

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 587 302**

51 Int. Cl.:

C12Q 1/48 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **03.05.2012 PCT/EP2012/001902**

87 Fecha y número de publicación internacional: **08.11.2012 WO12150034**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **03.05.2012 E 12729340 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **27.04.2016 EP 2705155**

54 Título: **Diseño racional de componentes de la glucosilación con asparagina unida catalizada por oligosacariltransferasa**

30 Prioridad:

04.05.2011 EP 11003648

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

21.10.2016

73 Titular/es:

**ETH ZURICH (100.0%)
Raemistrasse 101/ETH Transfer
8092 Zurich, CH**

72 Inventor/es:

**AEBI, MARKUS;
LOCHER, KASPAR y
LIZAK, CHRISTIAN**

74 Agente/Representante:

DE ELZABURU MÁRQUEZ, Alberto

ES 2 587 302 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Diseño racional de componentes de la glucosilación con asparagina unida catalizada por oligosacariltransferasa

Campo de la invención

5 La presente invención se refiere a métodos para la identificación o el diseño de (a) un posible donante de oligosacáridos, (b) una posible oligosacariltransferasa (OST), (c) un posible polipéptido con el motivo de la secuencia consenso y/o (d) un posible inhibidor de glucosilación para utilizar en la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST), que comprende las etapas de generación de un modelo tridimensional del dominio catalítico y/o el punto de unión al polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, y el diseño o la selección de un posible componente seleccionado de (a) a (d) que optimiza la complementariedad estereoquímica de dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) y el posible componente.

Antecedentes relevantes de la invención

15 Se estima que más de la mitad de todas las proteínas eucariotas son glucoproteínas, lo que implica que las cadenas laterales de aminoácidos específicos están químicamente modificadas con hidratos de carbono. La forma más abundante de estas modificaciones es la glucosilación con asparagina unida ("unida por N"), que afecta a un gran número de funciones celulares que van desde el plegamiento de proteínas, el control de calidad, la selección y secreción hasta el desarrollo del organismo y las interacciones huésped-patógeno. Las asparaginas orientadas a la luz del retículo endoplásmico (RE) están específicamente glucosiladas cuando se encuentran en el "sequon" consenso Asn-X-Ser/Thr, donde X puede ser cualquier aminoácido excepto prolina. La reacción tiene lugar en la membrana que rodea el RE y está catalizada por la enzima oligosacariltransferasa (OST), un complejo proteico hetero-oligomérico incrustado en la membrana del RE de los eucariotas superiores (véase la Fig. 1b). Una característica distintiva de la glucosilación por unión a N es su amplia especificidad con respecto al sustrato polipeptídico, que es una consecuencia directa del corto "sequon" de reconocimiento. Esta característica distingue a OST de las glucosiltransferasas que modifican restos de serina o treonina (glucosilación por unión a O) y presentan una mayor especificidad para sus sustratos proteicos.

25 La etapa clave en la glucosilación catalizada por OST es la formación de un enlace N-glucosídico entre el nitrógeno amídico de una asparagina receptora y el carbono C1 del primer resto de sacárido de un donante oligosacárido unido a un lípido (OUL) (véase la Fig. 1a). Esto da lugar a la transmisión en bloque del oligosacárido al receptor asparagina. Los detalles del mecanismo de reacción subyacente, son poco conocidos. Esto es debido a la ausencia de una visión estructural en OST en alta resolución, pero también a la naturaleza química compleja del sustrato OUL, su escasez en muestras biológicas, y su insolubilidad en agua. Por el contrario, las estructuras cristalinas de diversas glucosiltransferasas solubles han sido publicadas y sus mecanismos de reacción fueron investigados con gran detalle. Para OST, el modelo actualmente aceptado sugiere que los "sequones" de glucosilación se reconozcan cuando se encuentra en segmentos de proteínas no plegadas, lo que puede ocurrir durante la translocación de proteínas en el RE o una vez que la translocación se ha completado. El componente principal catalíticamente activo dentro de OST es la subunidad STT3, mientras que se cree que las demás subunidades ayudan a refinar el proceso facilitando el montaje del complejo OST o interactuando con un subconjunto de proteínas receptoras o el sustrato OUL, lo que lleva a un aumento del número de puntos de glucosilación accesibles y modificados.

40 La glucosilación por unión a N no está restringida a los eucariotas. Procesos homólogos se encuentran en arqueas y en taxones definidos de proteobacterias. Sin embargo, los kinetoplastidos carióticos y eucarióticos contienen una enzima OST de una sola subunidad que es homóloga a la subunidad STT3 de los eucariotas superiores. En el proceso de N-glucosilación procariótico mejor estudiado interviene como mediador el locus *pgl* de glucosilación de proteínas de la bacteria *Campylobacter jejuni* (Szymanski *et al.* (1999) *Molecular Microbiology* 32, 1022-1030). El locus contiene una proteína de membrana integral denominada PglB que comparte similitud de secuencia significativa con STT3 eucariótica, lo que sugiere una configuración de la membrana y mecanismo de reacción comunes (véase la Fig. 1b). Este grupo de genes es suficiente para catalizar la glucosilación de proteínas cuando se transfiere a las células de *Escherichia coli*. La glucosilación de proteínas procarióticas catalizada por OST de sustratos de proteínas que contienen "sequon" es una forma económica, eficaz y conveniente de glucosilar proteínas producidas por ingeniería genética (Wacker *et al.* (2002), *Science* 298, 1790-1793). La glucosilación de proteínas por unión a N puede hacerse por ingeniería genética con diversas estructuras lipopolisacárido de O antígeno de origen distinto de *C. jejuni* en *E. coli* (Feldman *et al.* (2005) PNAS 102 (8), 3016-3021), lo que permite la transferencia procariótica N-glucanos eucarióticos a sustratos de proteínas biotecnológicas. Glover *et al.* (2005, *Chemistry & Biology* 12, 1311-1315) demostraron por primera vez la glucosilación de proteínas *in vitro* utilizando membranas de células *E. coli* que comprenden PglB sobrexpresada y un oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo. En 2006 Kowarik *et al.* (2006, *EMBO J.* 25(9), 1957-1966) definió más la secuencia consenso del punto de N-glucosilación bacteriana al demostrar que la especificidad de sustrato de OST bacteriana se extiende a un aminoácido cargado negativamente en la posición 2 de la asparagina receptor, dando como resultado el "sequon" consenso Asp/Glu-X₁-Asn-X₂-Ser/Thr (donde tanto X₁ como X₂ no son prolina; SEQ ID n°: 3). Utilizando una biblioteca de sustrato peptídico, Chen *et al.* (2007, *Biochemistry* 46, 5579 -5585) confirmaron la necesidad de una

carga negativa en la posición 2 de la asparagina receptora e identificaron la secuencia DQNAT (SEQ ID N°: 4) como el sustrato óptimo para PglB de *C. jejuni*.

De lo anterior se deduce que la oligosacaryltransferasa procariótica (OST) tiene una amplia especificidad para sustratos de proteínas, porque está basada en pequeños "sequon" y puede utilizarse para transferir N-glucanos eucarióticos, procarióticos, así como sintéticos. Esencialmente, el sistema de N-glucosilación a base de OST procariótica requiere tres componentes, (a) un donante de oligosacáridos, preferiblemente un donante de oligosacáridos unido a pirofosfato de lípido o undecaprenilo (b) una oligosacaryltransferasa procariótica (OST), (c) un posible sustrato de polipéptido con motivo de la secuencia consenso y por último si bien no menos importante, un microentorno fisiológico adecuado, p. ej., membranas celulares *in vitro* o *in vivo*.

El problema subyacente de la presente información es que no se puede predecir o diseñar componentes esenciales de para el muy versátil sistema de N-glucosilación basado en OST procariótica más allá de la información dada para componentes de OST ya conocidos. Además, no hay una idea de qué requisitos estructurales debe tener un posible inhibidor de glucosilación OST. Cabe esperar que dichos inhibidores tengan efectos biológicos pronunciados y podría ser de gran valor médico, para el diagnóstico y científico. El otro problema es que hasta ahora no había sido posible proporcionar un modelo tridimensional del dominio catalítico y el punto de unión del polipéptido de una OST que podría haber provisto a la comunidad científica de una visión respecto a la posible variación de los componentes que intervienen en la glucosilación en la que OST actúa como mediador.

Los problemas anteriores se han resuelto mediante la provisión de la estructura tridimensional por rayos X de una OST bacteriana, la proteína PglB de *Campylobacter lari* (que comparte 56% de identidad de secuencia con PglB de *C. jejuni*) en el complejo con el hexapéptido receptor DQNATF (SEQ ID n°: 5). PglB de *C. lari* está activa cuando se expresa junto con el grupo *pgl* de *C. jejuni* en células de *E. coli*, como se demuestra por la glucosilación de una proteína receptora que contiene un "sequon" consenso (véase la Fig. 2). Para su análisis estructural, PglB de *C. lari* se cristalizó con el hexapéptido DQNATF (SEQ ID n°: 5) que contiene el "sequon" glucosilado en el ensayo *in vivo*, que se había identificado como secuencia receptora óptima para PglB de *C. jejuni* (véase Chen *et al.* anteriormente). La estructura de PglB de *C. lari* (712 restos de aminoácidos, SEQ ID n°: 1) se determinó utilizando una combinación de sincronización experimental y sustitución molecular, haciendo uso de la estructura determinada previamente del dominio periplásmico de PglB de *C. jejuni*. Los cristales compartidos de PglB eran pequeños, frágiles y difractaban anisotrópicamente los rayos X, extendiéndose los mejores datos naturales hasta una resolución de 3,4 Å. La estructura se ajustó a valores de R/R_{libre} de 23,8 y 27,1%, respectivamente (Tabla 2). Otros detalles de la estructura de PglB de *C. lari* se proporcionan en el apartado experimental más adelante.

Esta nueva estructura tridimensional proporciona conocimiento en la base molecular para el reconocimiento del "sequon" y pone de manifiesto una zona catalítica que está formada por el dominio de transmembrana de la proteína y características conservadas, restos de cadenas laterales ácidas y un catión divalente unido. Estos resultados sugieren por primera vez un mecanismo para la activación del nitrógeno amídico y glucosilación y proporcionan un método fundamentado para identificar y diseñar nuevos donantes de oligosacáridos, nuevas variantes de oligosacaryltransferasa (OST), nuevos polipéptidos con motivo de secuencia consenso, así como inhibidores de glucosilación de OST, todos los cuales tienen utilidad en la producción de glucoproteínas biotecnológicas, diagnóstico, medicinas y como herramientas científicas.

En vista de lo anterior, un primer aspecto de la invención se refiere a un método para identificar un posible componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado del grupo que consiste en

(a) un posible donante de oligosacáridos, preferiblemente un oligosacárido unido a un lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo,

(b) una posible oligosacaryltransferasa (OST),

(c) un posible polipéptido con motivo de secuencia consenso, y

(d) un posible inhibidor de glucosilación,

que comprende las etapas siguientes

(i) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos, tres, cuatro, cinco, seis, siete, más preferiblemente todos los amino ácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y

(ii) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que

comprende al menos uno, dos, tres, cuatro, cinco, más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331, W463, W464, D465 e I572,

(iii) llevar a cabo preferiblemente traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en las coordenadas de los aminoácidos de los modelos tridimensionales de (i) y/o (ii),

5 (iv) utilizar dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) de (i), (ii) y/o (iii) para diseñar o seleccionar al menos uno de los posibles componentes (a) a (d),

(v) proporcionar al menos uno de dichos componentes posibles (a) a (d), y

10 (vi) poner en contacto al menos uno de dichos posibles componentes (a) a (d) con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST),

(vii) identificar un componente funcional seleccionado del grupo que consiste en

(A) un donante de oligosacárido funcional, preferiblemente un donante de oligosacáridos unido a un lípido funcional (OUL) o un donante de oligosacáridos unido a pirofosfato de undecaprenilo,

(B) una oligosacariltransferasa funcional (OST),

15 (C) un polipéptido funcional con motivo de secuencia consenso, y

(D) un inhibidor de glucosilación funcional.

