52		1	1
Vb	51R	NH2	P	8E	OE1	3.74	1		1
Vb	51R	NH2	P	8E	OE2	2.62	1		1
Vb	95A	CB	B	64Q	NE2	4.21		1	1
Vb	95A	O	B	64Q	NE2	3.74		1	1
Vb	97L	C	B	70R	NE	4.29		1	1
Vb	97L	CD1	A	61Q	CD	4.07	1		1
Vb	97L	CD1	A	61Q	CG	4.08	1		1
Vb	97L	CD1	A	61Q	OE1	4.12		1	1
Vb	97L	CD1	P	3Y	OH	4.16		1	1
Vb	97L	CD1	P	5V	CG1	4.27	1		1
Vb	97L	O	B	70R	CD	4.03		1	1
Vb	97L	O	B	70R	CG	3.93		1	1
Vb	97L	O	B	70R	CZ	3.96		1	1
Vb	97L	O	B	70R	NE	3.15	1		1
Vb	97L	O	B	70R	NH2	3.88		1	1
Vb	98G	CA	B	70R	CG	4.35		1	1
Vb	99Y	CD1	B	64Q	O	4.44		1	1

Vb	99Y	CD1	B	70R	CB	4.16		1			1	
Vb	99Y	CE1	B	64Q	O	3.76			1		1	
Vb	99Y	CE1	B	70R	CA	4.29		1			1	
Vb	99Y	CE1	B	70R	CB	3.17		1			1	
Vb	99Y	CE1	B	70R	CG	4.05		1			1	
Vb	99Y	CE1	B	70R	N	4.32			1		1	
Vb	99Y	CE1	B	70R	NE	4.31			1		1	
Vb	99Y	CE2	B	64Q	O	4.12			1		1	
Vb	99Y	CZ	B	64Q	C	4.41		1			1	
Vb	99Y	CZ	B	64Q	O	3.59			1		1	
Vb	99Y	CZ	B	67Y	C	4.45		1			1	
Vb	99Y	CZ	B	67Y	CA	4.37		1			1	
Vb	99Y	CZ	B	70R	CA	4.32		1			1	
Vb	99Y	CZ	B	70R	CB	3.62		1			1	
Vb	99Y	CZ	B	70R	N	3.89			1		1	
Vb	99Y	OH	B	64Q	C	4.11			1		1	
Vb	99Y	OH	B	64Q	O	3.61			1		1	
Vb	99Y	OH	B	67Y	C	3.32			1		1	
Vb	99Y	OH	B	67Y	CA	3.61			1		1	
Vb	99Y	OH	B	67Y	N	4.08			1		1	
Vb	99Y	OH	B	67Y	O	3.63			1		1	
Vb	99Y	OH	B	68L	C	4.19			1		1	
Vb	99Y	OH	B	68L	CA	4.44			1		1	
Vb	99Y	OH	B	68L	N	3.47	1				1	
Vb	99Y	OH	B	69E	C	4.02			1		1	
Vb	99Y	OH	B	69E	CA	4.12			1		1	
Vb	99Y	OH	B	69E	CB	4.38			1		1	
Vb	99Y	OH	B	69E	N	3.46	1				1	
Vb	99Y	OH	B	70R	CA	3.71			1		1	
Vb	99Y	OH	B	70R	CB	3.34			1		1	
Vb	99Y	OH	B	70R	N	2.98		1			1	
							15	58	139	23	72	117
									212			212

Contact of IAg7-8E9E6ss with I.29 TCR

pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	TCR V	TCR AA	TCR atom	dist Å	Hbond salt	VDWC-C	VDW other	MHC α	PEP	MHC β
A	55E	CB	Va	96S	OG	4.12			1	1		
A	55E	CB	Va	97G	N	4.48			1	1		
A	55E	CB	Va	98G	N	3.97			1	1		
A	55E	CB	Va	98G	CA	4.45		1		1		
A	55E	CG	Va	96S	OG	4.28			1	1		
A	55E	CD	Va	98G	CA	4.43		1		1		
A	55E	OE2	Va	98G	CA	4.12			1	1		
A	57Q	C	Va	97G	CA	4.30		1		1		
A	57Q	C	Va	97G	C	4.40		1		1		
A	57Q	C	Va	97G	O	4.21			1	1		
A	57Q	O	Va	97G	O	4.36			1	1		
A	57Q	CB	Va	97G	C	4.05		1		1		
A	57Q	CB	Va	97G	O	3.60			1	1		
A	57Q	CB	Va	98G	N	4.48			1	1		
A	57Q	CG	Va	97G	C	4.19		1		1		
A	57Q	CG	Va	97G	O	3.34			1	1		
A	58G	N	Va	97G	CA	3.76			1	1		
A	58G	N	Va	97G	C	4.24			1	1		
A	58G	N	Va	97G	O	4.40			1	1		
A	58G	CA	Va	97G	CA	3.84		1		1		
A	61Q	CG	Vb	97L	CD1	4.08		1		1		
A	61Q	CD	Vb	97L	CD1	4.07		1		1		
A	61Q	OE1	Vb	97L	CD1	4.12			1	1		
B	60Y	CE2	Vb	29Q	NE2	3.56			1			1
B	60Y	CZ	Vb	29Q	NE2	4.13			1			1
B	60Y	OH	Vb	29Q	NE2	3.89			1			1
B	63K	CE	Vb	29Q	NE2	4.24			1			1
B	63K	NZ	Vb	29Q	CG	4.42			1			1
B	63K	NZ	Vb	29Q	CD	4.18			1			1
B	63K	NZ	Vb	29Q	NE2	3.25	1					1
B	64Q	C	Vb	99Y	CZ	4.41		1				1
B	64Q	C	Vb	99Y	OH	4.11			1			1
B	64Q	O	Vb	99Y	CE2	4.12			1			1
B	64Q	O	Vb	99Y	CD1	4.44			1			1
B	64Q	O	Vb	99Y	CE1	3.76			1			1
B	64Q	O	Vb	99Y	CZ	3.59			1			1
B	64Q	O	Vb	99Y	OH	3.61			1			1
B	64Q	CD	Vb	29Q	O	4.33			1			1
B	64Q	CD	Vb	29Q	NE2	4.08			1			1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	CA	4.15			1			1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	C	4.29			1			1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	CB	4.09			1			1

B	64Q	OE1	Vb	29Q	CG	4.35		1	1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	CD	3.97		1	1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	O	3.54		1	1
B	64Q	OE1	Vb	29Q	NE2	3.04	1		1
B	64Q	NE2	Vb	29Q	O	4.37		1	1
B	64Q	NE2	Vb	95A	O	3.74		1	1
B	64Q	NE2	Vb	95A	CB	4.21		1	1
B	67Y	N	Vb	99Y	OH	4.08		1	1
B	67Y	CA	Vb	99Y	CZ	4.37	1		1
B	67Y	CA	Vb	99Y	OH	3.61		1	1
B	67Y	C	Vb	99Y	CZ	4.45	1		1
B	67Y	C	Vb	99Y	OH	3.32		1	1
B	67Y	O	Vb	99Y	OH	3.63		1	1
B	68L	N	Vb	99Y	OH	3.47	1		1
B	68L	CA	Vb	99Y	OH	4.44		1	1
B	68L	C	Vb	99Y	OH	4.19		1	1
B	69E	N	Vb	99Y	OH	3.46	1		1
B	69E	CA	Vb	99Y	OH	4.12		1	1
B	69E	C	Vb	99Y	OH	4.02		1	1
B	69E	C	Va	50R	CD	4.40	1		1
B	69E	C	Va	50R	NE	4.21		1	1
B	69E	O	Va	50R	CD	4.19		1	1
B	69E	O	Va	50R	NE	4.41		1	1
B	69E	CB	Vb	99Y	OH	4.38		1	1
B	69E	CB	Va	50R	NE	4.47		1	1
B	70R	N	Va	50R	NH2	4.19		1	1
B	70R	N	Vb	99Y	CE1	4.32		1	1
B	70R	N	Vb	99Y	CZ	3.89		1	1
B	70R	N	Vb	99Y	OH	2.98	1		1
B	70R	N	Va	50R	NE	4.06		1	1
B	70R	N	Va	50R	CZ	4.14		1	1
B	70R	CA	Va	50R	NH2	4.05		1	1
B	70R	CA	Vb	99Y	CE1	4.29	1		1
B	70R	CA	Vb	99Y	CZ	4.32	1		1
B	70R	CA	Vb	99Y	OH	3.71		1	1
B	70R	CA	Va	50R	CD	4.34	1		1
B	70R	CA	Va	50R	NE	4.00		1	1
B	70R	CA	Va	50R	CZ	3.79	1		1
B	70R	CA	Va	50R	NH1	4.00		1	1
B	70R	CB	Va	50R	NH2	3.94		1	1
B	70R	CB	Vb	99Y	CD1	4.16	1		1
B	70R	CB	Vb	99Y	CE1	3.17	1		1
B	70R	CB	Vb	99Y	CZ	3.62	1		1
B	70R	CB	Vb	99Y	OH	3.34		1	1
B	70R	CB	Va	50R	CZ	4.03	1		1
B	70R	CB	Va	50R	NH1	4.08		1	1
B	70R	CG	Vb	98G	CA	4.35	1		1

B	70R	CG	Vb	97L	O	3.93			1	1
B	70R	CG	Vb	99Y	CE1	4.05		1		1
B	70R	CG	Va	50R	NH1	4.08			1	1
B	70R	CD	Vb	97L	O	4.03			1	1
B	70R	NE	Vb	97L	C	4.29			1	1
B	70R	NE	Vb	97L	O	3.15		1		1
B	70R	NE	Vb	99Y	CE1	4.31			1	1
B	70R	CZ	Vb	97L	O	3.96			1	1
B	70R	NH2	Vb	97L	O	3.88			1	1
B	73A	N	Va	52N	ND2	4.28			1	1
B	73A	CA	Va	52N	CB	4.42		1		1
B	73A	CA	Va	52N	CG	4.13		1		1
B	73A	CA	Va	52N	ND2	3.83			1	1
B	73A	CB	Va	50R	CD	4.00		1		1
B	73A	CB	Va	52N	OD1	4.13			1	1
B	73A	CB	Va	52N	CG	3.94		1		1
B	73A	CB	Va	52N	ND2	3.77			1	1
B	74E	CB	Va	95N	ND2	4.44			1	1
B	74E	CG	Va	95N	OD1	4.43			1	1
B	74E	CG	Va	95N	CG	4.13		1		1
B	74E	CG	Va	95N	ND2	3.11			1	1
B	74E	CD	Va	95N	ND2	3.66			1	1
B	74E	OE2	Va	95N	ND2	3.73			1	1
B	76D	CB	Va	52N	CA	4.11		1		1
B	76D	CB	Va	52N	CB	4.34		1		1
B	76D	CG	Va	52N	CA	4.19		1		1
B	76D	CG	Va	52N	CB	4.07		1		1
B	76D	OD1	Va	52N	CA	3.85			1	1
B	76D	OD1	Va	52N	CB	3.29			1	1
B	77T	CB	Va	30S	OG	4.12			1	1
B	77T	CB	Va	95N	OD1	3.72			1	1
B	77T	CB	Va	30S	CB	4.23		1		1
B	77T	CB	Va	95N	CG	4.27		1		1
B	77T	OG1	Va	95N	OD1	2.79		1		1
B	77T	OG1	Va	95N	CB	3.97			1	1
B	77T	OG1	Va	95N	CG	3.10			1	1
B	77T	OG1	Va	95N	ND2	3.53			1	1
B	77T	CG2	Va	30S	OG	4.21			1	1
B	77T	CG2	Va	94S	OG	4.44			1	1
B	77T	CG2	Va	95N	OD1	4.30			1	1
B	77T	CG2	Va	30S	CB	4.34		1		1
B	78A	CB	Va	95N	CB	4.27		1		1
B	78A	CB	Va	95N	CG	4.19		1		1
B	78A	CB	Va	95N	ND2	3.89			1	1
B	81H	ND1	Va	27T	O	4.34			1	1
B	81H	CE1	Va	27T	O	4.39			1	1
B	81H	CE1	Va	27T	OG1	4.19			1	1