20 En una realización preferida, en la etapa (ii) el modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari* comprende al menos dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro, más preferiblemente todos los aminoácidos M318, A331, W463, W464, D465 e I572.

25 Las coordenadas atómicas de la Tabla 1 para su empleo en los métodos de la presente invención se muestran en la Fig. 7. Las coordenadas de rayos X de la OST de *C. lari*, en especial de la zona catalítica y/o el punto de unión del polipéptido complejado con el sustrato DQNAT del polipéptido optimizado (SEQ ID n°: 4) proporcionan al experto en la técnica la información tridimensional necesaria para la identificación de un posible componente para la catálisis de OST y la inhibición catalítica. Las restricciones espaciales en combinación con la naturaleza química funcional de cada uno de los átomos de los aminoácidos involucrados en la acción catalítica y la unión del polipéptido, p. ej., las densidades de electrones, la posición de las fuerzas de van der Waals, las interacciones iónicas, las interacciones hidrófobas, etc. unión, informan al expertos en la técnica en modelado molecular asistido por ordenador de los requisitos previos estructurales y espaciales de (a) un posible donante de oligosacáridos, preferiblemente un oligosacárido unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo; (b) una posible oligosacariltransferasa (OST), (c) un posible polipéptido con motivo de secuencia consenso, y/o (d) un posible inhibidor de glucosilación.

35 Como se ha descrito anteriormente las OST bacterianas tienen una amplia especificidad para moléculas donantes de oligosacáridos. Con la información de coordenadas y el método de la invención, el repertorio de donantes útiles de oligosacáridos puede diseñarse de forma racional y ampliarse sin tener que volver a estrategias de síntesis de prueba y error. Además, la propia OST puede variarse de forma racional sin hacer no funcionales la zona catalítica y el sitio de unión del polipéptido. Esta variación de OST es útil, por ejemplo para modificar el potencial catalítico, la especificidad de sustrato del polipéptido y/o la especificidad del donante de oligosacáridos de las OST. Además, el motivo consenso del receptor de oligosacáridos del polipéptido puede variarse y diseñarse de forma racional, lo que conduce a la generalización de la utilidad de OST tales como p. ej., la glucosilación de las zonas eucarióticas. Por último, pero no menos importante, el modelo de rayos X tridimensional de la invención proporciona una excelente base para diseñar posibles inhibidores de glucosilación, que cabe esperar que sean fisiológicamente activos al interrumpir, modificar o ralentizar la actividad de OST. Estos inhibidores tienen un gran potencial para proporcionar herramientas científicas, de diagnóstico y terapéuticas.

45 La expresión "error cuadrático medio" o "error cm" o "ecm" significa la raíz cuadrada de la media aritmética de los cuadrados de las desviaciones de la media. En el contexto de objetos atómicos los números se expresan en angstroms (Å). Es una manera de expresar la desviación o variación de una tendencia u objeto.

50 El método de la invención comprende la etapa de utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos o tres, preferiblemente al menos cuatro, más preferiblemente al menos cinco o seis, más preferiblemente siete o todos los aminoácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y

utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión del polipéptido de la oligosacariiltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno o dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro o cinco, más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331 (o A331), W463, W464, D465 e I572.

En el punto de unión del polipéptido W463, W464 y D465 forman fuertes enlaces de hidrógeno con el grupo β -hidroxilo de T en la unión "sequon" receptor. Estos restos contribuyen fuertemente a la unión "sequon" receptor y son la razón por la que una S o T se encuentra en la posición +2 de la asparagina receptor (N-X-S/T). R331 forma un puente salino con la D cargada negativamente del polipéptido receptor y por lo tanto contribuye a la unión "sequon" receptor. R331 es responsable del requisito de un aminoácido cargado negativamente en la posición -2 de la asparagina receptor y es responsable de la ampliación del "sequon" consenso para la glucosilación de proteínas bacterianas unidas por N (D/E-X₁-N-X₂-S/T; SEQ ID n°: 3) (Fig 4a). R331 sólo se conserva en OST bacterianas y puede servir como objetivo para cambiar la especificidad de sustrato de PglB hacia el reconocimiento de puntos de glucosilación eucarióticos. De hecho, cuando R331 ha mutado a A, el punto de glucosilación AQNAT resultante (SEQ ID n°: 8) en una proteína receptora, p. ej., 3D5 con fragmento scFv modificado que contiene originalmente el "sequon" DQNAT (SEQ ID n°: 4), puede estar glucosilado, mientras este punto no sirve como sustrato para la enzima natural (Fig. 4b).

En la zona catalítica, D56, D 154 y E319 parecen responsables de la coordinación del ion metálico divalente unido, que es esencial para la catálisis. Sobre todo, D56 y E319 forman enlaces de hidrógeno con el grupo amido de la cadena lateral de asparagina del "sequon" receptor unido. Esta interacción produce una rotación del enlace C-N en el grupo amido, que es importante para la activación nucleofílica del nitrógeno. D156 y R147 estabilizan la red de enlaces de hidrógeno y R375 compleja la carga negativa de uno de los fosfatos de un oligosacárido unido al lípido (OUL).

Por ejemplo, en el punto de unión del polipéptido W463, W464 y D465 podrían ser sustituidos por dos H y un E (WWD \rightarrow HHE). Para mantener el requisito de la carga negativa en la posición -2 del receptor asparagina, R331 podría ser sustituido por K. Para crear el requisito de una carga positiva en esta posición, R331 podría ser sustituido por D o E. Para superar el requisito de la carga negativa en la posición -2 del receptor asparagina, R331 puede ser sustituido por A (Fig. 4). En la zona catalítica D154 y D156 puede ser sustituidos por E cada uno. E319 podría ser sustituido por D y D56 podría ser sustituido por E, respectivamente (véase más adelante). Para modificar la actividad de PglB, por ejemplo, D56, D154 y E319 podrían ser sustituidas por alaninas o la correspondiente función amino (N o Q). H485 podría ser sustituido por W ya que W aparece en OST eucariotas en esta posición.

Las coordenadas de estructura de PglB de *C. lari* enumeradas en la Tabla 1 en la Fig. 7 son accesibles para su descarga por el experto en la técnica a partir de la base de datos pdb. (El laboratorio de investigación para bioinformática estructural (RCSB) Base de Datos de Proteínas (PDB)). Con la ayuda de un ordenador y programas de estructuras de libre acceso, como PyMOL o los programas de estructuras disponibles en el mercado, el experto en la técnica puede generar fácilmente modelos tridimensionales útiles para el procedimiento reivindicado.

Los expertos en la técnica entenderán que un conjunto de coordenadas de estructura para una proteína, proteína/sustrato o complejo proteína/inhibidor o una de sus partes es un conjunto relativo de puntos que define una forma en tres dimensiones. Por lo tanto, es posible que un conjunto completamente diferente de coordenadas podría definir una forma similar o idéntica. Por esta razón se prefiere llevar a cabo traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en las coordenadas de los aminoácidos de los modelos tridimensionales (i) y/o (ii) obtenidas a partir de las coordenadas atómicas de la Tabla 1. Estas variaciones en las coordenadas pueden generarse por manipulaciones matemáticas de las coordenadas de estructura, por ejemplo manipulación por permutaciones cristalográficas de las coordenadas de estructura, operaciones de fraccionamiento o en la matriz para conjuntos de coordenadas de estructura o cualquier combinación de las anteriores.

A continuación, los modelos tridimensionales generados anteriormente se utilizan para diseñar o seleccionar al menos uno de los posibles componentes de la glucosilación de OST o un posible inhibidor. Se necesitan diversos análisis informáticos para determinar si una molécula tal como un donante de oligosacáridos específico, una OST modificada, un polipéptido con motivo de secuencia consenso de receptor de oligosacárido o un inhibidor de la glucosilación está suficientemente diseñado para predecir racionalmente su funcionalidad en la reacción catalizada por OST. Deberán hacerse consideraciones espaciales, funcionales y químicas tales como la naturaleza, posición de los átomos, grado de libertad de rotación, densidad de electrones, impedimento estérico, interacciones de van der Waals, iónicas e hidrófobas, etc.. Dicho análisis se puede llevar a cabo convenientemente en ordenadores mediante aplicaciones informáticas habituales tales como CCP4 (COLLABORATIVE COMPUTATIONAL PROJECT, 1994. NÚMERO 4. "The CCP4 Suite: Programs for Protein Crystallography". Acta Cryst. D50, 760-763).

Las aplicaciones de similitud molecular informáticas actuales permiten comparaciones entre diferentes estructuras, diferentes configuraciones de la misma estructura y diferentes partes de la misma estructura. El procedimiento de comparación se suele dividir en cuatro etapas: (1) cargar la información estructural, (2) definir la equivalencia atómica en estas estructuras, (3) realizan una operación de ajuste (superposición) y (4) análisis de los

resultados. Cada estructura se identifica mediante un nombre. Una estructura se identifica entonces como el posible componente de OST o inhibidor de OST (es decir, el objetivo o estructura fija), todas las estructuras restantes son estructuras en funcionamiento (es decir, estructuras en movimiento). Cuando se usa un método de ajuste rígido la estructura en funcionamiento se traslada y se hace girar para obtener un ajuste óptimo (complementariedad espacial y funcional) con la estructura objetivo, p. ej. un inhibidor de OST es la estructura fija y los aminoácidos de OST se trasladan y se hacen girar para obtener el un ajuste óptimo. La operación de ajuste emplea un algoritmo que calcula el traslado y la rotación óptimos que se aplicará a la estructura móvil, de manera que el ecm del ajuste sobre los pares especificados de átomos equivalentes sea un mínimo absoluto. Después de la superposición de las dos estructuras puede calcularse un valor de ecm para conjuntos específicos de átomos equivalentes.

10 El posible componente funcional o inhibidor de la reacción de OST seleccionado o diseñado según el método de la invención como se ha descrito anteriormente proporcionará a expertos en la técnica una expectativa razonable de éxito al verificar su funcionalidad en un ensayo de rutina de actividad de OST. Para dicha finalidad, debe proporcionarse el posible componente por compra, modificación de los materiales adquiridos, síntesis química y/o biotecnológica, etc. Este posible componente a continuación tendrá que ponerse en contacto con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por OST, por supuesto, en condiciones que permitan la actividad de OST. Los ensayos de actividad de OST preferidos se describen en (1) 2005 *Chemistry & Biology* 12, 1311-1315, (2) 2006 *Science* 314, 1148-1150, (3) 2007 *Biochemistry* 46, 5579-5585, (4) 2007 *Glycobiology* 11, 1175-1182 y (5) 2011 *Glycobiology* 5, 575-583. Si los posibles componentes o inhibidores son activos o no para OST se verifica preferiblemente en comparación con patrones positivos o negativos. Por ejemplo, la funcionalidad del ensayo de OST se comprueba con un conocido polipéptido receptor de oligosacáridos, p. ej., el hexapéptido DQNATF (SEQ ID n°: 5), y a continuación el posible polipéptido con motivo de la secuencia consenso funcional se sustituye por el hexapéptido y se determina la glucosilación del polipéptido sustituto. Este sencillo sistema analítico de OST se puede adaptar para identificar cualesquier componentes funcionales de OST, preferiblemente el seleccionado del grupo que consiste en (A) un donante de oligosacárido funcional, preferiblemente un donante de oligosacárido unido a lípido (OUL) funcional o de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, (B) una oligosacaryltransferasa (OST) funcional, (C) un polipéptido con motivo de secuencia consenso funcional y (D) un inhibidor de glucosilación funcional.

En un segundo aspecto, la presente invención se refiere a un método para diseñar un posible componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado del grupo que consiste en (a) un posible donante de oligosacárido, preferiblemente un oligosacárido unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, (b) una posible oligosacaryltransferasa (OST), (c) un posible polipéptido con motivo de secuencia consenso y (d) un posible inhibidor de glucosilación, que comprende las etapas siguientes

(i) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos o tres, preferiblemente al menos cuatro o cinco, más preferiblemente al menos seis o siete, aún más preferiblemente todos los aminoácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y

(ii) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno o dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro o cinco, aún más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331, W463, W464, D465 e I572,

(iii) llevar a cabo preferiblemente traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en las coordenadas de los aminoácidos de los modelos tridimensionales de (i) y/o (ii),

(iii.1) utilizar dicho modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) para evaluar la complementariedad estereoquímica entre dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) (i), (ii) y/o (iii) y un componente conocido o posible para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado de un donante de oligosacáridos, preferiblemente un donante de oligosacáridos unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, un polipéptido con motivo de secuencia consenso y un posible inhibidor de glucosilación, o

(iii.2) variar al menos un aminoácido en dicho modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) y usando dicha variados modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) para evaluar la complementariedad estereoquímica entre dichos modelos tridimensionales (i), (ii) y/o (iii) y un componente conocido o posible para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado de un donante de oligosacáridos, preferiblemente un donante de oligosacárido unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, un polipéptido con motivo de secuencia consenso, y un posible inhibidor de glucosilación,

(iv) optimizar dicha complementariedad estereoquímica en un método iterativo observando cambios en el modelo tridimensional de (iii.1), (iii.2) o el componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST),

5 (v) diseñar un posible componente seleccionado de (a) a (d) que optimiza dicha complementariedad estereoquímica de dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) y el posible componente,

(vi.1) proporcionar opcionalmente el posible componente optimizado, y

(vi.2) poner en contacto al menos uno de dichos posibles componentes (a) a (d) con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST),

10 (vi.3) identificar un componente funcional seleccionado del grupo que consiste en (A) un donante de oligosacárido funcional, preferiblemente un oligosacárido unido a lípido (OUL) funcional o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, (B) una oligosacariltransferasa (OST) funcional, (C) un polipéptido funcional con motivo de secuencia consenso y (D) un inhibidor de glucosilación funcional.

15 En una realización preferida, en la etapa (ii) el modelo tridimensional del punto de unión del polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari* comprende al menos dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro, aún más preferiblemente todos los amino ácidos M318, A331, W463, W464, D465 e I572.

20 Este método es básicamente muy similar al método del primer aspecto, excepto que en el método directamente sobre el posible componente de OST se diseña optimizando su complementariedad estereoquímica con los modelos tridimensionales con o sin traslaciones y rotaciones de todo el conjunto en un método iterativo observando los cambios en los modelos tridimensionales o el componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST), cuando se varía al menos un aminoácido en al menos uno de dichos modelos tridimensionales.

25 Una vez que el posible componente de OST diseñado se selecciona en base a su complementariedad estereoquímica optimizado con dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) puede opcionalmente verificarse en un análisis de OST, proporcionando preferiblemente el posible componente optimizado (por síntesis química y/o biotecnológica, compra, modificación de compuestos conocidos, etc.), poniendo en contacto dicho posible componente optimizado con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST). En una última etapa opcional el componente funcional de la reacción

30 de OST o uno de sus inhibidores se identifica por su impacto en la reacción de OST. Normalmente, se utilizan componentes de referencia positivos y negativos para verificar la actividad del ensayo de OST.

35 En una realización preferida de los métodos de la presente invención para la identificación o el diseño de posibles componentes de OST, el modelo de zona catalítica tridimensional específica de la etapa (i) comprende además uno o más, preferiblemente al menos 5, más preferiblemente al menos 10, más preferiblemente todos los aminoácidos seleccionados del grupo que tiene restos situados a la distancia de Van der Waals al péptido unido de la SEQ ID n°: 2, seleccionado preferiblemente de los que están a una distancia de 5 Å a dicho péptido, seleccionado más preferiblemente del grupo que consiste en T53, T54, N55, D56, N146, R147, Y152, E315, T316, I317, M318, E319, V320, N321, R331, L374, R375, Y433, S435, V438, W463, W464, D465, G482, H485, I572, V575.

En otro aspecto, la presente invención se refiere a un medio legible por máquina que comprende, p. ej. almacenar

40 (i) las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, que comprende preferiblemente al menos una, dos o tres, preferiblemente al menos cuatro o cinco, más preferiblemente al menos seis o 7, aún más preferiblemente todos los aminoácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y

45 (ii) las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión all polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno o dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro o cinco, aún más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331 (o A331), W463, W464, D465 e I572,

50 (iii) preferiblemente las coordenadas atómicas de (i) o (ii) modificadas mediante la realización de traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en dichas coordenadas.

El medio anterior es particularmente útil para una variedad de propósitos, tales como el diseño de fármacos asistido por ordenador, el descubrimiento de fármacos y el análisis cristalográfico por rayos X de las OST de otras bacterias.

A continuación, la presente invención se ilustrará más con referencia a formas de realización y experimentos específicos que no se pretende que sean interpretados como restrictivos del alcance de la invención tal como se presenta en las reivindicaciones adjuntas.

La SEQ ID n°: 1 enumera los 712 aminoácidos de la oligosacariltransferasa (OST) de PgIB de *C. lari*.

```
MELQQNFTDNNNSIKYTCILILILIAFAFVLCRLYWVAWASEFYEFFFNQDLMITNDGYAFAEGAR
DMIAGFHQPNDLSYFGSSSLSTLTWLYSILPFSFESIILYMSTFFASLIVVPIILIAREYKLTYY
GFIAALLGSIANSYYNRTMSGYYDTDMLVVLVPLMLILLTFIRLTINKDIFTLLLSPIFIMIYLWW
YPSSYSLNFAMIGLFLGLYTLVFHRKEKIFYLAIALMIIALSMLAWQYKLALIVLLFAIFAFKEEK
INFYMIWALIFISISILHLSGGLDPVLYQLKFYVFKASDVQNLKDAAFMYFNVNETIMEVNTIDP
EVFMQRISSSVLFILSFIGFILLCKDHKSMLLALPMLALGFMALRAGLRFTIYAVPVMALGFGY
FLYAFFNFLEKKQIKLSLRNKNILLILIAFFSISPALMHIYYKSSSTVFTSYEASILNDLKNKAQ
REDYVVAWWDYGYPIRYSDVKTLDGGKHLGKDNFFSSFVLSKEQIPANMARLSVEYTEKSKF
ENYPDVLKAMVKDYNQTSAKDFLESNDKNFKFDTNKTRDVIYMPYRMLRIMPVVAQFANTNPD
NGEQEKSLFFSQANAIAQDKTTGSMVLDNGVEIINDFRALKVEGASIPKAFVDIESITNGKFYY
NEIDSKAQIYLLFLREYKSFVILDESLYNSAYIQMFLLNQYDQDLFEQVTNDTRAKIYRLKR
```

5

La SEQ ID n°: 2 enumera los aminoácidos del hexapéptido DQNATF{pNO₂} (donde F{pNO₂} es paranitrofenilalanina) que representa el sustrato receptor de oligosacárido optimizado para la OST. Este hexapéptido se cristalizó junto con la BSO de PgIB de *C. lari* para dar las coordenadas atómicas de la estructura de la Tabla 1 a continuación, cuyas estadísticas se proporcionan en la Tabla 2.

10 La Tabla 1 se muestra en la Fig. 7. Enumera las coordenadas de la estructura atómica de la oligosacariltransferasa cristalizada (OST, cadena A) de *Campylobacter lari* complejada con la secuencia DQNATF del péptido {pNO₂} (SEQ ID n°: 2) (cadena B), el sustrato óptimo para la glucosilación OST y un ion de metal divalente unido (cadena C), útil para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*. La tabla contiene la información siguiente:

15	COLUMNAS	CONTENIDO
	1-6	Átomo
	7-11	Número de serie del átomo
	13-16	Nombre del átomo
	17	Indicador de posición alternativa
20	18-20	Nombre de resto
	22	Identificador de cadena
	23-26	Número de secuencia de restos
	27	Código para la inserción de restos
	31-38	Coordenadas ortogonales de X en Angstroms
25	39-46	Coordenadas ortogonales de Y en Angstroms
	47-54	Coordenadas ortogonales de Z en Angstroms
	55-60	Ocupación
	61-66	Factor de temperatura (por defecto = 0,0)
	73-76	Identificador de segmentos, justificado a la izquierda
30	77-78	Símbolo del elemento, justificado a la derecha
	79-80	Carga en el átomo

La Tabla 2 muestra la recopilación de datos de rayos X y las estadísticas de afino de la Tabla 1 en la Fig. 7.

A. Estadística de la recopilación de datos

ES 2 587 302 T3

Serie de datos	Natural	EMP1	EMP2	EMP3
Trayectoria del rayo / detector	MD2 en SLS S06SA/PX1 (Mar225)	HighRes en SLS S06SA/PX1 (Pilatus)	MD2 en SLS S06SA/PX1 (Mar225)	MD2 en SLS S06SA/PX1 (Mar225)
Programa informático	XDS/HKL	XDS	HKL	HKL
Longitud de onda (Å)	1,0	1,0	1,0	1,0
Grupo espacial	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁			
Celda unitaria: a (Å)	85,06	85,5	86,1	87,8
b (Å)	116,1	116,4	117,0	119,4
c (Å)	175,04	175,2	174,8	169,9
Resolución	30-3,4	30-4,45	30-3,8	30-4,2
Posiciones cristalinas recopiladas	12	3		4
Totalidad (%)	99,3 (97,6%)	99,6 (100%)	92,3 (68,3)	96,9 (84,2)
Redundancia	9,6 (8,7)	11,1	9,2 (7,3)	9,2 (7,2)
<I/σ(I)>	13,2 (1,3)	10,8 (2,25)	11,1 (0,8)	13,2 (2,6)
R _{ecm} F (XDS) (%)	13,9 (132,8)	15,2 (86,3)		
R _{ecm} (HKL) (%)			13,3 ^a	16 (50,7)

^a Sin factores R_{ecm} indicados por HKL debido a anisotropía severa

B. Estadísticas de afino (datos no elaborados)

	Resolución (Å)	30 – 3,4
	Nº de reflexiones equipo en operación (equipo de prueba)	21.834 (2.000)
5	R _{op} /R _{libre} (%)	23,8 / 27,1
	ecm del óptimo	
	longitudes de enlace (Å)	0,011
	ángulos de enlace (°)	1,475
	Factor B medio (Å ²)	
10	PglB	129
	Péptido	117
	Análisis de Ramachandran (Molprobit)	
	Ramachandran favorecidos	82,6%
	Ramachandran valores atípicos	1,5%

15 **Figuras**

La Fig. 1 muestra esquemáticamente el proceso de glucosilación de proteínas unidas a N. a. Proteínas que contienen "sequones" receptores (NxT/S en eucariotas, D/Ex₁Nx₂ T/S (SEQ ID n°: 3) en bacterias) están glucosiladas en el resto de asparagina por la acción de OST. La reacción química incluye una activación del nitrógeno amídico y la formación de un enlace glucosídico. b. Similitudes y características distintivas de la glucosilación por unión al N en bacterias (cuadro izquierdo) y eucariotas (cuadro derecho). La enzima principal de la OST es STT3 (PglB en las bacterias), que se conserva en la secuencia y estructura en todos los ámbitos de la vida. Los restos de lípidos y el oligosacárido son similares pero no idénticos en bacterias y eucariotas, como se indica. Ambos contienen un resto de isoprenoide-pirofosfato que se hidroliza después de la etapa de glucosilación.