B	85E	CD	Va	27T	OG1	4.38		1	1
B	85E	OE1	Va	27T	CB	4.29		1	1
B	85E	OE1	Va	27T	OG1	3.37	1		1
B	85E	OE1	Va	27T	CG2	4.20		1	1
P	-1E	CD	Va	96S	CB	3.86		1	1
P	-1E	CD	Va	96S	OG	3.76		1	1
P	-1E	OE1	Va	96S	CB	4.07		1	1
P	-1E	OE1	Va	96S	OG	3.95		1	1
P	-1E	OE1	Va	26D	OD1	4.48		1	1
P	-1E	OE1	Va	28A	CB	4.04		1	1
P	-1E	OE2	Va	96S	CA	3.99		1	1
P	-1E	OE2	Va	96S	CB	3.07		1	1
P	-1E	OE2	Va	96S	OG	2.81	1		1
P	2L	CA	Va	95N	O	3.47		1	1
P	2L	C	Va	95N	O	3.73		1	1
P	2L	CB	Va	95N	C	4.26	1		1
P	2L	CB	Va	95N	O	3.31		1	1
P	2L	CB	Va	95N	CB	4.25	1		1
P	2L	CG	Va	95N	C	4.36	1		1
P	2L	CG	Va	95N	O	3.67		1	1
P	2L	CD1	Va	28A	CB	4.30	1		1
P	2L	CD1	Va	28A	O	4.28		1	1
P	2L	CD1	Va	95N	C	4.47	1		1
P	2L	CD1	Va	95N	O	4.15		1	1
P	2L	CD1	Va	95N	CB	4.34	1		1
P	2L	CD2	Va	96S	N	3.94		1	1
P	2L	CD2	Va	96S	CA	3.80	1		1
P	2L	CD2	Va	96S	CB	3.49	1		1
P	2L	CD2	Va	95N	C	3.72	1		1
P	2L	CD2	Va	95N	O	3.14		1	1
P	3Y	N	Va	95N	C	4.15		1	1
P	3Y	N	Va	95N	O	3.02	1		1
P	3Y	N	Va	95N	CB	4.21		1	1
P	3Y	CA	Va	95N	O	4.03		1	1
P	3Y	C	Va	95N	O	4.32		1	1
P	3Y	C	Va	95N	CB	4.36	1		1
P	3Y	C	Va	95N	ND2	4.00		1	1
P	3Y	O	Va	95N	CA	3.86		1	1
P	3Y	O	Va	95N	C	4.18		1	1
P	3Y	O	Va	95N	O	3.74		1	1
P	3Y	O	Va	95N	CB	3.54		1	1
P	3Y	O	Va	95N	CG	3.85		1	1
P	3Y	O	Va	95N	ND2	3.19	1		1
P	3Y	CB	Va	95N	O	4.27		1	1
P	3Y	CG	Va	95N	O	4.16		1	1
P	3Y	CD1	Va	96S	N	4.46		1	1
P	3Y	CD1	Va	96S	CA	4.47	1		1

P	3Y	CD1	Va	97G	N	3.96			1		1	
P	3Y	CD1	Va	97G	CA	4.26		1			1	
P	3Y	CD1	Va	95N	C	3.89		1			1	
P	3Y	CD1	Va	95N	O	3.45			1		1	
P	3Y	CE1	Va	96S	C	4.22		1			1	
P	3Y	CE1	Va	97G	N	3.67			1		1	
P	3Y	CE1	Va	97G	CA	3.57		1			1	
P	3Y	CE1	Va	100N	CG	4.38		1			1	
P	3Y	CE1	Va	100N	OD1	4.41			1		1	
P	3Y	CE1	Va	100N	ND2	3.50			1		1	
P	3Y	CE1	Va	95N	C	4.26		1			1	
P	3Y	CE1	Va	95N	O	4.20			1		1	
P	3Y	CZ	Va	97G	CA	4.48		1			1	
P	3Y	CZ	Va	100N	ND2	3.71			1		1	
P	3Y	OH	Vb	97L	CD1	4.16			1		1	
P	3Y	OH	Va	100N	CG	4.21			1		1	
P	3Y	OH	Va	100N	ND2	3.11	1				1	
P	4L	N	Va	95N	ND2	4.41			1		1	
P	4L	CA	Va	95N	ND2	4.06			1		1	
P	5V	N	Va	95N	ND2	4.47			1		1	
P	5V	CG1	Vb	97L	CD1	4.27		1			1	
P	5V	CG2	Va	94S	O	3.65			1		1	
P	5V	CG2	Va	95N	CG	4.29		1			1	
P	5V	CG2	Va	95N	ND2	3.62			1		1	
P	8E	CD	Vb	51R	NH2	3.52			1		1	
P	8E	OE1	Vb	51R	NH2	3.74	1				1	
P	8E	OE2	Vb	51R	NE	3.93	1				1	
P	8E	OE2	Vb	51R	CZ	3.67			1		1	
P	8E	OE2	Vb	51R	NH2	2.62	1				1	
							15	58	139	23	72	117
									212			212

Contacts of 8F10 TCR with IAg7-8G9E

TCR V	TCR AA	TCR atom	pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	dist Å	Hbond salt	VDW VDWC-C	VDW other	MHC α	PEP	MHC β
Va	30N	ND2	P	2L	CD1	4.46			1		1	
Va	48D	OD1	B	69E	OE1	3.80			1			1
Va	50R	CD	B	70R	CA	3.95		1				1
Va	50R	CD	B	70R	CB	4.46		1				1
Va	50R	CD	B	70R	N	4.15			1			1
Va	50R	CD	B	73A	CB	4.02		1				1
Va	50R	CZ	B	69E	CG	4.48		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	CA	3.62		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	CB	3.25		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	CG	3.86		1				1
Va	50R	CZ	B	70R	N	3.86			1			1
Va	50R	NE	B	69E	CG	4.07			1			1
Va	50R	NE	B	70R	CA	3.64			1			1
Va	50R	NE	B	70R	CB	3.82			1			1
Va	50R	NE	B	70R	N	3.61			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CA	3.84			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CB	3.28			1			1
Va	50R	NH1	B	70R	CG	3.34			1			1
Va	50R	NH2	B	69E	CB	4.49			1			1
Va	50R	NH2	B	69E	CG	4.00			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	CA	4.04			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	CB	3.37			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	CG	4.17			1			1
Va	50R	NH2	B	70R	N	4.02			1			1
Va	51S	OG	B	77T	CG2	4.10			1			1
Va	52N	CB	B	73A	CA	4.49		1				1
Va	52N	CB	B	73A	CB	3.97		1				1
Va	52N	CG	B	73A	CA	4.14		1				1
Va	52N	CG	B	73A	CB	4.03		1				1
Va	52N	N	B	77T	CG2	4.45			1			1
Va	52N	ND2	B	73A	CA	3.63			1			1
Va	52N	ND2	B	73A	CB	3.49			1			1
Va	52N	ND2	B	73A	N	4.14			1			1
Va	52N	OD1	B	76D	CB	4.28			1			1
Va	52N	OD1	B	76D	OD2	3.90			1			1
Va	56K	CD	B	69E	OE1	4.08			1			1
Va	56K	CE	B	69E	CD	4.17		1				1
Va	56K	CE	B	69E	OE1	3.32			1			1
Va	56K	CE	B	69E	OE2	4.35			1			1
Va	56K	NZ	B	69E	CD	3.73			1			1
Va	56K	NZ	B	69E	OE1	2.60	1					1
Va	56K	NZ	B	69E	OE2	4.32			1			1
Va	93R	CD	P	-1E	OE1	3.41			1		1	

Va	93R	NE	P	-1E	OE1	4.08		1	1
Va	94R	CD	B	77T	CB	3.85		1	1
Va	94R	CD	B	77T	OG1	3.28		1	1
Va	94R	CZ	B	70R	O	4.37		1	1
Va	94R	CZ	B	73A	CB	4.18		1	1
Va	94R	CZ	B	77T	CB	3.85		1	1
Va	94R	CZ	B	77T	CG2	3.80		1	1
Va	94R	CZ	B	77T	OG1	3.24		1	1
Va	94R	NE	B	77T	CB	3.31		1	1
Va	94R	NE	B	77T	CG2	3.58		1	1
Va	94R	NE	B	77T	OG1	2.93	1		1
Va	94R	NH1	B	73A	C	4.21		1	1
Va	94R	NH1	B	73A	CA	4.35		1	1
Va	94R	NH1	B	73A	CB	3.27		1	1
Va	94R	NH1	B	73A	O	4.23		1	1
Va	94R	NH1	B	77T	CB	3.95		1	1
Va	94R	NH1	B	77T	CG2	3.38		1	1
Va	94R	NH1	B	77T	OG1	3.61		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	C	4.22		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	CA	4.12		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	CB	4.45		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	CD	4.37		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	CG	3.80		1	1
Va	94R	NH2	B	70R	O	3.42	1		1
Va	94R	NH2	B	73A	CB	4.38		1	1
Va	94R	NH2	B	74E	CG	4.49		1	1
Va	94R	NH2	B	77T	OG1	3.89		1	1
Va	95G	C	P	3Y	O	3.93		1	1
Va	95G	O	P	3Y	O	3.41	1		1
Va	95G	O	P	5V	CG2	4.33		1	1
Va	96S	C	P	2L	CD2	4.34		1	1
Va	96S	C	P	3Y	CE2	4.15		1	1
Va	96S	CA	P	2L	CD2	4.17		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	CD2	3.34		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	CE2	3.15		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	CG	4.10		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	CZ	3.81		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	N	4.27		1	1
Va	96S	CA	P	3Y	OH	4.36		1	1
Va	96S	CB	P	-1E	OE2	3.96		1	1
Va	96S	CB	P	1R	O	3.96		1	1
Va	96S	CB	P	2L	C	4.31		1	1
Va	96S	CB	P	2L	CA	3.84		1	1
Va	96S	CB	P	2L	CD2	3.88		1	1
Va	96S	CB	P	3Y	CB	4.46		1	1
Va	96S	CB	P	3Y	CD2	2.97		1	1
Va	96S	CB	P	3Y	CE2	3.25		1	1

Va	96S	CB	P	3Y	CG	3.87	1		1
Va	96S	CB	P	3Y	CZ	4.32	1		1
Va	96S	CB	P	3Y	N	3.67		1	1
Va	96S	N	P	2L	C	4.46		1	1
Va	96S	N	P	2L	CA	4.07		1	1
Va	96S	N	P	2L	CB	3.94		1	1
Va	96S	N	P	2L	CD2	3.74		1	1
Va	96S	N	P	2L	CG	4.26		1	1
Va	96S	N	P	3Y	CD2	3.95		1	1
Va	96S	N	P	3Y	CE2	4.01		1	1
Va	96S	N	P	3Y	CG	4.25		1	1
Va	96S	N	P	3Y	CZ	4.38		1	1
Va	96S	N	P	3Y	N	3.79		1	1
Va	96S	N	P	3Y	O	3.89		1	1
Va	96S	O	P	-1E	OE1	4.21		1	1
Va	96S	O	P	2L	CD2	4.00		1	1
Va	96S	OG	A	55E	CB	4.37		1	1
Va	96S	OG	A	55E	O	3.85		1	1
Va	96S	OG	A	58G	CA	4.25		1	1
Va	96S	OG	P	-1E	OE2	3.70		1	1
Va	96S	OG	P	1R	O	4.35		1	1
Va	96S	OG	P	3Y	CD2	3.12		1	1
Va	96S	OG	P	3Y	CE2	3.14		1	1
Va	96S	OG	P	3Y	CG	4.34		1	1
Va	96S	OG	P	3Y	CZ	4.39		1	1
Va	97G	C	A	55E	CB	4.34	1		1
Va	97G	N	P	3Y	CE2	3.95		1	1
Va	97G	O	A	57Q	C	4.13		1	1
Va	97G	O	A	57Q	CB	4.18		1	1
Va	97G	O	A	58G	CA	3.91		1	1
Va	97G	O	A	58G	N	3.71		1	1
Va	97G	O	P	3Y	CE2	4.28		1	1
Va	98G	C	A	55E	OE1	4.06		1	1
Va	98G	CA	A	55E	CB	4.04	1		1
Va	98G	CA	A	55E	CD	4.30	1		1
Va	98G	CA	A	55E	CG	4.08	1		1
Va	98G	CA	A	55E	OE1	4.07		1	1
Va	98G	N	A	55E	CB	4.09		1	1
Va	98G	N	A	57Q	CB	4.44		1	1
Va	99S	CA	A	55E	OE1	4.44		1	1
Va	99S	CB	A	55E	OE1	4.25		1	1
Va	99S	N	A	55E	CD	4.43		1	1
Va	99S	N	A	55E	OE1	3.56		1	1
Va	101Y	CE1	P	3Y	OH	4.50		1	1
Vb	26N	CB	A	68H	CE1	3.85	1		1
Vb	26N	CB	A	68H	ND1	4.03		1	1
Vb	26N	CG	A	68H	CE1	3.79	1		1

Vb	26N	CG	A	68H	ND1	3.56		1	1
Vb	26N	ND2	A	68H	ND1	3.97		1	1
Vb	26N	OD1	A	68H	CE1	3.68		1	1
Vb	26N	OD1	A	68H	ND1	3.52		1	1
Vb	28N	CB	A	61Q	OE1	4.05		1	1
Vb	28N	CG	A	61Q	OE1	3.38		1	1
Vb	28N	CG	A	64A	CB	3.62	1		1
Vb	28N	ND2	A	61Q	CA	3.75		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	CB	4.22		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	CD	3.53		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	CG	4.44		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	NE2	4.43		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	O	4.28		1	1
Vb	28N	ND2	A	61Q	OE1	2.38	1		1
Vb	28N	ND2	A	64A	CB	3.47		1	1
Vb	28N	OD1	A	61Q	OE1	4.19		1	1
Vb	28N	OD1	A	64A	CB	3.32		1	1
Vb	29N	CG	A	61Q	CD	4.49	1		1
Vb	29N	CG	A	61Q	NE2	4.35		1	1
Vb	29N	CG	A	61Q	OE1	3.91		1	1
Vb	29N	ND2	A	61Q	CD	4.36		1	1
Vb	29N	ND2	A	61Q	OE1	3.67		1	1
Vb	29N	OD1	A	61Q	CD	3.78		1	1
Vb	29N	OD1	A	61Q	NE2	3.47	1		1
Vb	29N	OD1	A	61Q	OE1	3.31	1		1
Vb	48Y	CB	A	57Q	CD	3.74	1		1
Vb	48Y	CB	A	57Q	NE2	3.73		1	1
Vb	48Y	CB	A	57Q	OE1	3.38		1	1
Vb	48Y	CB	A	61Q	NE2	4.41		1	1
Vb	48Y	CD1	A	57Q	CD	4.21	1		1
Vb	48Y	CD1	A	57Q	NE2	3.93		1	1
Vb	48Y	CD1	A	61Q	NE2	3.65		1	1
Vb	48Y	CD2	A	57Q	CD	3.32	1		1
Vb	48Y	CD2	A	57Q	CG	3.67	1		1
Vb	48Y	CD2	A	57Q	NE2	3.85		1	1
Vb	48Y	CD2	A	57Q	OE1	3.27		1	1
Vb	48Y	CE1	A	61Q	NE2	4.16		1	1
Vb	48Y	CE2	A	57Q	CD	3.93	1		1
Vb	48Y	CE2	A	57Q	CG	3.76	1		1
Vb	48Y	CE2	A	57Q	NE2	4.44		1	1
Vb	48Y	CE2	A	57Q	OE1	4.18		1	1
Vb	48Y	CG	A	57Q	CD	3.51	1		1
Vb	48Y	CG	A	57Q	CG	4.25	1		1
Vb	48Y	CG	A	57Q	NE2	3.58		1	1
Vb	48Y	CG	A	57Q	OE1	3.51		1	1
Vb	48Y	CG	A	61Q	NE2	4.18		1	1
Vb	48Y	CZ	A	57Q	CG	4.38	1		1

Vb	52S	OG	A	39K	NZ	4.44		1	1				
Vb	94L	C	B	67Y	OH	4.09		1		1			
vb	94L	C	P	8G	CA	3.82		1		1			
Vb	94L	C	P	8G	N	3.59			1	1			
Vb	94L	CA	A	65A	CB	4.10		1		1			
Vb	94L	CB	A	65A	CA	3.96		1		1			
Vb	94L	CB	A	65A	CB	3.93		1		1			
vb	94L	CB	P	8G	CA	4.32		1			1		
Vb	94L	CD1	A	68H	CE1	4.45		1		1			
Vb	94L	CD2	A	64A	O	4.45			1	1			
Vb	94L	CD2	A	68H	CB	3.73		1		1			
Vb	94L	CD2	A	68H	CD2	4.14		1		1			
Vb	94L	CD2	A	68H	CE1	3.89		1		1			
Vb	94L	CD2	A	68H	CG	3.50		1		1			
Vb	94L	CD2	A	68H	ND1	3.32			1	1			
Vb	94L	CD2	A	68H	NE2	4.35			1	1			
Vb	94L	O	B	67Y	OH	3.41	1				1		
Vb	94L	O	P	8G	C	4.14			1		1		
Vb	94L	O	P	8G	CA	3.17			1		1		
Vb	94L	O	P	8G	N	3.26	1				1		
Vb	95G	C	B	70R	NH1	4.44			1		1		
Vb	95G	CA	P	6C	O	4.16			1		1		
Vb	95G	N	B	67Y	CE1	4.15			1		1		
Vb	95G	N	B	67Y	CZ	4.44			1		1		
Vb	95G	N	B	67Y	OH	3.89			1		1		
Vb	95G	N	P	6C	O	4.36			1		1		
Vb	95G	N	P	8G	CA	4.31			1		1		
Vb	95G	N	P	8G	N	3.61			1		1		
Vb	95G	O	B	67Y	CE1	4.21			1		1		
Vb	95G	O	B	70R	CZ	4.29			1		1		
Vb	95G	O	B	70R	NE	4.47			1		1		
Vb	95G	O	B	70R	NH1	3.31	1				1		
Vb	95G	O	P	5V	CG1	3.98			1		1		
Vb	96G	O	B	64Q	O	4.48			1		1		
Vb	96G	O	B	64Q	OE1	4.32			1		1		
Vb	96G	O	B	67Y	CD1	3.87			1		1		
Vb	96G	O	B	67Y	CE1	3.53			1		1		
Vb	97D	OD1	B	70R	CB	4.32			1		1		
Vb	97D	OD1	B	70R	CD	4.41			1		1		
Vb	97D	OD1	B	70R	CG	3.48			1		1		
Vb	97D	OD1	B	70R	NE	4.16			1		1		
Vb	100Y	CZ	B	64Q	NE2	4.49			1		1		
Vb	100Y	OH	B	64Q	CD	4.35			1		1		
Vb	100Y	OH	B	64Q	NE2	3.21	1				1		
Totals								11	58	159	81	59	88
									228				228

Contacts of IAg7-8G9E with 8F10 TCR

pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	TCR V	TCR AA	TCR atom	dist Å	Hbond salt	VDW VDW-C	VDW other	MHC α	PEP	MHC β
A	39K	NZ	Vb	52S	OG	4.44			1	1		
A	55E	CB	Va	96S	OG	4.37			1	1		
A	55E	CB	Va	97G	C	4.34		1		1		
A	55E	CB	Va	98G	CA	4.04		1		1		
A	55E	CB	Va	98G	N	4.09			1	1		
A	55E	CD	Va	98G	CA	4.30		1		1		
A	55E	CD	Va	99S	N	4.43			1	1		
A	55E	CG	Va	98G	CA	4.08		1		1		
A	55E	O	Va	96S	OG	3.85			1	1		
A	55E	OE1	Va	98G	C	4.06			1	1		
A	55E	OE1	Va	98G	CA	4.07			1	1		
A	55E	OE1	Va	99S	CA	4.44			1	1		
A	55E	OE1	Va	99S	CB	4.25			1	1		
A	55E	OE1	Va	99S	N	3.56			1	1		
A	57Q	C	Va	97G	O	4.13			1	1		
A	57Q	CB	Va	97G	O	4.18			1	1		
A	57Q	CB	Va	98G	N	4.44			1	1		
A	57Q	CD	Vb	48Y	CB	3.74		1		1		
A	57Q	CD	Vb	48Y	CD1	4.21		1		1		
A	57Q	CD	Vb	48Y	CD2	3.32		1		1		
A	57Q	CD	Vb	48Y	CE2	3.93		1		1		
A	57Q	CD	Vb	48Y	CG	3.51		1		1		
A	57Q	CG	Vb	48Y	CD2	3.67		1		1		
A	57Q	CG	Vb	48Y	CE2	3.76		1		1		
A	57Q	CG	Vb	48Y	CG	4.25		1		1		
A	57Q	CG	Vb	48Y	CZ	4.38		1		1		
A	57Q	NE2	Vb	48Y	CB	3.73			1	1		
A	57Q	NE2	Vb	48Y	CD1	3.93			1	1		
A	57Q	NE2	Vb	48Y	CD2	3.85			1	1		
A	57Q	NE2	Vb	48Y	CE2	4.44			1	1		
A	57Q	NE2	Vb	48Y	CG	3.58			1	1		
A	57Q	OE1	Vb	48Y	CB	3.38			1	1		
A	57Q	OE1	Vb	48Y	CD2	3.27			1	1		
A	57Q	OE1	Vb	48Y	CE2	4.18			1	1		
A	57Q	OE1	Vb	48Y	CG	3.51			1	1		
A	58G	CA	Va	96S	OG	4.25			1	1		
A	58G	CA	Va	97G	O	3.91			1	1		
A	58G	N	Va	97G	O	3.71			1	1		
A	61Q	CA	Vb	28N	ND2	3.75			1	1		
A	61Q	CB	Vb	28N	ND2	4.22			1	1		
A	61Q	CD	Vb	28N	ND2	3.53			1	1		
A	61Q	CD	Vb	29N	CG	4.49		1		1		