La Fig. 2 muestra la actividad de PglB de la oligosacaryltransferasa de *C. lari*. Se transformaron células de *E. coli* con una combinación de tres plásmidos independientes: (i) el mecanismo de la glucosilación de *C. jejuni* que genera OUL, pero contiene PglB inactivada; (ii) Una proteína receptora (3D5 del fragmento scFv modificado) que contiene el "sequon" DQNAT (SEQ ID n°: 4) y (iii) PglB de *C. lari* funcional. Téngase en cuenta que la estructura cocrystalina presentada en la presente memoria contiene PglB de *C. lari* unida a un péptido receptor que contiene la secuencia utilizada en el ensayo. La glucosilación de la proteína receptora se analizó en extractos periplásmicos, mientras que la expresión de PglB se analizó en extractos de células enteras. Las proteínas se analizaron por inmunotransferencia utilizando anticuerpo anti-c-Myc que detecta sustrato scFv (parte superior), antisuero hr6 específico para glucanos (medio) o antisuero anti-HA que detecta PglB (parte inferior). Los montajes de PglB se indican encima de los carriles: Vector de referencia (ev), natural (wt) o mutaciones en código de una sola letra. La glucosilación de 3D5 produce un cambio de movilidad desde la forma no modificada (g0) a la forma glucosilada (g1). PglB funcional está parcialmente auto-glucosilada en N535 y N556, lo que da como resultado dos bandas adicionales (g1 y g2). Todos los experimentos se realizaron al menos por triplicado, y se presentan muestras representativas.

La Fig. 3 es una imagen que muestra la estructura y sustrato que unen cavidades de PglB de *C. lari*. a. Diagrama de cintas de PglB en dos orientaciones, con dominios TM y periplásmicos. La supuesta posición de la membrana está indicada por líneas y se muestra la posición del péptido sustrato unido. b. Representación lineal de PglB con el péptido receptor unido. Dos cavidades están presentes en caras opuestas de la proteína (marcadas), proporcionando acceso para los sustratos. Las cavidades están conectadas por una ventanilla que acomoda la cadena lateral de la asparagina receptora (no visible en este modo de presentación).

La Fig. 4 muestra el reconocimiento del "sequon" de glucosilación por PglB. a. Una imagen que muestra el punto de unión del péptido y el reconocimiento del "sequon" en PglB. El péptido receptor se muestra en formato de línea y cada uno de los aminoácidos está etiquetado con el código de tres letras. Los restos de PglB que contribuyen a la unión específica del "sequon" están en formato de bola y bastón y están etiquetados con el código de una sola letra incluidos los números de aminoácidos. Los enlaces de hidrógeno entre el motivo WWD y la Thr en +2 del péptido receptor se indican mediante líneas de trazos. b. Actividad de PglB de oligosacaryltransferasa de *C. lari* y R331A mutante de PglB frente a diferentes "sequones" de glucosilación: células de *E. coli* se transformaron con una combinación de tres plásmidos independientes: (i) El mecanismo de la glucosilación de *C. jejuni* que genera OUL, pero contiene PglB inactivada; (ii) Una proteína receptora (3D5 del fragmento scFv modificado) que contiene ya sea el "sequon" DQNAT (SEQ ID n°: 4) o el "sequon" AQNAT (SEQ ID n°: 8) y (iii) PglB o R331A mutante de PglB funcional de *C. lari*. Se analizó la glucosilación de la proteína receptora en extractos periplásmicos, mientras que la expresión de PglB se analizó en extractos de células enteras. Las proteínas se analizaron por inmunotransferencia usando el anticuerpo anti-c-Myc que detecta sustrato scFv (parte superior), antisuero hr6 específico de glucanos (medio) o antisuero anti-HA que detecta PglB (parte inferior). Los montajes de PglB están indicados encima de los carriles y los "sequones" receptores están indicados encima de las líneas. La glucosilación de 3D5 produce un cambio de movilidad de la forma no modificada (g0) para la forma glucosilada (g1). La PglB funcional está parcialmente autoglucosilada en N535 y N556, lo que da como resultado dos bandas adicionales (g1 y g2).

La Fig. 5 muestra la zona catalítica y la activación del nitrógeno amídico. a. Cadenas laterales seleccionadas de PglB están en formato de bola y bastón y están etiquetadas en código de una sola letra incluidos los números de aminoácidos. El péptido receptor se muestra en formato de línea y la asparagina activado está etiquetada. El catión divalente catalítico se muestra como una esfera. Las líneas discontinuas indican enlaces de hidrógeno o interacciones ligando-metal como se sugiere en las mediciones de distancias. b. Estructura química de la zona catalítica, lo que indica interacciones como en a. Las líneas de trazos finos indican cadenas principales de proteínas y péptidos. c. Supuesto mecanismo de activación del nitrógeno del grupo amido. La cadena lateral de asparagina libre presenta deslocalización/conjugación del par de electrones del nitrógeno, como se indica por las fórmulas de resonancia. Cuando se une a PglB, el grupo amido de la asparagina receptora puede formar enlaces de hidrógeno con los grupos carboxilo del D56 catalíticamente esencial y E319, lo que requiere rotación alrededor del enlace C-N (flecha). Esto daría lugar a la rotura de la conjugación y un aumento de nucleofilia del nitrógeno.

Fig. 6: Mecanismo de glucosilación propuesto. a. Se muestran superficies de dominios TM y periplásmico de PglB. El péptido receptor unido está en formato de bola y bastón, y las líneas negras indican los extremos N y C. La estructura química de OUL bacteriana se muestra esquemáticamente en blanco para destacar las supuestas interacciones del grupo pirofosfato con las de cationes divalentes (M²⁺) y con el R375 conservado, al tiempo que permite una disposición colineal de los grupos atacante y saliente de la sustitución nucleófila. Una flecha indica el

ataque del nitrógeno amídico activado. Una muesca predominantemente hidrófoba se indica en la superficie de PglB, donde cabe esperar que los restos isoprenoides se introduzcan en la bicapa lipídica. b. Mecanismo en tres etapas propuesto de glucosilación catalizada por PglB. Los episodios moleculares que conducen de una etapa a la siguiente están indicados junto a las flechas. La estructura cristalina observada refleja el estado superior, con el péptido receptor unido a la proteína y el la mitad del terminal C del bucle EL5 externo ordenado. El estado de la parte inferior izquierda refleja el estado fundamental, sin sustratos unidos y con el bucle externo EL5 desordenado, indicado por líneas discontinuas. En el estado de la parte derecha inferior, OUL de *C. jejuni* (línea negra para restos isoprenoides, P para fosfato, elipsoides para restos de sacáridos) está unido y la asparagina receptora está glucosilada.

10 Fig. 7: véase el comentario en la Tabla 1 anterior.

Ejemplos

Métodos

Complementación *in vivo*

15 Para analizar la actividad de PglB de *C. lari* *in vivo* el gen que codifica pglB se amplificó en el grupo de genes *pgl* de ADN genómico de la cepa *Campylobacter lari* (muestra proporcionada gentilmente por H. Hächler, Lucerna, Suiza) por reacción en cadena de la polimerasa (PCR) y se clonó en un plásmido pMLBAD (Lefebvre y Valvano, *Appl. Environ. Microb.* 68, 5.956-5.964 (2002) con una etiqueta HA en el terminal C fusionada a PglB, dando lugar al plásmido pMIK71. Para los estudios de complementación el vector vacío pMIK71 o pMLBAD se transformó en células SCM6 de *E. coli* que llevan los plásmidos pCL21 (2011 *Bioconjug. Chem.* 3, 488-496) o pCL64 y pACYC*pgl*_{mut} (Wacker *et al.*, *Science* 298, 1790-1793 (2002). pCL21 codifica la expresión del fragmento Fv de una sola cadena de 3D5 que lleva un punto de glucosilación DQNAT (SEQ ID n°: 4) en la región del enlazador y una etiqueta Myc en el terminal C fusionada a 3D5. En pCL64 el punto DQNAT de pCL21 se sustituyó por un punto de glucosilación AQNAT (SEQ ID n°: 8). pACYC*pgl*_{mut} codifica la biosíntesis del oligosacárido unido a lípido (OUL) de *C. jejuni* con un gen pglB de *C. jejuni* inactivado (W458A y D459A). A 5 ml de precultivo se inoculó en un único clon y se cultivó durante la noche a 37°C en medio LB. El

25 cultivo principal se inoculó a una densidad óptica (A_{600}) de 0,05 en 15 ml de medio LB y se cultivó a 37°C a A_{600} de 0,5. El cultivo se provocó por adición de arabinosa al 0,1% (p/v) y se cultivó durante 4 horas a 24°C. Para la extracción de proteínas periplásmicas un equivalente de 1 ml de volumen de cultivo con una A_{600} de 3,0 se recogió por centrifugación, se volvió a poner en suspensión en 150 μ l de tampón de extracción, que consiste en Tris-HCl 30 mM, pH 8,5; 20% (p/v) de sacarosa; EDTA 1 mM y 1 mg/ml de lisozima (Sigma) y se incubó durante 1 h a 4°C. Una etapa de centrifugación final proporcionó proteínas periplásmicas en el sobrenadante. La glucosilación de 3D5 y la expresión de PglB se analizaron por SDS-PAGE (realizado según Lämmli). La inmunodetección se realizó con anticuerpos anti-c-Myc monoclonales (Calbiochem) y suero HR6 antiglicano (Amber S. y Aebi M., comunicación personal) para observar 3D5 glucosilada. La inmunodetección de PglB de *C. lari* se realizó con antisuero anti-HA (Santa Cruz).

Estudio de mutagenia

30 Se generó PglB mutante por el método QuickChange. Se generó plásmido pCL64 por ligadura de ADN fosforilado, bicatenario de los oligonucleótidos CTAGCGGTGGTGGTGGTTCTGGTGGTGGTGCCAGAACGCCA y CCGGTGGCGTTCTGGGCACCACCAGAACCCACCACCG en el plásmido pCL21 digerido con *Nhe*I y *Age*I. Los plásmidos resultantes de todas las montajes se validaron por secuenciación del ADN. Las variantes de PglB mutantes se clonaron en pMLBAD como anteriormente y se utilizaron en ensayos de complementación.

Purificación de PglB

45 El gen que codifica pglB se clonó en un plásmido de expresión pBAD modificado (Invitrogen) con una etiqueta de afinidad de decahistidina en el terminal C fusionada a PglB, dando lugar al plásmido Psf2. Debido a la estrategia de clonación aplicada, PglB llevaba la mutación K2E y el plásmido se confirmó por secuenciación del ADN (Microsynth). PglB de *C. lari* se sobreexpresó desde Psf2 en células BL21-Gold (DE3) de *Escherichia coli* (Stratagene) en un fermentador de 30 l (Infors). Las células se cultivaron a 37°C en medio Terrific Broth enriquecido con 1% de glicerol (p/v) a una densidad óptica (A_{600}) de 10,0 antes el cultivo se provocó por la adición de 0,1% de arabinosa (p/v) durante 2 h. Todas las etapas siguientes se realizaron a 4°C a menos que se especifique de otra manera. Las células se recogieron por centrifugación, se volvieron a poner en suspensión en Tris-HCl 25 mM, pH 8,0; NaCl 250 mM y se disgregaron en un microfluidizador M-110L (Microfluidics) a 103 MPa (15.000 psi) de presión externa. Las membranas se sedimentaron por ultracentrifugación a 100.000 g durante 0,5 h. PglB se disolvió en Tris-HCl 25 mM, pH 8,0; NaCl 250 mM; 10% de glicerol (v/v) y 1% de N-dodecil- β -D-maltopiranosido (p/v) (DDM, Anatrace) durante 1 h.