A	61Q	CD	Vb	29N	ND2	4.36		1	1
A	61Q	CD	Vb	29N	OD1	3.78		1	1
A	61Q	CG	Vb	28N	ND2	4.44		1	1
A	61Q	NE2	Vb	28N	ND2	4.43		1	1
A	61Q	NE2	Vb	29N	CG	4.35		1	1
A	61Q	NE2	Vb	29N	OD1	3.47	1		1
A	61Q	NE2	Vb	48Y	CB	4.41		1	1
A	61Q	NE2	Vb	48Y	CD1	3.65		1	1
A	61Q	NE2	Vb	48Y	CE1	4.16		1	1
A	61Q	NE2	Vb	48Y	CG	4.18		1	1
A	61Q	O	Vb	28N	ND2	4.28		1	1
A	61Q	OE1	Vb	28N	CB	4.05		1	1
A	61Q	OE1	Vb	28N	CG	3.38		1	1
A	61Q	OE1	Vb	28N	ND2	2.38	1		1
A	61Q	OE1	Vb	28N	OD1	4.19		1	1
A	61Q	OE1	Vb	29N	CG	3.91		1	1
A	61Q	OE1	Vb	29N	ND2	3.67		1	1
A	61Q	OE1	Vb	29N	OD1	3.31	1		1
A	64A	CB	Vb	28N	CG	3.62		1	1
A	64A	CB	Vb	28N	ND2	3.47		1	1
A	64A	CB	Vb	28N	OD1	3.32		1	1
A	64A	O	Vb	94L	CD2	4.45		1	1
A	65A	CA	Vb	94L	CB	3.96		1	1
A	65A	CB	Vb	94L	CA	4.10		1	1
A	65A	CB	Vb	94L	CB	3.93		1	1
A	68H	CB	Vb	94L	CD2	3.73		1	1
A	68H	CD2	Vb	94L	CD2	4.14		1	1
A	68H	CE1	Vb	26N	CB	3.85		1	1
A	68H	CE1	Vb	26N	CG	3.79		1	1
A	68H	CE1	Vb	26N	OD1	3.68		1	1
A	68H	CE1	Vb	94L	CD1	4.45		1	1
A	68H	CE1	Vb	94L	CD2	3.89		1	1
A	68H	CG	Vb	94L	CD2	3.50		1	1
A	68H	ND1	Vb	26N	CB	4.03		1	1
A	68H	ND1	Vb	26N	CG	3.56		1	1
A	68H	ND1	Vb	26N	ND2	3.97		1	1
A	68H	ND1	Vb	26N	OD1	3.52		1	1
A	68H	ND1	Vb	94L	CD2	3.32		1	1
A	68H	NE2	Vb	94L	CD2	4.35		1	1
B	64Q	CD	Vb	100Y	OH	4.35		1	1
B	64Q	NE2	Vb	100Y	CZ	4.49		1	1
B	64Q	NE2	Vb	100Y	OH	3.21	1		1
B	64Q	O	Vb	96G	O	4.48		1	1
B	64Q	OE1	Vb	96G	O	4.32		1	1
B	67Y	CD1	Vb	96G	O	3.87		1	1
B	67Y	CE1	Vb	95G	N	4.15		1	1
B	67Y	CE1	Vb	95G	O	4.21		1	1

B	67Y	CE1	Vb	96G	O	3.53		1	1
B	67Y	CZ	Vb	95G	N	4.44		1	1
B	67Y	OH	Vb	94L	C	4.09		1	1
B	67Y	OH	Vb	94L	O	3.41	1		1
B	67Y	OH	Vb	95G	N	3.89		1	1
B	69E	CB	Va	50R	NH2	4.49		1	1
B	69E	CD	Va	56K	CE	4.17	1		1
B	69E	CD	Va	56K	NZ	3.73		1	1
B	69E	CG	Va	50R	CZ	4.48	1		1
B	69E	CG	Va	50R	NE	4.07		1	1
B	69E	CG	Va	50R	NH2	4.00		1	1
B	69E	OE1	Va	48D	OD1	3.80		1	1
B	69E	OE1	Va	56K	CD	4.08		1	1
B	69E	OE1	Va	56K	CE	3.32		1	1
B	69E	OE1	Va	56K	NZ	2.60	1		1
B	69E	OE2	Va	56K	CE	4.35		1	1
B	69E	OE2	Va	56K	NZ	4.32		1	1
B	70R	C	Va	94R	NH2	4.22		1	1
B	70R	CA	Va	50R	CD	3.95	1		1
B	70R	CA	Va	50R	CZ	3.62	1		1
B	70R	CA	Va	50R	NE	3.64		1	1
B	70R	CA	Va	50R	NH1	3.84		1	1
B	70R	CA	Va	50R	NH2	4.04		1	1
B	70R	CA	Va	94R	NH2	4.12		1	1
B	70R	CB	Va	50R	CD	4.46	1		1
B	70R	CB	Va	50R	CZ	3.25	1		1
B	70R	CB	Va	50R	NE	3.82		1	1
B	70R	CB	Va	50R	NH1	3.28		1	1
B	70R	CB	Va	50R	NH2	3.37		1	1
B	70R	CB	Va	94R	NH2	4.45		1	1
B	70R	CB	Vb	97D	OD1	4.32		1	1
B	70R	CD	Va	94R	NH2	4.37		1	1
B	70R	CD	Vb	97D	OD1	4.41		1	1
B	70R	CG	Va	50R	CZ	3.86	1		1
B	70R	CG	Va	50R	NH1	3.34		1	1
B	70R	CG	Va	50R	NH2	4.17		1	1
B	70R	CG	Va	94R	NH2	3.80		1	1
B	70R	CG	Vb	97D	OD1	3.48		1	1
B	70R	CZ	Vb	95G	O	4.29		1	1
B	70R	N	Va	50R	CD	4.15		1	1
B	70R	N	Va	50R	CZ	3.86		1	1
B	70R	N	Va	50R	NE	3.61		1	1
B	70R	N	Va	50R	NH2	4.02		1	1
B	70R	NE	Vb	95G	O	4.47		1	1
B	70R	NE	Vb	97D	OD1	4.16		1	1
B	70R	NH1	Vb	95G	C	4.44		1	1
B	70R	NH1	Vb	95G	O	3.31	1		1

B	70R	O	Va	94R	CZ	4.37		1	1
B	70R	O	Va	94R	NH2	3.42	1		1
B	73A	C	Va	94R	NH1	4.21		1	1
B	73A	CA	Va	52N	CB	4.49	1		1
B	73A	CA	Va	52N	CG	4.14	1		1
B	73A	CA	Va	52N	ND2	3.63		1	1
B	73A	CA	Va	94R	NH1	4.35		1	1
B	73A	CB	Va	50R	CD	4.02	1		1
B	73A	CB	Va	52N	CB	3.97	1		1
B	73A	CB	Va	52N	CG	4.03	1		1
B	73A	CB	Va	52N	ND2	3.49		1	1
B	73A	CB	Va	94R	CZ	4.18	1		1
B	73A	CB	Va	94R	NH1	3.27		1	1
B	73A	CB	Va	94R	NH2	4.38		1	1
B	73A	N	Va	52N	ND2	4.14		1	1
B	73A	O	Va	94R	NH1	4.23		1	1
B	74E	CG	Va	94R	NH2	4.49		1	1
B	76D	CB	Va	52N	OD1	4.28		1	1
B	76D	OD2	Va	52N	OD1	3.90		1	1
B	77T	CB	Va	94R	CD	3.85	1		1
B	77T	CB	Va	94R	CZ	3.85	1		1
B	77T	CB	Va	94R	NE	3.31		1	1
B	77T	CB	Va	94R	NH1	3.95		1	1
B	77T	CG2	Va	51S	OG	4.10		1	1
B	77T	CG2	Va	52N	N	4.45		1	1
B	77T	CG2	Va	94R	CZ	3.80	1		1
B	77T	CG2	Va	94R	NE	3.58		1	1
B	77T	CG2	Va	94R	NH1	3.38		1	1
B	77T	OG1	Va	94R	CD	3.28		1	1
B	77T	OG1	Va	94R	CZ	3.24		1	1
B	77T	OG1	Va	94R	NE	2.93	1		1
B	77T	OG1	Va	94R	NH1	3.61		1	1
B	77T	OG1	Va	94R	NH2	3.89		1	1
P	-1E	OE1	Va	93R	CD	3.41		1	1
P	-1E	OE1	Va	93R	NE	4.08		1	1
P	-1E	OE1	Va	96S	O	4.21		1	1
P	-1E	OE2	Va	96S	CB	3.96		1	1
P	-1E	OE2	Va	96S	OG	3.70		1	1
P	1R	O	Va	96S	CB	3.96		1	1
P	1R	O	Va	96S	OG	4.35		1	1
P	2L	C	Va	96S	CB	4.31	1		1
P	2L	C	Va	96S	N	4.46		1	1
P	2L	CA	Va	96S	CB	3.84	1		1
P	2L	CA	Va	96S	N	4.07		1	1
P	2L	CB	Va	96S	N	3.94		1	1
P	2L	CD1	Va	30N	ND2	4.46		1	1
P	2L	CD2	Va	96S	C	4.34	1		1

P	2L	CD2	Va	96S	CA	4.17		1			1	
P	2L	CD2	Va	96S	CB	3.88		1			1	
P	2L	CD2	Va	96S	N	3.74			1		1	
P	2L	CD2	Va	96S	O	4.00			1		1	
P	2L	CG	Va	96S	N	4.26			1		1	
P	3Y	CB	Va	96S	CB	4.46		1			1	
P	3Y	CD2	Va	96S	CA	3.34		1			1	
P	3Y	CD2	Va	96S	CB	2.97		1			1	
P	3Y	CD2	Va	96S	N	3.95			1		1	
P	3Y	CD2	Va	96S	OG	3.12			1		1	
P	3Y	CE2	Va	96S	C	4.15		1			1	
P	3Y	CE2	Va	96S	CA	3.15		1			1	
P	3Y	CE2	Va	96S	CB	3.25		1			1	
P	3Y	CE2	Va	96S	N	4.01			1		1	
P	3Y	CE2	Va	96S	OG	3.14			1		1	
P	3Y	CE2	Va	97G	N	3.95			1		1	
P	3Y	CE2	Va	97G	O	4.28			1		1	
P	3Y	CG	Va	96S	CA	4.10		1			1	
P	3Y	CG	Va	96S	CB	3.87		1			1	
P	3Y	CG	Va	96S	N	4.25			1		1	
P	3Y	CG	Va	96S	OG	4.34			1		1	
P	3Y	CZ	Va	96S	CA	3.81		1			1	
P	3Y	CZ	Va	96S	CB	4.32		1			1	
P	3Y	CZ	Va	96S	N	4.38			1		1	
P	3Y	CZ	Va	96S	OG	4.39			1		1	
P	3Y	N	Va	96S	CA	4.27			1		1	
P	3Y	N	Va	96S	CB	3.67			1		1	
P	3Y	N	Va	96S	N	3.79			1		1	
P	3Y	O	Va	95G	C	3.93			1		1	
P	3Y	O	Va	95G	O	3.41	1				1	
P	3Y	O	Va	96S	N	3.89			1		1	
P	3Y	OH	Va	101Y	CE1	4.50			1		1	
P	3Y	OH	Va	96S	CA	4.36			1		1	
P	5V	CG1	vb	95G	O	3.98			1		1	
P	5V	CG2	Va	95G	O	4.33			1		1	
P	6C	O	vb	95G	CA	4.16			1		1	
P	6C	O	vb	95G	N	4.36			1		1	
P	8G	C	vb	94L	O	4.14			1		1	
P	8G	CA	vb	94L	C	3.82		1			1	
P	8G	CA	vb	94L	CB	4.32		1			1	
P	8G	CA	vb	94L	O	3.17			1		1	
P	8G	CA	vb	95G	N	4.31			1		1	
P	8G	N	vb	94L	C	3.59			1		1	
P	8G	N	vb	94L	O	3.26	1				1	
P	8G	N	vb	95G	N	3.61			1		1	
Totals							11	58	159	81	59	88
									228			228