55 Todos los tampones posteriores contenían DDM como detergente. El sobrenadante se enriqueció con imidazol 25 mM y se cargó en una columna de afinidad SuperFlow NiNTA (Qiagen), se lavó con imidazol 60 mM antes de PglB y

se eluyó con imidazol 200 mM. La proteína se desaló en MES 10 mM-NaOH, pH 6,5; NaCl 100 mM; EDTA 0,5 mM; 3% de glicerol (v/v); 3% de polietilenglicol 400 (v/v) y se concentró a 7-10 mg/ml en un concentrador Amicon Ultra-15 (Millipore) con un umbral de peso molecular de 100 kDa.

Cristales naturales

- 5 El péptido Ac-DQNATF{4NO₂}-NH₂ (SEQ ID n°: 6) se añadió a PglB concentrada hasta una concentración final de 0,75 mM, se incubó durante 0,5 h, y se cristalizó por difusión con vapor en gotas depositadas a 20°C frente a un depósito de glicina 100 mM, pH 9,4; acetato de magnesio 50 mM; 6% de sulfóxido de dimetilo (DMSO) (v/v) y 23-34% (v/v) de polietilenglicol 400. La relación proteína a volumen del depósito en la gota depositada era 2:1. Los cristales aparecieron normalmente después de tres a cuatro semanas y maduraron a tamaño completo en seis semanas. Los cristales se congelaron rápidamente directamente por inmersión en nitrógeno líquido antes de la recopilación de datos.

Derivados de metales pesados

Los cristales naturales se remojaron durante 30-60 min en de fosfato de etil-mercurio (EMP) 1 mM antes de volver a remojarlos y de congelación ultrarrápida por inmersión en nitrógeno líquido.

- 15 Recopilación de datos

Los cristales pertenecían al grupo espacial P2₁2₁2₁, con un complejo PglB-péptido en la unidad asimétrica. Se recogieron datos no elaborados en la trayectoria del haz X06SA del microdifractor en la fuente de luz Swiss (SLS, Villigen) porque no todas las secciones de los cristales difractan igual de bien. Los conjuntos de datos derivados EMP2 y EMP3 (véase la Tabla 2 anterior) se recopilaron en la misma estación, mientras que EMP1 se recopiló en la estación de alta resolución de la misma trayectoria del haz. Los datos se procesaron y se juntaron con XDS (Kabsch, W. Xds. Acta Crystallogr. D66, 125-132, (2010) o HKL2000 (HKL Research, Inc.).

Determinación de la estructura

- 25 La estructura se determinó utilizando una combinación de sustitución molecular utilizando el dominio periplásmico de PglB de *C. jejuni* (código 3AAG de pdb) como un modelo de búsqueda y Phaser (McCoy et al., Phaser crystallographic software. J. Appl. Crystallogr. 40, 658- 674, 2007) por una parte y sustitución isomorfa múltiple con dispersión anómala (MIRAS) usando SHARP (Global Phasing Limited) por la otra. El proceso de cálculo de fase y construcción de modelos (usando O; Jones et al., Acta Crystallogr. A47, 110-119, 1991) y afino (usando Phenix; Adams et al., Acta Crystallogr. D66, 213-221, 2010) se iteró, comenzando con el dominio periplásmico y extendiéndose en las regiones mejor ordenados del dominio TM (TM1-4 y TM10-13) seguido de TM5-9. Las posiciones de las tres cisteínas en el dominio TM (indicado por los picos anómalos Hg) sirvieron como puntos de partida para el rastreo hasta que la muy buena densidad permitió la colocación de restos voluminosos, lo que confirma el registro de secuencia. La estructura final excluye dos bucles desordenados de PglB (restos 283-306 y restos 605-607), así como la etiqueta de polihistidina C-terminal. En la Tabla 2 anterior se dan la recopilación de datos y estadísticas de afino.

- 35 Resultados y conclusiones

Estructura de PglB de *C. lari*

- 40 De acuerdo con las predicciones anteriores (Kelleher y Gilmore, Glycobiology 16, 47-62, 2006) la estructura de rayos X reveló que PglB consta de dos dominios (Fig. 3a), un dominio transmembrana (TM) que comprende los restos 1-432 y un dominio periplásmico que comprende los restos 433-712. Además del enlace covalente, los dos dominios interactúan ampliamente mediante interacciones no covalentes, proporcionadas principalmente por el primer bucle externo (EL1) del dominio TM que forma dos hélices colocadas en paralelo al plano de la membrana (EL1-h1 y EL1-h2). El dominio periplásmico pone de manifiesto una estructura α/β mixta que alberga el motivo de la secuencia más conservada de la familia de proteínas (véase más adelante). Las estructuras de dos dominios periplásmicos relacionados, uno de PglB de *C. jejuni* y otro de AglB de *Pyrococcus Furiosus*, se han descrito anteriormente (Maita et al., J. Biol. Chem. 285, 4941-4950, 2010; Igura et al., Embo J27, 234-243, 2008). Sin embargo, estos dominios aislados eran catalíticamente inactivos e incapaces de unirse a péptidos receptores. La presente estructura de PglB completa proporciona una base molecular para esta observación al poner de manifiesto que el dominio TM es indispensable tanto para la unión como para la catálisis de péptidos.

- 50 A diferencia del dominio periplásmico, el dominio TM presenta un nuevo plegamiento, con 13 segmentos TM conectados mediante bucles citoplásmicos y externos (extracitoplásmicos) relativamente cortos, con la notable excepción de los bucles largos externos EL1 y EL5. En base a las alineaciones de secuencias y a las predicciones del segmento TM, la configuración observada parece conservarse en la familia de proteínas STT3. TM1-4 y TM10-13 forman los puntos de unión del "sequon" y catalíticos y proporcionan la mayor parte de la interfase con el dominio periplásmico, mientras que TM5-9 son hélices TM cortas, paralelas normales al plano de la membrana. Pueden interactuar con los oligosacáridos o restos de bactoprenol o proporcionar un espaciador para la unión remota de EL5

(véase más adelante). Mientras que EL1 está bien ordenado e interactúa firmemente con el dominio periplásmico, EL5 está sólo parcialmente ordenado, con 25 restos escasos o completamente desordenados en las cartografías de densidad de electrones. La sección ordenada de EL5 interactúa tanto con el dominio periplásmico como con el péptido receptor unido, lo que sugiere un cometido crucial en la captación y unión del "sequon". Es concebible que en ausencia de péptidos, EL5 sea completamente flexible y esté desordenado, lo que representa el hallazgo de que ningún cristal de PglB se desarrolló en ausencia de péptido receptor. En el estado de péptido unido, PglB forma dos grandes cavidades por encima de la superficie de la membrana, ambas accesibles desde el espacio periplásmico, pero situadas en los lados opuestos de la proteína (Fig. 3). La cavidad del lado izquierdo proporciona acceso para las proteínas receptoras como se sugiere por la presencia de péptido unido en la estructura, mientras que la cavidad del lado derecho alberga los restos catalíticos (véase más adelante) y probablemente sirve como el sitio de unión para el sustrato OUL. Las dos cavidades están conectadas por una ventanilla, a través del cual la asparagina receptora del péptido unido se extiende desde el punto de unión al péptido en la supuesta zona catalítica.

Unión y reconocimiento del sequon receptor

Se determinó la estructura de PglB en el complejo con el hexapéptido DQNATF (SEQ ID n°: 5), y se observó densidad clara para el péptido en una posición que colocaba la asparagina receptora unos 15 Å por encima de la superficie de la membrana (Fig 3a). Los puntos de unión al péptido y las zonas catalíticas son las regiones mejor ordenadas de la estructura, y la densidad de electrones permitió una asignación inequívoca del registro del péptido receptor. Casi el 80% de la superficie de contacto (calculada por areaimol; Bailey, S., *Acta Crystallogr. D* 50, 760-763, 1994) del péptido está enterrada en la interfaz de los dominios TM y periplásmico (lo que sugiere una muy estrecha unión junto con una configuración firmemente impuesta. El hexapéptido forma un bucle que casi completa un giro de 180°; en consecuencia, los sustratos de polipéptidos tienen que presentar sus "sequones" de glucosilación en bucles suficientemente grandes, flexibles y expuestos en la superficie, debido a que la cavidad de PglB de unión al péptido no parece fijar los dominios de la proteína completamente plegada. Una parte importante de la interacción del dominio TM con el péptido es proporcionada por el bucle externo EL5, que también presenta un resto de metionina que se asemeja a una silla de montar para el péptido. La configuración observada del péptido sería incompatible con un resto de prolina en la posición +1, según la observación de que +1 prolinas no están permitidas en "sequones" de glucosilación. Una característica distintiva de glucosilación unida por N es el requisito de una serina o treonina en la posición +2 de la "sequon" receptor. La estructura de PglB proporciona una explicación molecular al poner de manifiesto que el grupo β-hidroxilo de la Thr en +2 del péptido unido forma tres enlaces de hidrógeno, uno con cada una de las cadenas laterales del "motivo WWD", que está estrictamente conservado en las proteínas STT3 (Fig. 4). El motivo WWD se encuentra en el dominio periplásmico, y la interacción de las dos cadenas laterales de triptófano y aspartato saturan la capacidad de enlaces de hidrógeno del grupo β-hidroxilo, un grupo funcional que sólo está presente en las serinas y treoninas. La disposición separa físicamente la Thr en +2 de la asparagina receptora, y se supone que el motivo WWD define la especificidad del sustrato por el polipéptido, pero no interviene directamente en la actividad catalítica de la enzima. Especialmente, la estructura también puede explicar preferencias y desviaciones en la posición +2 de los "sequones" de glucosilación. El grupo γ-metilo de la Thr en +2 está en contacto de Van der Waals con la isoleucina conservada I572 de PglB (distancia de 3,6Å al grupo γ-metilo de I572, fig. 4). Esta interacción estabilizante está ausente si una serina está en la posición +2. Esto puede explicar que las "sequones" receptores que contienen una Thr en +2 están glucosilados 40 veces más eficazmente que si contienen una serina en +2 (Bause, E., *Biochem. Soc. T* 12, 514-517, 1984). La estructura sugiere que la treonina artificial con configuración S dos podría causar un choque estérico con I572. La treonina con configuración S de hecho no está permitida en la posición +2, con una reducción de 15.000 veces en la eficacia de la glucosilación en comparación con la treonina con configuración R (Breuer et al., *Febs Lett.* 501, 106-110, 2001). I572 se conserva en bacterias y se ha sugerido para formar parte de un motivo MxxI (SEQ ID n°: 7; Maita et al., *J. Biol. Chem.* 285, 4941-4.950, 2010). Sin embargo, el resto correspondiente en la proteína AGIB de arqueas resultó ser una lisina (Igura et al., *Embo J* 27, 234-243, 2008) y las alineaciones de secuencias con homólogos eucarióticos de STT3 no ponen de manifiesto una conservación clara de I572, lo que sugiere que otros restos distintos de isoleucina pueden proporcionar contactos con la Thr en +2 en proteínas homólogas. La estructura de PglB también puede explicar desviaciones permitidas de los "sequones" consenso: La secuencia receptora N-X-C, presente en ~2,2% de los puntos de glucosilación determinados experimentalmente del glucoproteoma de ratón (Zielinska et al., *Cell* 141, 897-907, 2010), está probablemente permitido porque el grupo β-sulfhidrilo de la cisteína puede formar enlaces de hidrógeno similares a los de un grupo β-hidroxilo. Glicines, alaninas y valines también se han descrito en la posición +2 de "sequones" glucosilados, aunque sólo en escasez (Zielinska et al., *Cell* 141, 897-907, 2010; Schwarz et al., *Glycobiology* 21, 45-54, 2011; Valliere-Douglass et al. *J. Biol. Chem.* 284, 32493-32506, 2009). Estos restos, en principio, pueden ser acomodados en el punto de unión de PglB porque son de igual tamaño o más pequeños que la treonina. Sin embargo, la glucosilación de "sequones" tales como N-G-X siendo X mayor que la treonina, o de T/S-X-N ("sequones inversos") (Valliere-Douglass et al. *J. Biol. Chem.* 284, 32493-32506, 2009) no puede explicarse por la estructura de PglB. En comparación con las enzimas eucariotas OST bacterianas tienen un requisito adicional para el "sequon" receptor: La glucosilación sólo es eficaz si un resto cargado negativamente (Asp o Glu) está presente en la posición -2, lo que da como resultado un "sequon" consenso D/E-x₁-N-x₂-S/T (SEQ ID n°: 3; Kowarik et al, *Embo J.* 25, 1957-1966, 2006). En PglB el resto R331 de arginina proporciona un puente salino al Asp en -2 del péptido receptor (Fig. 4a), fortaleciendo de ese modo la interacción PglB-péptido. R331 se conserva en las bacterias, pero no en los eucariotas, donde no se observa ningún requisito de una carga negativa en la posición -2. El "sequon" de