Contacts of T1D3 TCR with DQ8-8E9E11ss

TCR V	TCR AA	TCR atom	pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	dist Å	Hbond salt	VDW C-C	VDW other	MHCa	PEP	MHCb
Va 26T	C	C	P	-1E	CD	4.20		1			1	
Va 26T	C	C	P	-1E	OE1	3.47			1		1	
Va 26T	C	C	P	-1E	OE2	4.13			1		1	
Va 26T	CA	CA	P	-1E	CD	4.16		1			1	
Va 26T	CA	CA	P	-1E	OE1	3.28			1		1	
Va 26T	CA	CA	P	-1E	OE2	4.24			1		1	
Va 26T	CB	CB	P	-1E	CD	4.33		1			1	
Va 26T	CB	CB	P	-1E	OE1	3.15			1		1	
Va 26T	CG2	CG2	P	-1E	OE1	4.09			1		1	
Va 26T	OG1	OG1	P	-1E	OE1	4.12			1		1	
Va 27S	CA	CA	P	-1E	CD	4.32		1			1	
Va 27S	CA	CA	P	-1E	OE1	3.92			1		1	
Va 27S	CA	CA	P	-1E	OE2	4.28			1		1	
Va 27S	CB	CB	B	81H	CE1	3.88		1				1
Va 27S	CB	CB	B	81H	NE2	4.24			1			1
Va 27S	CB	CB	P	-1E	CB	4.50		1			1	
Va 27S	CB	CB	P	-1E	CD	4.05		1			1	
Va 27S	CB	CB	P	-1E	O	4.16			1		1	
Va 27S	CB	CB	P	-1E	OE1	4.01			1		1	
Va 27S	CB	CB	P	-1E	OE2	4.00			1		1	
Va 27S	CB	CB	P	2L	CD1	4.35		1			1	
Va 27S	CB	CB	P	2L	CD2	4.34		1			1	
Va 27S	N	N	P	-1E	CD	3.39			1		1	
Va 27S	N	N	P	-1E	OE1	2.81	1				1	
Va 27S	N	N	P	-1E	OE2	3.40	1				1	
Va 27S	O	O	P	-1E	OE1	4.30			1		1	
Va 27S	OG	OG	B	81H	CE1	3.44			1			1
Va 27S	OG	OG	P	-1E	CB	4.33			1		1	
Va 27S	OG	OG	P	-1E	CD	3.79			1		1	
Va 27S	OG	OG	P	-1E	O	3.77			1		1	
Va 27S	OG	OG	P	-1E	OE1	4.17			1		1	
Va 27S	OG	OG	P	-1E	OE2	3.33	1				1	
Va 28I	C	C	P	2L	CD1	4.45		1			1	
Va 28I	O	O	P	2L	CD1	3.98			1		1	
Va 29N	CB	CB	B	77T	OG1	4.41			1			1
Va 29N	CG	CG	B	77T	CB	4.35		1				1
Va 29N	CG	CG	B	77T	OG1	4.03			1			1
Va 29N	ND2	ND2	B	77T	C	4.03			1			1
Va 29N	ND2	ND2	B	77T	CA	4.26			1			1
Va 29N	ND2	ND2	B	77T	CB	3.23			1			1
Va 29N	ND2	ND2	B	77T	CG2	4.29			1			1
Va 29N	ND2	ND2	B	77T	O	3.83			1			1

Va 29N ND2	B	77T OG1	2.87	1		1
Va 29N ND2	B	78V CG2	3.70		1	1
Va 29N ND2	B	81H NE2	3.90		1	1
Va 29N ND2	P	199V CA	4.47		1	1
Va 29N ND2	P	199V CG1	3.46		1	1
Va 29N ND2	P	-1E CA	4.43		1	1
Va 29N ND2	P	-1E N	3.74		1	1
Va 29N ND2	P	2L CD1	4.15		1	1
Va 29N O	B	77T CG2	4.41		1	1
Va 29N OD1	P	2L CD1	4.39		1	1
Va 29N OD1	P	2L CD2	4.32		1	1
Va 47L CD1	B	66E OE2	4.18		1	1
Va 47L CD2	B	69E OE2	4.35		1	1
Va 49R CD	B	69E CD	4.21	1		1
Va 49R CD	B	69E CG	3.93	1		1
Va 49R CD	B	69E O	4.17		1	1
Va 49R CD	B	69E OE2	3.75		1	1
Va 49R CD	B	73A CB	3.96	1		1
Va 49R CG	B	69E OE2	4.13		1	1
Va 49R CZ	B	69E C	4.34	1		1
Va 49R CZ	B	69E CD	3.72	1		1
Va 49R CZ	B	69E CG	3.51	1		1
Va 49R CZ	B	69E OE1	4.27		1	1
Va 49R CZ	B	69E OE2	3.90		1	1
Va 49R CZ	B	70R CA	3.80	1		1
Va 49R CZ	B	70R CB	4.16	1		1
Va 49R CZ	B	70R N	3.91		1	1
Va 49R NE	B	69E C	4.18		1	1
Va 49R NE	B	69E CB	4.44		1	1
Va 49R NE	B	69E CD	3.14		1	1
Va 49R NE	B	69E CG	3.00		1	1
Va 49R NE	B	69E O	4.16		1	1
Va 49R NE	B	69E OE1	4.02		1	1
Va 49R NE	B	69E OE2	2.99	1		1
Va 49R NE	B	70R CA	4.29		1	1
Va 49R NE	B	70R N	4.16		1	1
Va 49R NH1	B	70R CA	3.70		1	1
Va 49R NH1	B	70R CB	3.88		1	1
Va 49R NH1	B	70R CG	4.09		1	1
Va 49R NH1	B	70R N	4.29		1	1
Va 49R NH2	B	66E CG	4.07		1	1
Va 49R NH2	B	66E O	3.59		1	1
Va 49R NH2	B	69E CD	3.39		1	1
Va 49R NH2	B	69E CG	3.36		1	1
Va 49R NH2	B	69E OE1	3.54		1	1
Va 49R NH2	B	69E OE2	3.90	1		1
Va 49R NH2	B	70R CA	4.06		1	1

Va 49R NH2	B	70R CB	4.11		1	1
Va 49R NH2	B	70R N	3.92		1	1
Va 50S CB	B	77T CG2	4.40	1		1
Va 50S N	B	77T CG2	4.42		1	1
Va 50S OG	B	77T CA	4.11		1	1
Va 50S OG	B	77T CB	3.49		1	1
Va 50S OG	B	77T CG2	3.14		1	1
Va 51N CB	B	76D CB	3.67	1		1
Va 51N CB	B	76D CG	4.15	1		1
Va 51N CB	B	76D OD2	3.80		1	1
Va 51N CB	B	77T CG2	4.35	1		1
Va 51N CG	B	73A CB	4.12	1		1
Va 51N CG	B	76D CB	4.17	1		1
Va 51N CG	B	76D OD2	3.95		1	1
Va 51N CG	B	77T CG2	4.32	1		1
Va 51N N	B	77T CG2	4.10		1	1
Va 51N ND2	B	73A CA	3.97		1	1
Va 51N ND2	B	73A CB	3.73		1	1
Va 51N ND2	B	73A O	4.19		1	1
Va 51N ND2	B	76D CB	3.84		1	1
Va 51N ND2	B	76D CG	3.92		1	1
Va 51N ND2	B	76D OD2	3.14	1		1
Va 51N OD1	B	73A CB	3.93		1	1
Va 51N OD1	B	77T CG2	4.34		1	1
Va 92A C	A	58F CZ	4.37	1		1
Va 92A O	A	58F CE1	3.79		1	1
Va 92A O	A	58F CZ	3.39		1	1
Va 93G C	A	58F CE1	3.87	1		1
Va 93G C	A	58F CE2	4.37	1		1
Va 93G C	A	58F CZ	3.69	1		1
Va 93G C	P	2L CD2	4.39	1		1
Va 93G C	P	3Y CE1	4.31	1		1
Va 93G CA	A	58F CE1	4.46	1		1
Va 93G CA	A	58F CZ	3.88	1		1
Va 93G CA	P	2L CD2	3.60	1		1
Va 93G O	A	58F CE1	4.09		1	1
Va 93G O	A	58F CE2	4.18		1	1
Va 93G O	A	58F CZ	3.86		1	1
Va 93G O	P	2L CD2	4.13		1	1
Va 93G O	P	3Y CD1	3.87		1	1
Va 93G O	P	3Y CE1	3.36		1	1
Va 93G O	P	3Y CZ	4.44		1	1
Va 94Y C	P	3Y CE1	3.98	1		1
Va 94Y C	P	3Y CZ	4.16	1		1
Va 94Y C	P	3Y OH	3.51		1	1
Va 94Y CA	A	58F CD1	4.24	1		1
Va 94Y CA	A	58F CE1	3.93	1		1

Va 94Y CA	P	3Y CE1	4.04		1		1
Va 94Y CA	P	3Y CZ	4.44		1		1
Va 94Y CA	P	3Y OH	3.83			1	1
Va 94Y CD1	A	58F CD1	3.99		1		1
Va 94Y CD1	A	58F CE1	4.13		1		1
Va 94Y CD1	A	61T OG1	3.93			1	1
Va 94Y CD2	A	58F CE1	3.96		1		1
Va 94Y CE1	A	57Q CB	4.45		1		1
Va 94Y CE1	A	57Q CG	3.74		1		1
Va 94Y CE1	A	57Q O	4.45			1	1
Va 94Y CE1	A	58F CD1	4.14		1		1
Va 94Y CE1	A	58F CE1	4.32		1		1
Va 94Y CE1	A	61T OG1	3.77			1	1
Va 94Y CE2	A	58F CE1	4.14		1		1
Va 94Y CG	A	58F CD1	4.26		1		1
Va 94Y CG	A	58F CE1	3.98		1		1
Va 94Y CZ	A	57Q CB	4.42		1		1
Va 94Y CZ	A	57Q CG	3.86		1		1
Va 94Y CZ	A	58F CE1	4.32		1		1
Va 94Y N	A	58F CE1	3.80			1	1
Va 94Y N	A	58F CZ	4.05			1	1
Va 94Y O	P	3Y CE1	3.43			1	1
Va 94Y O	P	3Y CE2	4.43			1	1
Va 94Y O	P	3Y CZ	3.28			1	1
Va 94Y O	P	3Y OH	2.55	1			1
Va 94Y O	P	5V CG2	3.66			1	1
Va 94Y OH	A	55D OD2	4.25			1	1
Va 94Y OH	A	57Q CB	3.68			1	1
Va 94Y OH	A	57Q CD	4.43			1	1
Va 94Y OH	A	57Q CG	3.11			1	1
Va 95N C	B	70R CD	4.36		1		1
Va 95N C	B	70R NH1	4.17			1	1
Va 95N C	P	5V CG2	4.17		1		1
Va 95N CB	B	70R CD	4.27		1		1
Va 95N CB	P	5V CG2	3.80		1		1
Va 95N CG	B	70R CD	3.56		1		1
Va 95N CG	B	70R CG	3.79		1		1
Va 95N ND2	B	70R CD	3.68			1	1
Va 95N ND2	B	70R CG	3.84			1	1
Va 95N O	B	70R CD	3.24			1	1
Va 95N O	B	70R CZ	3.84			1	1
Va 95N O	B	70R NE	3.88			1	1
Va 95N O	B	70R NH1	3.02	1			1
Va 95N O	P	5V CG2	3.84			1	1
Va 95N OD1	B	70R CD	3.57			1	1
Va 95N OD1	B	70R CG	3.41			1	1
Va 95N OD1	B	74E CG	4.43			1	1