reconocimiento ampliado puede reflejar la necesidad de unión peptídica más estricta en las bacterias, donde la concentración local del polipéptido receptor es probablemente menor que en los eucariotas. De hecho, la mutación de R331 a Ala da lugar a una eficacia de glucosilación reducida de la proteína 3D5 receptora que contiene un punto de glucosilación DQNAT (Fig. 4b). Sin embargo, el mutante R331A permite la glucosilación de 3D5 que contiene un punto AQNAT (SEQ ID nº: 8), que no ha sido glucosilado por PglB natural (Fig 4b.). Por lo tanto, el R331A mutante se puede utilizar para ocupar selectivamente los puntos de glucosilación que PglB natural no utiliza. Por consiguiente, una combinación de enzima natural y el mutante R331A permite la unión específica al punto de diferentes glucanos dentro de la misma glucoproteína.

Zona catalítica

La zona catalítica está situada en la cavidad del lado derecho de PglB (Fig. 3b) y se caracteriza por un catión unido, situado ~ 8Å por encima del límite de la membrana. Debido a la gran concentración de sal de magnesio en la solución de cristalización, se modeló como Mg²⁺. Al igual que todas las OST PglB es sólo funcional con un catión divalente unido (Imperiali y Rickert, P. Natl. Acad. Sci. USA92, 97-101, 1995; Sharma et al., Eur. J. Biochem. 116, 101-108, 1981). Se ha sugerido que el catión fisiológico es Mn²⁺, pero PglB también está activa en Mg²⁺ (no publicado), una propiedad que se ha observado previamente en otras glucosiltransferasas dependientes de metal (Liu y Mushegian, Protein Sci. 12, 1418-1431, 2003). La zona catalítica de PglB cuenta con tres cadenas laterales ácidas (D56, D154, E319) que son proporcionados por el dominio TM y que coordinan el M²⁺ (Fig. 5a). En la resolución actual, las moléculas de agua que pueden ser ligandos adicionales de M²⁺ no pueden modelarse. Los restos situados en la zona catalítica se conservan en proteínas STT3. Los aspartatos D154 y D156 pertenecen a un motivo D-X-D anteriormente descrito y la mutación de aspartato a alanina en la manosiltransferasa GPI-MT-1, miembro de la misma familia de glucosiltransferasa como PglB (GT-C) (Lairson et al., Annu. Rev. Biochem. 77, 521-555, 2008).; Liu y Mushegian, Protein Sci. 12, 1418-1431, 2003), suprimió la actividad de esta enzima (Maeda et al., Embo J20, 250-261, 200). Por el contrario, D56 y E319 no se han identificado previamente como catalíticos relevante, pero sus grupos carboxilo están interactuando tanto con el ion metálico como con el grupo amido del asparagina receptora. Para confirmar la participación catalítica de los tres ácidos, restos de unión a M²⁺, se mutaron individualmente a alaninas y la actividad de los mutantes de PglB resultante se ensayó en un ensayo de complementación (Fig. 2). A pesar de que OST no es restrictivo en nuestro ensayo, el D154A de la mutación redujo el rendimiento de la glucosilación observado en > 50%, los mutantes D56A y E319A la redujeron en > 90%, y el doble mutante D56A/E319A era completamente inactivo.

Hay una debate polémico sobre cómo el grupo amido de la asparagina receptora puede activarse para realizar un ataque nucleófilo en el carbono C1 del sustrato OUL, etapa clave en la glucosilación por unión a N. Las amidas son poco nucleófilas debido a que el par de electrones libres del nitrógeno está conjugado con el doble enlace del grupo carbonilo (Fig. 5c). Como consecuencia, el enlace N-C tiene carácter de doble enlace, y el carácter nucleófilo del nitrógeno es bajo. Para explicar la reactividad del grupo amido, se han propuesto configuraciones específicas del péptido receptor, tal como una "espira β" o una "espira Asx", recurriendo a la participación directa del grupo β-hidroxilo de Ser/Thr en +2 para aumentar el carácter nucleófilo del grupo amida (Bause y Legler, Biochem. J. 195, 639-644, 1981; Imperiali et al, J. Am Chem. Soc. 114, 7942-7944, 1992). Dada la firme unión de Thr en +2 al motivo WWD en nuestra estructura PglB, dicho mecanismo se puede descartar. En su lugar, la estructura de PglB presenta una posibilidad distinta para explicar la activación de nitrógeno de la amida: Los dos restos ácidos D56 y E319 esenciales como catalizadores, están situados de manera óptima para formar enlaces de hidrógeno con los protones de la amida de la asparagina receptora. La formación de dichos enlaces de hidrógeno requeriría una rotación del enlace N-C del grupo amida, suprimiendo de esta manera la desplazamiento de los electrones libres del átomo de nitrógeno y rompiendo la conjugación con el grupo carbonilo (Fig. 5c). Esto no sólo aumentaría la naturaleza electronegativa del nitrógeno de la amida (polarizando los enlaces N-H y aumentando la densidad de electrones en el nitrógeno), sino también generaría un nitrógeno hibridado sp³ con un par solitario reactivo situado de manera óptima para el ataque nucleófilo en el carbono C1 del sustrato oligosacárido activado (OUL). La barrera de energía para hacer girar el enlace N-C en la mayoría de las amidas se estima en 16 a 20 kcal/mol, y la configuración de la amida 270° mostrada en la fig. 5c se ha calculado que tiene una energía de ~18,6 kcal/mol con relación a la configuración plana (Wiberg y Breneman, J. Am. Chem. Soc. 114, 7942-7944, 1992). por lo tanto tomaría 1-2 enlaces de hidrógeno de baja barrera (Cleland y Kreevoy, Science 264, 1887-1890, 1994) (cada uno vale ~10 kcal/mol) para proporcionar suficiente energía para romper permanentemente la conjugación del grupo carboxamido de la asparagina receptora. Los carboxilatos de D56 o E319 podrían proporcionar este tipo de interacciones en el estado de transición de la reacción de glucosilación, aunque requerirá una estructura de mayor resolución para medir de forma fiable longitudes de enlaces de hidrógeno. La mutación de D56 a asparagina (D56N) tiene un efecto inhibitor aún más pronunciado que el truncamiento a alanina, y el mutante E319Q es completamente inactivo (Fig. 2). Esto demuestra que las cargas negativas proporcionadas por los grupos carboxilo del D56 y E319 son esenciales para la catálisis y las cadenas laterales ácidas no pueden ser sustituidas por las correspondientes amidas isoelectrónicas. Los efectos estéricos podrían explicar el aumento de inhibición de D56N con relación a D56A y de E319Q en comparación con E319A.

Mecanismo de glucosilación

Dado que PglB está activa incluso cuando se disuelve en detergente (utilizado para la purificación y cristalización) la estructura proporcionada es probable que haya capturado un estado funcionalmente competente. La reacción de glucosilación se produce con inversión de la configuración en el carbono C1 sustituido de la primera fracción de azúcar. El sustrato OUL se modeló en la estructura PglB de modo que el resto di-N-acetil-bacilosamina está correctamente alineado para un ataque nucleófilo por el nitrógeno de la amida activado, mientras que el grupo pirofosfato saliente está en contacto con el ion metálico divalente y el R375 conservado (Fig 6a). Esta disposición coloca los fragmentos de sacáridos adicionales en la cavidad derecha del PglB, donde pueden interactuar con restos en la superficie tanto de los dominios TM como de los periplásmicos. La disposición también coloca el sustituyente C2 del primer fragmento de sacárido, un grupo N-acetilo presente en las OUL de bacterias y eucariotas, en las proximidades de un resto conservado de tirosina (Y468), donde se observa una densidad constante con una molécula de agua unida. Cuando está modelada como se muestra en la Fig. 6a, la cola de lípidos de la OUL está situada en una ranura en su mayor parte hidrófoba en la superficie de PglB, apuntando sus restos isoprenoides en la bicapa lipídica. La función del catión divalente unido en PglB por lo tanto parece ser doble: Por una parte, orienta las cadenas laterales ácidas que interactúan con el asparagina receptora, y, por otra parte, estabiliza el grupo saliente de la sustitución (lípidos-pirofosfato), acelerando así la reacción. Esto sería distinto de las glucosiltransferasas de la familia GT-A de configuración inversora dependientes del metal, donde el ion metálico sólo sirve para la estabilización del grupo saliente (véase Lairson anteriormente).

Con el péptido receptor presente en la estructura y la molécula de OUL provisionalmente modelada, puede proponerse un ciclo catalítico básico de tres estados para la glucosilación catalizada por PglB (Fig. 6b). Un elemento crítico del mecanismo propuesto es el acoplamiento y desacoplamiento del bucle externo EL5, que se sospecha que es flexible y está desordenado en ausencia de péptido receptor unido (estado fundamental). Tras la unión del péptido, este bucle se vuelve parcialmente ordenado y sujeta el péptido contra el dominio periplásmico, restringiendo así su movimiento. Debido a que el E319 esencial es parte de EL5, esto al mismo tiempo da lugar a la formación de la zona catalítica, donde el receptor Asn se orienta correctamente y se activa. Este estado sólo puede ser alcanzado si un "sequon" consenso de un bucle de la proteína flexible, expuesto se inserta en el sitio de unión. En la siguiente etapa, cabe esperar la unión de OUL, con lo cual el nitrógeno de la amida activado realiza un ataque nucleófilo sobre el primer fragmento de sacárido, dando como resultado la glucosilación. Una vez formado el enlace glucosídico, los azúcares recién unidos están fuertemente presionados contra PglB (específicamente contra Ile317 e His485), produciendo tensión estérica que puede liberarse por desacoplamiento de EL5. Esto abre la ventanilla del receptor Asn y permite al glucopéptido disociarse de la enzima. La escisión posterior del anhídrido del pirofosfato unido al lípido y el plegamiento del dominio proteico glucosilado probablemente proporcionan las principales contribuciones a la fuerza impulsora de la reacción. Se observa que PglB también podría unirse a OUL antes de péptido de unión, y no hay ninguna prueba experimental que sugiera una estricta secuencia de episodios.

LISTA DE SECUENCIAS

<110> ETH zürich
 <120> DISEÑO RACIONAL DE COMPONENTES DE LA GLUCOSILACIÓN
 CON ASPARAGINA UNIDA CATALIZADA POR OLIGOSACARILTRANSFERASA
 <130> 50241PCT
 <160> 8
 <170> PatentIn version 3.5
 <210> 1
 <211> 712
 <212> PRT
 <213> *Campylobacter lari*
 <400> 1
 Met Glu Leu Gln Gln Asn Phe Thr Asp Asn Asn Ser Ile Lys Tyr Thr
 1 5 10 15
 Cys Ile Leu Ile Leu Ile Ala Phe Ala Phe Ser Val Leu Cys Arg Leu
 20 25 30
 Tyr Trp Val Ala Trp Ala Ser Glu Phe Tyr Glu Phe Phe Phe Asn Asp
 35 40 45
 Gln Leu Met Ile Thr Thr Asn Asp Gly Tyr Ala Phe Ala Glu Gly Ala
 50 55 60
 Arg Asp Met Ile Ala Gly Phe His Gln Pro Asn Asp Leu Ser Tyr Phe
 65 70 75 80
 Gly Ser Ser Leu Ser Thr Leu Thr Tyr Trp Leu Tyr Ser Ile Leu Pro
 85 90 95
 Phe Ser Phe Glu Ser Ile Ile Leu Tyr Met Ser Thr Phe Phe Ala Ser
 100 105 110
 Leu Ile Val Val Pro Ile Ile Leu Ile Ala Arg Glu Tyr Lys Leu Thr
 115 120 125
 Thr Tyr Gly Phe Ile Ala Ala Leu Leu Gly Ser Ile Ala Asn Ser Tyr
 130 135 140
 Tyr Asn Arg Thr Met Ser Gly Tyr Tyr Asp Thr Asp Met Leu Val Leu
 145 150 155 160
 Val Leu Pro Met Leu Ile Leu Leu Thr Phe Ile Arg Leu Thr Ile Asn
 165 170 175
 Lys Asp Ile Phe Thr Leu Leu Leu Ser Pro Ile Phe Ile Met Ile Tyr
 180 185 190

ES 2 587 302 T3

Leu Trp Trp Tyr Pro Ser Ser Tyr Ser Leu Asn Phe Ala Met Ile Gly
 195 200 205
 Leu Phe Gly Leu Tyr Thr Leu Val Phe His Arg Lys Glu Lys Ile Phe
 210 215 220
 Tyr Leu Ala Ile Ala Leu Met Ile Ile Ala Leu Ser Met Leu Ala Trp
 225 230 235 240
 Gln Tyr Lys Leu Ala Leu Ile Val Leu Leu Phe Ala Ile Phe Ala Phe
 245 250 255
 Lys Glu Glu Lys Ile Asn Phe Tyr Met Ile Trp Ala Leu Ile Phe Ile
 260 265 270
 Ser Ile Ser Ile Leu His Leu Ser Gly Gly Leu Asp Pro Val Leu Tyr
 275 280 285
 Gln Leu Lys Phe Tyr Val Phe Lys Ala Ser Asp Val Gln Asn Leu Lys
 290 295 300
 Asp Ala Ala Phe Met Tyr Phe Asn Val Asn Glu Thr Ile Met Glu Val
 305 310 315 320
 Asn Thr Ile Asp Pro Glu Val Phe Met Gln Arg Ile Ser Ser Ser Val
 325 330 335
 Leu Val Phe Ile Leu Ser Phe Ile Gly Phe Ile Leu Leu Cys Lys Asp
 340 345 350
 His Lys Ser Met Leu Leu Ala Leu Pro Met Leu Ala Leu Gly Phe Met
 355 360 365
 Ala Leu Arg Ala Gly Leu Arg Phe Thr Ile Tyr Ala Val Pro Val Met
 370 375 380
 Ala Leu Gly Phe Gly Tyr Phe Leu Tyr Ala Phe Phe Asn Phe Leu Glu
 385 390 395 400
 Lys Lys Gln Ile Lys Leu Ser Leu Arg Asn Lys Asn Ile Leu Leu Ile
 405 410 415
 Leu Ile Ala Phe Phe Ser Ile Ser Pro Ala Leu Met His Ile Tyr Tyr
 420 425 430
 Tyr Lys Ser Ser Thr Val Phe Thr Ser Tyr Glu Ala Ser Ile Leu Asn
 435 440 445
 Asp Leu Lys Asn Lys Ala Gln Arg Glu Asp Tyr Val Val Ala Trp Trp
 450 455 460
 Asp Tyr Gly Tyr Pro Ile Arg Tyr Tyr Ser Asp Val Lys Thr Leu Ile

ES 2 587 302 T3

465 470 475 480
 Asp Gly Gly Lys His Leu Gly Lys Asp Asn Phe Phe Ser Ser Phe Val
 485 490 495
 Leu Ser Lys Glu Gln Ile Pro Ala Ala Asn Met Ala Arg Leu Ser Val
 500 505 510
 Glu Tyr Thr Glu Lys Ser Phe Lys Glu Asn Tyr Pro Asp Val Leu Lys
 515 520 525
 Ala Met Val Lys Asp Tyr Asn Gln Thr Ser Ala Lys Asp Phe Leu Glu
 530 535 540
 Ser Leu Asn Asp Lys Asn Phe Lys Phe Asp Thr Asn Lys Thr Arg Asp
 545 550 555 560
 Val Tyr Ile Tyr Met Pro Tyr Arg Met Leu Arg Ile Met Pro Val Val
 565 570
 Ala Gln Phe Ala Asn Thr Asn Pro Asp Asn Gly Glu Gln Glu Lys Ser
 580 585 590
 Leu Phe Phe Ser Gln Ala Asn Ala Ile Ala Gln Asp Lys Thr Thr Gly
 595 600 605
 Ser Val Met Leu Asp Asn Gly Val Glu Ile Ile Asn Asp Phe Arg Ala
 610 615 620
 Leu Lys Val Glu Gly Ala Ser Ile Pro Leu Lys Ala Phe Val Asp Ile
 625 630 635 640
 Glu Ser Ile Thr Asn Gly Lys Phe Tyr Tyr Asn Glu Ile Asp Ser Lys
 645 650
 Ala Gln Ile Tyr Leu Leu Phe Leu Arg Glu Tyr Lys Ser Phe Val Ile
 660 665 670
 Leu Asp Glu Ser Leu Tyr Asn Ser Ala Tyr Ile Gln Met Phe Leu Leu
 675 680 685
 Asn Gln Tyr Asp Gln Asp Leu Phe Glu Gln Val Thr Asn Asp Thr Arg
 690 695 700
 Ala Lys Ile Tyr Arg Leu Lys Arg
 705 710

<210> 2
 <211> 6
 <212> PRT
 <213> Secuencia artificial
 <220>

<223> Sustrato de hexapéptido artificial para OST

<220>

<221> CARACTERÍSTICA MISCELÁNEA

<222> (6)..(6)

<223> sustituido con grupo nitro en posición para

<400> 2

Asp Gln Asn Ala Thr Phe
1 5

<210> 3

<211> 5

<212> PRT

<213> Secuencia artificial

<220>

<223> Sequon de consenso para OST bacteriana

<220>

<221> VARIANTE

<222> (1)..(1)

<223> Glu

<220>

<221> VARIANTE

<222> (2)..(2)

<223> Ala o Cys o Asp o Glu o Phe o Gly o His o Ile o Lys o
Leu o Met o Asn o Arg o Ser o Thr o Val o Trp o Tyr

<220>

<221> VARIANTE

<222> (4)..(4)

<223> Cys o Asp o Glu o Phe o Gly o His o Ile o Lys o Leu o
Met o Asn o Gln o Arg o Ser o Thr o Val o Trp o Tyr

<220>

<221> VARIANTE

<222> (5)..(5)

<223> Ser

<400> 3

Asp Gln Asn Ala Thr
1 5

<210> 4

<211> 5

<212> PRT

<213> Secuencia artificial

<220>

<223> Secuencia óptima del sustrato para PgIB OTS de *C. jejuni*

<400> 4

Asp Gln Asn Ala Thr
1 5

<210> 5

<211> 6

<212> PRT

<213> Secuencia artificial

<220>
 <223> Sustrato de hexapéptido usado en cristalización
 <400> 5

Asp Gln Asn Ala Thr Phe
 1 5

<210> 6
 <211> 6
 <212> PRT
 <213> Secuencia artificial

<220>
 <223> Péptido usado en cristalización

<220>
 <221> MOD_RES
 <222> (1)..(1)
 <223> ACETILACIÓN

<220>
 <221> CARACTERÍSTICA MISCELÁNEA
 <222> (6)..(6)
 <223> sustituido con grupo nitro en posición para

<400> 6

Asp Gln Asn Ala Thr Phe
 1 5

<210> 7
 <211> 4
 <212> PRT
 <213> Secuencia artificial

<220>
 <223> Motivo de secuencia bacteriana

<220>
 <221>
 <222> (2)..(2)
 <223> Cys o Asp o Glu o Phe o Gly o His o Ile o Lys o Leu o
 Met o Asn o Pro o Gln o Arg o Ser o Thr o Val o Trp o
 Tyr

<220>
 <221> VARIANTE
 <222> (3)..(3)
 <223> Cys o Asp o Glu o Phe o Gly o His o Ile o Lys o Leu o
 Met o Asn o Pro o Gln o Arg o Ser o Thr o Val o Trp o
 Tyr

<400> 7

Met Ala Ala Ile
 1

<210> 8
 <211> 5
 <212> PRT
 <213> Secuencia artificial

<220>
<223> sustrato de pentapéptido para OTS

<400> 8

Ala Gln Asn Ala Thr
1 5

REIVINDICACIONES

1. Un método para identificar un posible componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST) seleccionado del grupo que consiste en

- 5 (a) un posible donante de oligosacáridos, preferiblemente un oligosacárido unido a un lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo,
- (b) una posible oligosacariltransferasa (OST),
- (c) un posible polipéptido con motivo de secuencia consenso, y
- (d) un posible inhibidor de glucosilación,

que comprende las etapas siguientes

- 10 (i) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos, tres, cuatro, cinco, seis, siete, más preferiblemente todos los amino ácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y
- 15

- (ii) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos, tres, cuatro, cinco, más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331, W463, W464, D465 e I572,
- 20

(iii) llevar a cabo preferiblemente traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en las coordenadas de los aminoácidos de los modelos tridimensionales de (i) y/o (ii),

(iv) utilizar dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) de (i), (ii) y/o (iii) para diseñar o seleccionar al menos uno de los posibles componentes (a) a (d),

- 25 (v) proporcionar al menos uno de dichos componentes posibles (a) a (d), y

(vi) poner en contacto al menos uno de dichos posibles componentes (a) a (d) con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST),

(vii) identificar un componente funcional seleccionado del grupo que consiste en

- 30 (A) un donante de oligosacárido funcional, preferiblemente un donante de oligosacáridos unido a un lípido funcional (OUL) o un donante de oligosacáridos unido a pirofosfato de undecaprenilo,

(B) una oligosacariltransferasa funcional (OST),

(C) un polipéptido funcional con motivo de secuencia consenso, y

- 35 (D) un inhibidor de glucosilación funcional.