Va 95N OD1	B	74E OE2	4.43		1	1
Va 96Q CA	B	70R NH1	4.30		1	1
Va 96Q CB	B	70R NH1	3.93		1	1
Va 96Q CB	P	5V CG1	4.03	1		1
Va 96Q CB	P	5V CG2	4.35	1		1
Va 96Q CD	A	61T CG2	3.50	1	1	
Va 96Q CD	A	62N OD1	4.01		1	1
Va 96Q CD	P	3Y OH	3.83		1	1
Va 96Q CD	P	5V CB	4.32	1		1
Va 96Q CD	P	5V CG1	3.40	1		1
Va 96Q CD	P	5V CG2	4.09	1		1
Va 96Q CG	A	61T CG2	3.73	1	1	
Va 96Q CG	P	3Y OH	3.68		1	1
Va 96Q CG	P	5V CG1	4.06	1		1
Va 96Q CG	P	5V CG2	4.13	1		1
Va 96Q NE2	A	61T C	4.33		1	1
Va 96Q NE2	A	61T CB	4.11		1	1
Va 96Q NE2	A	61T CG2	3.46		1	1
Va 96Q NE2	A	62N CA	4.21		1	1
Va 96Q NE2	A	62N CG	3.97		1	1
Va 96Q NE2	A	62N N	4.22		1	1
Va 96Q NE2	A	62N OD1	2.93	1		1
Va 96Q NE2	P	3Y CE2	3.84		1	1
Va 96Q NE2	P	3Y CZ	3.85		1	1
Va 96Q NE2	P	3Y OH	2.99	1		1
Va 96Q NE2	P	5V CA	4.36		1	1
Va 96Q NE2	P	5V CB	4.05		1	1
Va 96Q NE2	P	5V CG1	3.46		1	1
Va 96Q NE2	P	5V CG2	3.77		1	1
Va 96Q OE1	A	61T CG2	4.01		1	1
Va 96Q OE1	A	62N OD1	4.29		1	1
Va 96Q OE1	A	65V CG2	3.55		1	1
Va 96Q OE1	P	5V CG1	3.51		1	1
Va 96Q OE1	P	6A O	4.42		1	1
Vb 28G O	B	60Y OH	4.12		1	1
Vb 30R CB	P	8E OE1	4.19		1	1
Vb 30R CD	A	68H CD2	4.49	1		1
Vb 30R CD	A	68H CE1	3.59	1		1
Vb 30R CD	A	68H ND1	4.40		1	1
Vb 30R CD	A	68H NE2	3.64		1	1
Vb 30R CD	P	8E OE1	4.06		1	1
Vb 30R CD	P	9E O	4.40		1	1
Vb 30R CD	P	11C O	4.03		1	1
Vb 30R CG	P	8E OE1	4.49		1	1
Vb 30R CZ	A	68H NE2	4.42		1	1
Vb 30R CZ	B	60Y OH	3.71		1	1
Vb 30R CZ	P	8E CB	4.22	1		1

Vb 30R CZ	P	8E CD	4.44		1		1	
Vb 30R CZ	P	8E OE1	3.30			1	1	
Vb 30R CZ	P	9E C	4.44		1		1	
Vb 30R CZ	P	9E O	3.46			1	1	
Vb 30R CZ	P	10G CA	4.20		1		1	
Vb 30R NE	A	68H CE1	4.23			1	1	
Vb 30R NE	A	68H NE2	3.80			1	1	
Vb 30R NE	P	8E CB	4.04			1		1
Vb 30R NE	P	8E CD	3.94			1		1
Vb 30R NE	P	8E CG	4.40			1		1
Vb 30R NE	P	8E OE1	2.89	1				1
Vb 30R NE	P	9E O	3.72			1		1
Vb 30R NH1	B	60Y OH	3.61			1		1
Vb 30R NH1	P	9E O	3.70			1		1
Vb 30R NH1	P	10G C	3.72			1		1
Vb 30R NH1	P	10G CA	3.65			1		1
Vb 30R NH1	P	10G O	3.64			1		1
Vb 30R NH1	P	11C N	4.47			1		1
Vb 30R NH1	P	11C O	3.93			1		1
Vb 30R NH2	B	60Y CE2	3.99			1		1
Vb 30R NH2	B	60Y CZ	3.92			1		1
Vb 30R NH2	B	60Y OH	2.93	1				1
Vb 30R NH2	P	8E CB	3.67			1		1
Vb 30R NH2	P	8E CD	3.97			1		1
Vb 30R NH2	P	8E CG	4.40			1		1
Vb 30R NH2	P	8E O	4.19			1		1
Vb 30R NH2	P	8E OE1	2.89	1				1
Vb 30R NH2	P	9E C	4.45			1		1
Vb 30R NH2	P	9E O	3.69			1		1
Vb 30R NH2	P	10G CA	4.32			1		1
Vb 31S OG	P	8E OE2	4.49			1		1
Vb 50F CD1	P	8E OE2	4.49			1		1
Vb 50F CD2	A	64A C	4.47		1		1	
Vb 50F CD2	A	64A CB	4.31		1		1	
Vb 50F CD2	A	64A O	4.34			1	1	
Vb 50F CE1	P	8E CD	3.67		1			1
Vb 50F CE1	P	8E CG	4.12		1			1
Vb 50F CE1	P	8E OE1	3.94			1		1
Vb 50F CE1	P	8E OE2	3.67			1		1
Vb 50F CE2	A	64A C	4.04		1		1	
Vb 50F CE2	A	64A O	3.74			1	1	
Vb 50F CE2	A	65V CA	4.08		1		1	
Vb 50F CE2	A	65V CG2	4.43		1		1	
Vb 50F CE2	A	65V N	4.18			1	1	
Vb 50F CE2	A	68H CB	3.88		1		1	
Vb 50F CE2	A	68H CG	4.33		1		1	
Vb 50F CZ	A	65V CA	4.39		1		1	

Vb 50F CZ	A	65V CG2	4.25	1	1	
Vb 50F CZ	A	68H CB	4.17	1	1	
Vb 50F CZ	A	68H CD2	4.39	1	1	
Vb 50F CZ	A	68H CG	4.20	1	1	
Vb 50F CZ	P	8E CD	4.14	1		1
Vb 50F CZ	P	8E CG	4.09	1		1
Vb 50F CZ	P	8E OE2	4.38		1	1
Vb 51S OG	A	68H CB	3.71		1	1
Vb 51S OG	A	68H CE1	4.31		1	1
Vb 51S OG	A	68H CG	3.80		1	1
Vb 51S OG	A	68H ND1	3.39	1		1
Vb 55R C	A	57Q NE2	3.96		1	1
Vb 55R CD	A	61T CA	4.05	1		1
Vb 55R CD	A	61T CG2	4.28	1		1
Vb 55R CD	A	61T O	3.97		1	1
Vb 55R CD	A	64A CB	3.78	1		1
Vb 55R CG	A	61T CA	4.36	1		1
Vb 55R CG	A	64A CB	4.42	1		1
Vb 55R CZ	A	61T CG2	3.64	1		1
Vb 55R CZ	A	61T O	4.23		1	1
Vb 55R NE	A	61T CA	4.49		1	1
Vb 55R NE	A	61T CG2	3.82		1	1
Vb 55R NE	A	61T O	4.45		1	1
Vb 55R NH1	A	61T C	4.18		1	1
Vb 55R NH1	A	61T CA	4.44		1	1
Vb 55R NH1	A	61T CG2	3.66		1	1
Vb 55R NH1	A	61T O	3.29	1		1
Vb 55R NH1	A	64A CB	4.48		1	1
Vb 55R NH1	A	65V CG2	3.63		1	1
Vb 55R NH2	A	61T CG2	4.14		1	1
Vb 55R O	A	57Q CD	3.95		1	1
Vb 55R O	A	57Q NE2	2.87	1		1
Vb 55R O	A	57Q OE1	4.38		1	1
Vb 56N CA	A	57Q NE2	4.08		1	1
Vb 56N CB	A	57Q NE2	3.95		1	1
Vb 56N CG	A	57Q CD	3.94	1		1
Vb 56N CG	A	57Q CG	3.96	1		1
Vb 56N CG	A	57Q NE2	3.76		1	1
Vb 56N N	A	57Q NE2	4.48		1	1
Vb 56N ND2	A	57Q CD	4.05		1	1
Vb 56N ND2	A	57Q CG	3.62		1	1
Vb 56N ND2	A	57Q NE2	3.93		1	1
Vb 56N OD1	A	57Q CD	3.94		1	1
Vb 56N OD1	A	57Q CG	4.03		1	1
Vb 56N OD1	A	57Q NE2	4.08		1	1
Vb 56N OD1	A	57Q OE1	4.41		1	1
Vb 95A CB	B	64Q NE2	4.06		1	1

Vb 95A O	B	64Q NE2	4.43		1	1
Vb 95A O	B	67V CG2	4.37		1	1
Vb 95A O	P	8E CD	4.36		1	1
Vb 95A O	P	8E OE1	4.34		1	1
Vb 95A O	P	8E OE2	4.09		1	1
Vb 96G C	B	66E OE1	4.25		1	1
Vb 96G C	B	70R NH1	3.82		1	1
Vb 96G CA	B	66E OE1	4.02		1	1
Vb 96G CA	B	70R NH1	3.86		1	1
Vb 96G N	B	66E OE1	4.07		1	1
Vb 96G O	B	70R NH1	3.84		1	1
Vb 97N C	B	66E CD	4.17	1		1
Vb 97N C	B	66E OE1	4.43		1	1
Vb 97N C	B	66E OE2	3.53		1	1
Vb 97N CA	B	66E CD	4.15	1		1
Vb 97N CA	B	66E OE1	4.40		1	1
Vb 97N CA	B	66E OE2	3.87		1	1
Vb 97N CB	B	66E CD	3.96	1		1
Vb 97N CB	B	66E CG	4.34	1		1
Vb 97N CB	B	66E OE2	3.57		1	1
Vb 97N CG	B	70R CB	4.37	1		1
Vb 97N CG	B	70R CD	4.10	1		1
Vb 97N CG	B	70R CG	4.37	1		1
Vb 97N N	B	66E CD	3.64		1	1
Vb 97N N	B	66E CG	4.36		1	1
Vb 97N N	B	66E OE1	3.55		1	1
Vb 97N N	B	66E OE2	3.78		1	1
Vb 97N ND2	B	70R CD	3.64		1	1
Vb 97N ND2	B	70R CG	4.19		1	1
Vb 97N ND2	B	70R NH1	4.38		1	1
Vb 97N OD1	B	66E O	3.94		1	1
Vb 97N OD1	B	70R CA	4.19		1	1
Vb 97N OD1	B	70R CB	3.47		1	1
Vb 97N OD1	B	70R CD	3.90		1	1
Vb 97N OD1	B	70R CG	3.79		1	1
Vb 98T C	B	66E OE2	4.36		1	1
Vb 98T CA	B	66E CD	4.05	1		1
Vb 98T CA	B	66E OE1	4.27		1	1
Vb 98T CA	B	66E OE2	3.11		1	1
Vb 98T CB	B	66E CD	3.61	1		1
Vb 98T CB	B	66E OE1	3.91		1	1
Vb 98T CB	B	66E OE2	2.64		1	1
Vb 98T CG2	B	66E OE2	4.05		1	1
Vb 98T N	B	66E CD	3.28		1	1
Vb 98T N	B	66E OE1	3.50	1		1
Vb 98T N	B	66E OE2	2.55	1		1
Vb 98T OG1	B	66E CD	3.49		1	1

Vb 98T OG1	B	66E OE1	4.22			1		1
Vb 98T OG1	B	66E OE2	2.30	1				1
				20	108	245	109 119	145
						373		373

Contacts of DQ8-8E9E11ss with T1D TCR

pMHC Chain	pMHC AA	pMHC atom	TCR V	TCR AA	TCR atom	dist Å	Hbond salt	VDW C-C	VDW other	MHCa	PEP	MHCb
A	55D	OD2	Va	94Y	OH	4.25			1	1		
A	57Q	CB	Va	94Y	CE1	4.45		1			1	
A	57Q	CB	Va	94Y	CZ	4.42		1			1	
A	57Q	CB	Va	94Y	OH	3.68			1		1	
A	57Q	CD	Va	94Y	OH	4.43			1		1	
A	57Q	CD	Vb	55R	O	3.95			1		1	
A	57Q	CD	Vb	56N	CG	3.94		1			1	
A	57Q	CD	Vb	56N	ND2	4.05			1		1	
A	57Q	CD	Vb	56N	OD1	3.94			1		1	
A	57Q	CG	Va	94Y	CE1	3.74		1			1	
A	57Q	CG	Va	94Y	CZ	3.86		1			1	
A	57Q	CG	Va	94Y	OH	3.11			1		1	
A	57Q	CG	Vb	56N	CG	3.96		1			1	
A	57Q	CG	Vb	56N	ND2	3.62			1		1	
A	57Q	CG	Vb	56N	OD1	4.03			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	55R	C	3.96			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	55R	O	2.87	1				1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	CA	4.08			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	CB	3.95			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	CG	3.76			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	N	4.48			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	ND2	3.93			1		1	
A	57Q	NE2	Vb	56N	OD1	4.08			1		1	
A	57Q	O	Va	94Y	CE1	4.45			1		1	
A	57Q	OE1	Vb	55R	O	4.38			1		1	
A	57Q	OE1	Vb	56N	OD1	4.41			1		1	
A	58F	CD1	Va	94Y	CA	4.24		1			1	
A	58F	CD1	Va	94Y	CD1	3.99		1			1	
A	58F	CD1	Va	94Y	CE1	4.14		1			1	
A	58F	CD1	Va	94Y	CG	4.26		1			1	
A	58F	CE1	Va	92A	O	3.79			1		1	
A	58F	CE1	Va	93G	C	3.87		1			1	
A	58F	CE1	Va	93G	CA	4.46		1			1	
A	58F	CE1	Va	93G	O	4.09			1		1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CA	3.93		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CD1	4.13		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CD2	3.96		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CE1	4.32		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CE2	4.14		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CG	3.98		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	CZ	4.32		1			1	
A	58F	CE1	Va	94Y	N	3.80			1		1	
A	58F	CE2	Va	93G	C	4.37		1			1	

A	58F	CE2	Va 93G O	4.18		1	1
A	58F	CZ	Va 92A C	4.37	1		1
A	58F	CZ	Va 92A O	3.39		1	1
A	58F	CZ	Va 93G C	3.69	1		1
A	58F	CZ	Va 93G CA	3.88	1		1
A	58F	CZ	Va 93G O	3.86		1	1
A	58F	CZ	Va 94Y N	4.05		1	1
A	61T	C	Va 96Q NE2	4.33		1	1
A	61T	C	Vb 55R NH1	4.18		1	1
A	61T	CA	Vb 55R CD	4.05	1		1
A	61T	CA	Vb 55R CG	4.36	1		1
A	61T	CA	Vb 55R NE	4.49		1	1
A	61T	CA	Vb 55R NH1	4.44		1	1
A	61T	CB	Va 96Q NE2	4.11		1	1
A	61T	CG2	Va 96Q CD	3.50	1		1
A	61T	CG2	Va 96Q CG	3.73	1		1
A	61T	CG2	Va 96Q NE2	3.46		1	1
A	61T	CG2	Va 96Q OE1	4.01		1	1
A	61T	CG2	Vb 55R CD	4.28	1		1
A	61T	CG2	Vb 55R CZ	3.64	1		1
A	61T	CG2	Vb 55R NE	3.82		1	1
A	61T	CG2	Vb 55R NH1	3.66		1	1
A	61T	CG2	Vb 55R NH2	4.14		1	1
A	61T	O	Vb 55R CD	3.97		1	1
A	61T	O	Vb 55R CZ	4.23		1	1
A	61T	O	Vb 55R NE	4.45		1	1
A	61T	O	Vb 55R NH1	3.29	1		1
A	61T	OG1	Va 94Y CD1	3.93		1	1
A	61T	OG1	Va 94Y CE1	3.77		1	1
A	62N	CA	Va 96Q NE2	4.21		1	1
A	62N	CG	Va 96Q NE2	3.97		1	1
A	62N	N	Va 96Q NE2	4.22		1	1
A	62N	OD1	Va 96Q CD	4.01		1	1
A	62N	OD1	Va 96Q NE2	2.93	1		1
A	62N	OD1	Va 96Q OE1	4.29		1	1
A	64A	C	Vb 50F CD2	4.47	1		1
A	64A	C	Vb 50F CE2	4.04	1		1
A	64A	CB	Vb 50F CD2	4.31	1		1
A	64A	CB	Vb 55R CD	3.78	1		1
A	64A	CB	Vb 55R CG	4.42	1		1
A	64A	CB	Vb 55R NH1	4.48		1	1
A	64A	O	Vb 50F CD2	4.34		1	1
A	64A	O	Vb 50F CE2	3.74		1	1
A	65V	CA	Vb 50F CE2	4.08	1		1
A	65V	CA	Vb 50F CZ	4.39	1		1
A	65V	CG2	Va 96Q OE1	3.55		1	1
A	65V	CG2	Vb 50F CE2	4.43	1		1

A	65V	CG2	Vb	50F	CZ	4.25	1	1	
A	65V	CG2	Vb	55R	NH1	3.63		1	1
A	65V	N	Vb	50F	CE2	4.18		1	1
A	68H	CB	Vb	50F	CE2	3.88	1		1
A	68H	CB	Vb	50F	CZ	4.17	1		1
A	68H	CB	Vb	51S	OG	3.71		1	1
A	68H	CD2	Vb	30R	CD	4.49	1		1
A	68H	CD2	Vb	50F	CZ	4.39	1		1
A	68H	CE1	Vb	30R	CD	3.59	1		1
A	68H	CE1	Vb	30R	NE	4.23		1	1
A	68H	CE1	Vb	51S	OG	4.31		1	1
A	68H	CG	Vb	50F	CE2	4.33	1		1
A	68H	CG	Vb	50F	CZ	4.20	1		1
A	68H	CG	Vb	51S	OG	3.80		1	1
A	68H	ND1	Vb	30R	CD	4.40		1	1
A	68H	ND1	Vb	51S	OG	3.39	1		1
A	68H	NE2	Vb	30R	CD	3.64		1	1
A	68H	NE2	Vb	30R	CZ	4.42		1	1
A	68H	NE2	Vb	30R	NE	3.80		1	1
B	60Y	CE2	Vb	30R	NH2	3.99		1	1
B	60Y	CZ	Vb	30R	NH2	3.92		1	1
B	60Y	OH	Vb	28G	O	4.12		1	1
B	60Y	OH	Vb	30R	CZ	3.71		1	1
B	60Y	OH	Vb	30R	NH1	3.61		1	1
B	60Y	OH	Vb	30R	NH2	2.93	1		1
B	64Q	NE2	Vb	95A	CB	4.06		1	1
B	64Q	NE2	Vb	95A	O	4.43		1	1
B	66E	CD	Vb	97N	C	4.17	1		1
B	66E	CD	Vb	97N	CA	4.15	1		1
B	66E	CD	Vb	97N	CB	3.96	1		1
B	66E	CD	Vb	97N	N	3.64		1	1
B	66E	CD	Vb	98T	CA	4.05	1		1
B	66E	CD	Vb	98T	CB	3.61	1		1
B	66E	CD	Vb	98T	N	3.28		1	1
B	66E	CD	Vb	98T	OG1	3.49		1	1
B	66E	CG	Va	49R	NH2	4.07		1	1
B	66E	CG	Vb	97N	CB	4.34	1		1
B	66E	CG	Vb	97N	N	4.36		1	1
B	66E	O	Va	49R	NH2	3.59		1	1
B	66E	O	Vb	97N	OD1	3.94		1	1
B	66E	OE1	Vb	96G	C	4.25		1	1
B	66E	OE1	Vb	96G	CA	4.02		1	1
B	66E	OE1	Vb	96G	N	4.07		1	1
B	66E	OE1	Vb	97N	C	4.43		1	1
B	66E	OE1	Vb	97N	CA	4.40		1	1
B	66E	OE1	Vb	97N	N	3.55		1	1
B	66E	OE1	Vb	98T	CA	4.27		1	1

B	66E	OE1	Vb 98T CB	3.91		1	1
B	66E	OE1	Vb 98T N	3.50	1		1
B	66E	OE1	Vb 98T OG1	4.22		1	1
B	66E	OE2	Va 47L CD1	4.18		1	1
B	66E	OE2	Vb 97N C	3.53		1	1
B	66E	OE2	Vb 97N CA	3.87		1	1
B	66E	OE2	Vb 97N CB	3.57		1	1
B	66E	OE2	Vb 97N N	3.78		1	1
B	66E	OE2	Vb 98T C	4.36		1	1
B	66E	OE2	Vb 98T CA	3.11		1	1
B	66E	OE2	Vb 98T CB	2.64		1	1
B	66E	OE2	Vb 98T CG2	4.05		1	1
B	66E	OE2	Vb 98T N	2.55	1		1
B	66E	OE2	Vb 98T OG1	2.30	1		1
B	67V	CG2	Vb 95A O	4.37		1	1
B	69E	C	Va 49R CZ	4.34	1		1
B	69E	C	Va 49R NE	4.18		1	1
B	69E	CB	Va 49R NE	4.44		1	1
B	69E	CD	Va 49R CD	4.21	1		1
B	69E	CD	Va 49R CZ	3.72	1		1
B	69E	CD	Va 49R NE	3.14		1	1
B	69E	CD	Va 49R NH2	3.39		1	1
B	69E	CG	Va 49R CD	3.93	1		1
B	69E	CG	Va 49R CZ	3.51	1		1
B	69E	CG	Va 49R NE	3.00		1	1
B	69E	CG	Va 49R NH2	3.36		1	1
B	69E	O	Va 49R CD	4.17		1	1
B	69E	O	Va 49R NE	4.16		1	1
B	69E	OE1	Va 49R CZ	4.27		1	1
B	69E	OE1	Va 49R NE	4.02		1	1
B	69E	OE1	Va 49R NH2	3.54		1	1
B	69E	OE2	Va 47L CD2	4.35		1	1
B	69E	OE2	Va 49R CD	3.75		1	1
B	69E	OE2	Va 49R CG	4.13		1	1
B	69E	OE2	Va 49R CZ	3.90		1	1
B	69E	OE2	Va 49R NE	2.99	1		1
B	69E	OE2	Va 49R NH2	3.90	1		1
B	70R	CA	Va 49R CZ	3.80	1		1
B	70R	CA	Va 49R NE	4.29		1	1
B	70R	CA	Va 49R NH1	3.70		1	1
B	70R	CA	Va 49R NH2	4.06		1	1
B	70R	CA	Vb 97N OD1	4.19		1	1
B	70R	CB	Va 49R CZ	4.16	1		1
B	70R	CB	Va 49R NH1	3.88		1	1
B	70R	CB	Va 49R NH2	4.11		1	1
B	70R	CB	Vb 97N CG	4.37	1		1
B	70R	CB	Vb 97N OD1	3.47		1	1

B	70R	CD	Va 95N C	4.36	1		1
B	70R	CD	Va 95N CB	4.27	1		1
B	70R	CD	Va 95N CG	3.56	1		1
B	70R	CD	Va 95N ND2	3.68		1	1
B	70R	CD	Va 95N O	3.24		1	1
B	70R	CD	Va 95N OD1	3.57		1	1
B	70R	CD	Vb 97N CG	4.10	1		1
B	70R	CD	Vb 97N ND2	3.64		1	1
B	70R	CD	Vb 97N OD1	3.90		1	1
B	70R	CG	Va 49R NH1	4.09		1	1
B	70R	CG	Va 95N CG	3.79	1		1
B	70R	CG	Va 95N ND2	3.84		1	1
B	70R	CG	Va 95N OD1	3.41		1	1
B	70R	CG	Vb 97N CG	4.37	1		1
B	70R	CG	Vb 97N ND2	4.19		1	1
B	70R	CG	Vb 97N OD1	3.79		1	1
B	70R	CZ	Va 95N O	3.84		1	1
B	70R	N	Va 49R CZ	3.91		1	1
B	70R	N	Va 49R NE	4.16		1	1
B	70R	N	Va 49R NH1	4.29		1	1
B	70R	N	Va 49R NH2	3.92		1	1
B	70R	NE	Va 95N O	3.88		1	1
B	70R	NH1	Va 95N C	4.17		1	1
B	70R	NH1	Va 95N O	3.02	1		1
B	70R	NH1	Va 96Q CA	4.30		1	1
B	70R	NH1	Va 96Q CB	3.93		1	1
B	70R	NH1	Vb 96G C	3.82		1	1
B	70R	NH1	Vb 96G CA	3.86		1	1
B	70R	NH1	Vb 96G O	3.84		1	1
B	70R	NH1	Vb 97N ND2	4.38		1	1
B	73A	CA	Va 51N ND2	3.97		1	1
B	73A	CB	Va 49R CD	3.96	1		1
B	73A	CB	Va 51N CG	4.12	1		1
B	73A	CB	Va 51N ND2	3.73		1	1
B	73A	CB	Va 51N OD1	3.93		1	1
B	73A	O	Va 51N ND2	4.19		1	1
B	74E	CG	Va 95N OD1	4.43		1	1
B	74E	OE2	Va 95N OD1	4.43		1	1
B	76D	CB	Va 51N CB	3.67	1		1
B	76D	CB	Va 51N CG	4.17	1		1
B	76D	CB	Va 51N ND2	3.84		1	1
B	76D	CG	Va 51N CB	4.15	1		1
B	76D	CG	Va 51N ND2	3.92		1	1
B	76D	OD2	Va 51N CB	3.80		1	1
B	76D	OD2	Va 51N CG	3.95		1	1
B	76D	OD2	Va 51N ND2	3.14	1		1
B	77T	C	Va 29N ND2	4.03		1	1

B	77T	CA	Va 29N ND2	4.26		1	1
B	77T	CA	Va 50S OG	4.11		1	1
B	77T	CB	Va 29N CG	4.35	1		1
B	77T	CB	Va 29N ND2	3.23		1	1
B	77T	CB	Va 50S OG	3.49		1	1
B	77T	CG2	Va 29N ND2	4.29		1	1
B	77T	CG2	Va 29N O	4.41		1	1
B	77T	CG2	Va 50S CB	4.40	1		1
B	77T	CG2	Va 50S N	4.42		1	1
B	77T	CG2	Va 50S OG	3.14		1	1
B	77T	CG2	Va 51N CB	4.35	1		1
B	77T	CG2	Va 51N CG	4.32	1		1
B	77T	CG2	Va 51N N	4.10		1	1
B	77T	CG2	Va 51N OD1	4.34		1	1
B	77T	O	Va 29N ND2	3.83		1	1
B	77T	OG1	Va 29N CB	4.41		1	1
B	77T	OG1	Va 29N CG	4.03		1	1
B	77T	OG1	Va 29N ND2	2.87	1		1
B	78V	CG2	Va 29N ND2	3.70		1	1
B	81H	CE1	Va 27S CB	3.88	1		1
B	81H	CE1	Va 27S OG	3.44		1	1
B	81H	NE2	Va 27S CB	4.24		1	1
B	81H	NE2	Va 29N ND2	3.90		1	1
P	199V	CA	Va 29N ND2	4.47		1	1
P	199V	CG1	Va 29N ND2	3.46		1	1
P	-1E	CA	Va 29N ND2	4.43		1	1
P	-1E	CB	Va 27S CB	4.50	1		1
P	-1E	CB	Va 27S OG	4.33		1	1
P	-1E	CD	Va 26T C	4.20	1		1
P	-1E	CD	Va 26T CA	4.16	1		1
P	-1E	CD	Va 26T CB	4.33	1		1
P	-1E	CD	Va 27S CA	4.32	1		1
P	-1E	CD	Va 27S CB	4.05	1		1
P	-1E	CD	Va 27S N	3.39		1	1
P	-1E	CD	Va 27S OG	3.79		1	1
P	-1E	N	Va 29N ND2	3.74		1	1
P	-1E	O	Va 27S CB	4.16		1	1
P	-1E	O	Va 27S OG	3.77		1	1
P	-1E	OE1	Va 26T C	3.47		1	1
P	-1E	OE1	Va 26T CA	3.28		1	1
P	-1E	OE1	Va 26T CB	3.15		1	1
P	-1E	OE1	Va 26T CG2	4.09		1	1
P	-1E	OE1	Va 26T OG1	4.12		1	1
P	-1E	OE1	Va 27S CA	3.92		1	1
P	-1E	OE1	Va 27S CB	4.01		1	1
P	-1E	OE1	Va 27S N	2.81	1		1
P	-1E	OE1	Va 27S O	4.30		1	1

P	-1E	OE1	Va 27S OG	4.17		1	1
P	-1E	OE2	Va 26T C	4.13		1	1
P	-1E	OE2	Va 26T CA	4.24		1	1
P	-1E	OE2	Va 27S CA	4.28		1	1
P	-1E	OE2	Va 27S CB	4.00		1	1
P	-1E	OE2	Va 27S N	3.40	1		1
P	-1E	OE2	Va 27S OG	3.33	1		1
P	2L	CD1	Va 27S CB	4.35		1	1
P	2L	CD1	Va 28I C	4.45		1	1
P	2L	CD1	Va 28I O	3.98		1	1
P	2L	CD1	Va 29N ND2	4.15		1	1
P	2L	CD1	Va 29N OD1	4.39		1	1
P	2L	CD2	Va 27S CB	4.34		1	1
P	2L	CD2	Va 29N OD1	4.32		1	1
P	2L	CD2	Va 93G C	4.39		1	1
P	2L	CD2	Va 93G CA	3.60		1	1
P	2L	CD2	Va 93G O	4.13		1	1
P	3Y	CD1	Va 93G O	3.87		1	1
P	3Y	CE1	Va 93G C	4.31		1	1
P	3Y	CE1	Va 93G O	3.36		1	1
P	3Y	CE1	Va 94Y C	3.98		1	1
P	3Y	CE1	Va 94Y CA	4.04		1	1
P	3Y	CE1	Va 94Y O	3.43		1	1
P	3Y	CE2	Va 94Y O	4.43		1	1
P	3Y	CE2	Va 96Q NE2	3.84		1	1
P	3Y	CZ	Va 93G O	4.44		1	1
P	3Y	CZ	Va 94Y C	4.16		1	1
P	3Y	CZ	Va 94Y CA	4.44		1	1
P	3Y	CZ	Va 94Y O	3.28		1	1
P	3Y	CZ	Va 96Q NE2	3.85		1	1
P	3Y	OH	Va 94Y C	3.51		1	1
P	3Y	OH	Va 94Y CA	3.83		1	1
P	3Y	OH	Va 94Y O	2.55	1		1
P	3Y	OH	Va 96Q CD	3.83		1	1
P	3Y	OH	Va 96Q CG	3.68		1	1
P	3Y	OH	Va 96Q NE2	2.99	1		1
P	5V	CA	Va 96Q NE2	4.36		1	1
P	5V	CB	Va 96Q CD	4.32		1	1
P	5V	CB	Va 96Q NE2	4.05		1	1
P	5V	CG1	Va 96Q CB	4.03		1	1
P	5V	CG1	Va 96Q CD	3.40		1	1
P	5V	CG1	Va 96Q CG	4.06		1	1
P	5V	CG1	Va 96Q NE2	3.46		1	1
P	5V	CG1	Va 96Q OE1	3.51		1	1
P	5V	CG2	Va 94Y O	3.66		1	1
P	5V	CG2	Va 95N C	4.17		1	1
P	5V	CG2	Va 95N CB	3.80		1	1

P	5V	CG2	Va 95N O	3.84		1	1
P	5V	CG2	Va 96Q CB	4.35	1		1
P	5V	CG2	Va 96Q CD	4.09	1		1
P	5V	CG2	Va 96Q CG	4.13	1		1
P	5V	CG2	Va 96Q NE2	3.77		1	1
P	6A	O	Va 96Q OE1	4.42		1	1
P	8E	CB	Vb 30R CZ	4.22	1		1
P	8E	CB	Vb 30R NE	4.04		1	1
P	8E	CB	Vb 30R NH2	3.67		1	1
P	8E	CD	Vb 30R CZ	4.44	1		1
P	8E	CD	Vb 30R NE	3.94		1	1
P	8E	CD	Vb 30R NH2	3.97		1	1
P	8E	CD	Vb 50F CE1	3.67	1		1
P	8E	CD	Vb 50F CZ	4.14	1		1
P	8E	CD	Vb 95A O	4.36		1	1
P	8E	CG	Vb 30R NE	4.40		1	1
P	8E	CG	Vb 30R NH2	4.40		1	1
P	8E	CG	Vb 50F CE1	4.12	1		1
P	8E	CG	Vb 50F CZ	4.09	1		1
P	8E	O	Vb 30R NH2	4.19		1	1
P	8E	OE1	Vb 30R CB	4.19		1	1
P	8E	OE1	Vb 30R CD	4.06		1	1
P	8E	OE1	Vb 30R CG	4.49		1	1
P	8E	OE1	Vb 30R CZ	3.30		1	1
P	8E	OE1	Vb 30R NE	2.89	1		1
P	8E	OE1	Vb 30R NH2	2.89	1		1
P	8E	OE1	Vb 50F CE1	3.94		1	1
P	8E	OE1	Vb 95A O	4.34		1	1
P	8E	OE2	Vb 31S OG	4.49		1	1
P	8E	OE2	Vb 50F CD1	4.49		1	1
P	8E	OE2	Vb 50F CE1	3.67		1	1
P	8E	OE2	Vb 50F CZ	4.38		1	1
P	8E	OE2	Vb 95A O	4.09		1	1
P	9E	C	Vb 30R CZ	4.44	1		1
P	9E	C	Vb 30R NH2	4.45		1	1
P	9E	O	Vb 30R CD	4.40		1	1
P	9E	O	Vb 30R CZ	3.46		1	1
P	9E	O	Vb 30R NE	3.72		1	1
P	9E	O	Vb 30R NH1	3.70		1	1
P	9E	O	Vb 30R NH2	3.69		1	1
P	10G	C	Vb 30R NH1	3.72		1	1
P	10G	CA	Vb 30R CZ	4.20	1		1
P	10G	CA	Vb 30R NH1	3.65		1	1
P	10G	CA	Vb 30R NH2	4.32		1	1
P	10G	O	Vb 30R NH1	3.64		1	1
P	11C	N	Vb 30R NH1	4.47		1	1
P	11C	O	Vb 30R CD	4.03		1	1

P	11C	O	Vb	30R	NH1	3.93	1	1				
							20	108	245	109	119	145
									373			373