2. El método de la reivindicación 1, en donde en la etapa (ii) el modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacariltransferasa (OST) de *Campylobacter lari* comprende al menos dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro, más preferiblemente todos los amino ácidos M318, A331, W463, W464, D465 e I572.

- 40 3. Un método para diseñar un posible componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacariltransferasa (OST) seleccionado del grupo que consiste en

(a) un posible donante de oligosacárido, preferiblemente un oligosacárido unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo,

(b) una posible oligosacariltransferasa (OST),

- 45 (c) un posible polipéptido con motivo de secuencia consenso y

(d) un posible inhibidor de glucosilación,

que comprende las etapas siguientes

- 5 (i) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $\pm 1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del dominio catalítico de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno, dos o tres, preferiblemente al menos cuatro o cinco, más preferiblemente al menos seis o siete, aún más preferiblemente todos los aminoácidos D56, R147, D154, D156, E319, R375, Y468 y H485, y/o, preferiblemente y
- 10 (ii) utilizar las coordenadas atómicas de la Tabla 1, preferiblemente ± 2 , más preferiblemente $\pm 1,5$, aún más preferiblemente $1,0$ Å de error cuadrático medio (ecm) de los átomos de la cadena principal, para generar un modelo tridimensional del punto de unión al polipéptido de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari*, que comprende al menos uno o dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro o cinco, aún más preferiblemente todos los aminoácidos M318, R331, W463, W464, D465 e I572,
- 15 (iii) llevar a cabo preferiblemente traslaciones y/o rotaciones de todo el conjunto en las coordenadas de los aminoácidos de los modelos tridimensionales de (i) y/o (ii),
- (iii.1) utilizar dicho modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) para evaluar la complementariedad estereoquímica entre dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) (i), (ii) y/o (iii) y un componente conocido o posible para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado de un donante de oligosacáridos, preferiblemente un donante de oligosacáridos unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, un polipéptido con motivo de secuencia consenso y un posible inhibidor de glucosilación, o
- 20 (iii.2) variar al menos un aminoácido en dicho modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) y usando dicha variados modelo tridimensional de (i), (ii) y/o (iii) para evaluar la complementariedad estereoquímica entre dichos modelos tridimensionales (i), (ii) y/o (iii) y un componente conocido o posible para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST) seleccionado de un donante de oligosacáridos (OUL), preferiblemente un donante de oligosacárido unido a lípido (OUL) o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo, un polipéptido con motivo de secuencia consenso, y un posible inhibidor de glucosilación,
- 25 (iv) optimizar dicha complementariedad estereoquímica en un método iterativo observando cambios en el modelo tridimensional de (iii.1), (iii.2) o el componente para la glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST),
- 30 (v) diseñar un posible componente seleccionado de (a) a (d) que optimiza dicha complementariedad estereoquímica de dicho(s) modelo(s) tridimensional(es) y el posible componente,
- 35 (vi.1) proporcionar opcionalmente el posible componente optimizado, y
- (vi.2) poner en contacto al menos uno de dichos posibles componentes (a) a (d) con los demás componentes funcionales necesarios para una glucosilación con asparagina unida ("unida por N") catalizada por oligosacaryltransferasa (OST),
- 40 (vi.3) identificar un componente funcional seleccionado del grupo que consiste en
- (A) un donante de oligosacárido funcional, preferiblemente un oligosacárido unido a lípido (OUL) funcional o un donante de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo,
- 45 (B) una oligosacaryltransferasa (OST) funcional,
- (C) un polipéptido funcional con motivo de secuencia consenso y
- (D) un inhibidor de glucosilación funcional.

4. El método de la reivindicación 3, en donde en la etapa (ii) el modelo tridimensional del sitio de unión del polipéptido de la oligosacaryltransferasa (OST) de *Campylobacter lari* comprende al menos dos, preferiblemente al menos tres, más preferiblemente al menos cuatro, más preferiblemente todos los aminoácidos M318, A331, W463, W464, D465 E I572.

50

5. El método según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, en donde el modelo de la zona catalítica tridimensional específico de la etapa (i) comprende además uno o más, preferiblemente la totalidad de los aminoácidos seleccionados del grupo que tiene los restos situados dentro de la distancia de Van der Waals al péptido unido de la SEQ ID n°: 2, preferiblemente seleccionados del grupo que consiste en Thr53, Thr54, Asn55, Asp56, Asn146, Arg147, Tyr152, Glu315, Thr316, Ile317, Met318, Glu319, Val320, Asn321, Arg331, Leu374 , Arg375, Tyr433, Ser435, Val438, Trp463, Trp464, Asp465, Gly482, His485, Ile572, Val575.
6. El método según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, en donde el modelo de la zona catalítica tridimensional específica de la etapa (i) comprende además uno o más, preferiblemente la totalidad de los aminoácidos seleccionados de entre el grupo que tiene los restos situados dentro de la distancia de Van der Waals al péptido unido de la SEQ ID n°: 2, preferiblemente seleccionados del grupo que consiste en Thr53, Thr54, Asn55, Asp56, Asn146, Arg147, Tyr152, Glu315, Thr316, Ile317, Met318, Glu319, Val320, Asn321, Ala331, Leu374 , Arg375, Tyr433, Ser435, Val438, Trp463, Trp464, Asp465, Gly482, His485, Ile572, Val575.
7. El método según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en donde el posible componente es un donante de oligosacárido (a), preferiblemente un donante de oligosacárido unido a lípido (OUL) o de oligosacárido unido a pirofosfato de undecaprenilo.
8. El método según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en donde el posible componente es una oligosacariltransferasa (OST) (b).
9. El método según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en donde el posible componente es un polipéptido con motivo de secuencia consenso (c).
10. El método según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en donde el posible componente es un inhibidor de glucosilación (d).

Fig. 1

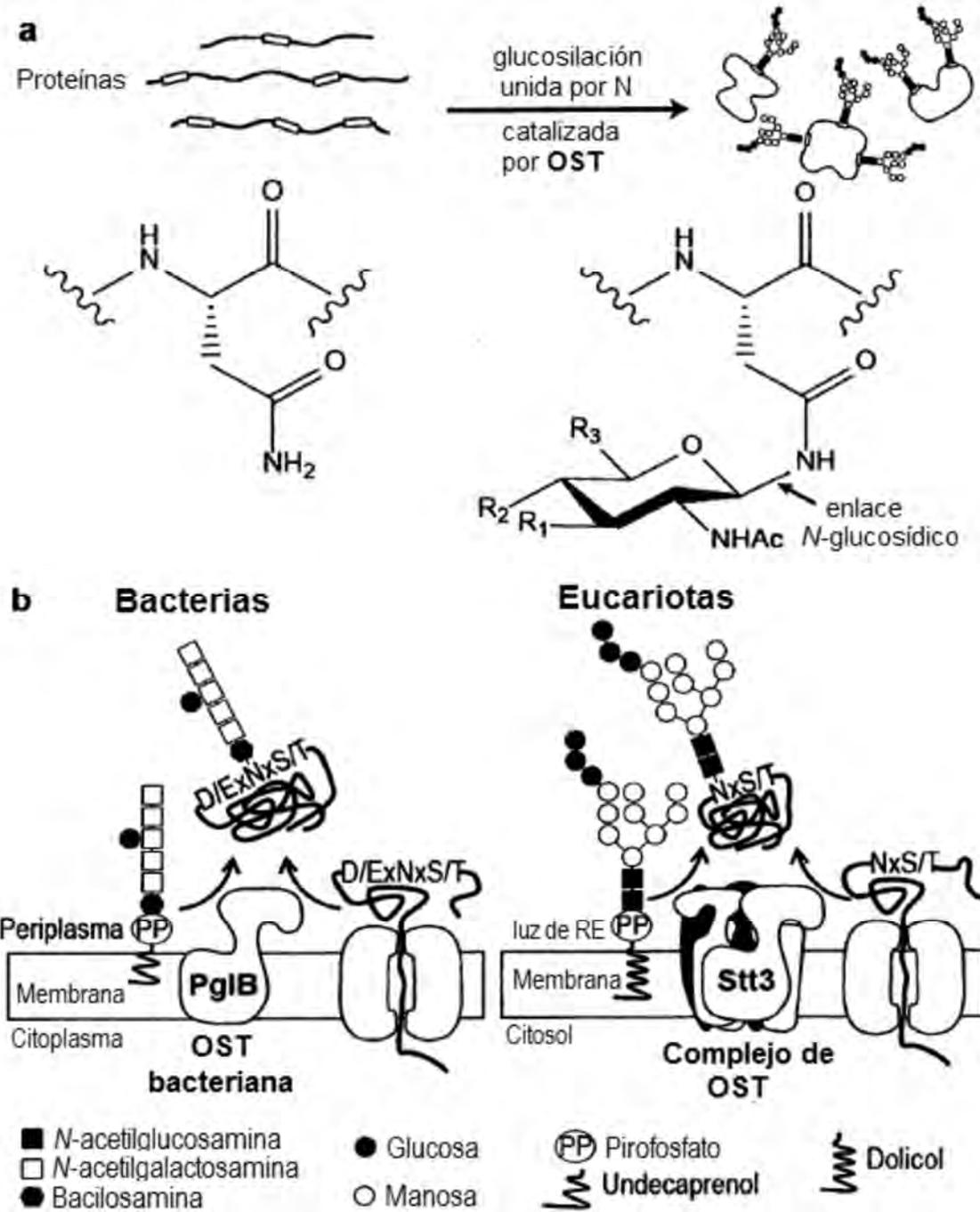


Fig. 2

1. Grupo de biosíntesis de OUL (*C. jejuni*) con gen *pglB* inactivado



2. PglB activo
(*C. lari*)



3. Proteína receptora
de glucosilación
scFv 3D5

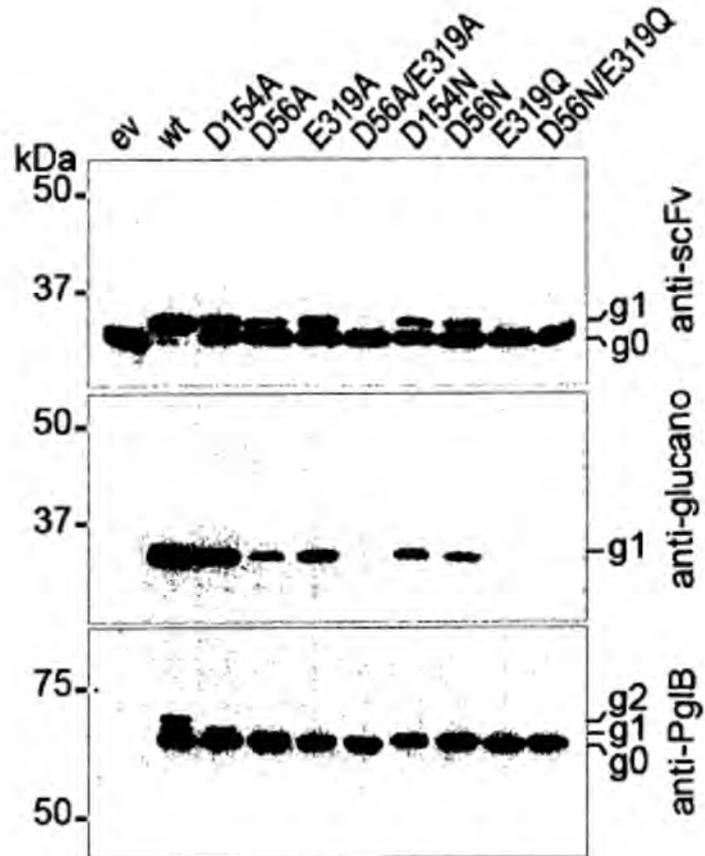


Fig. 3

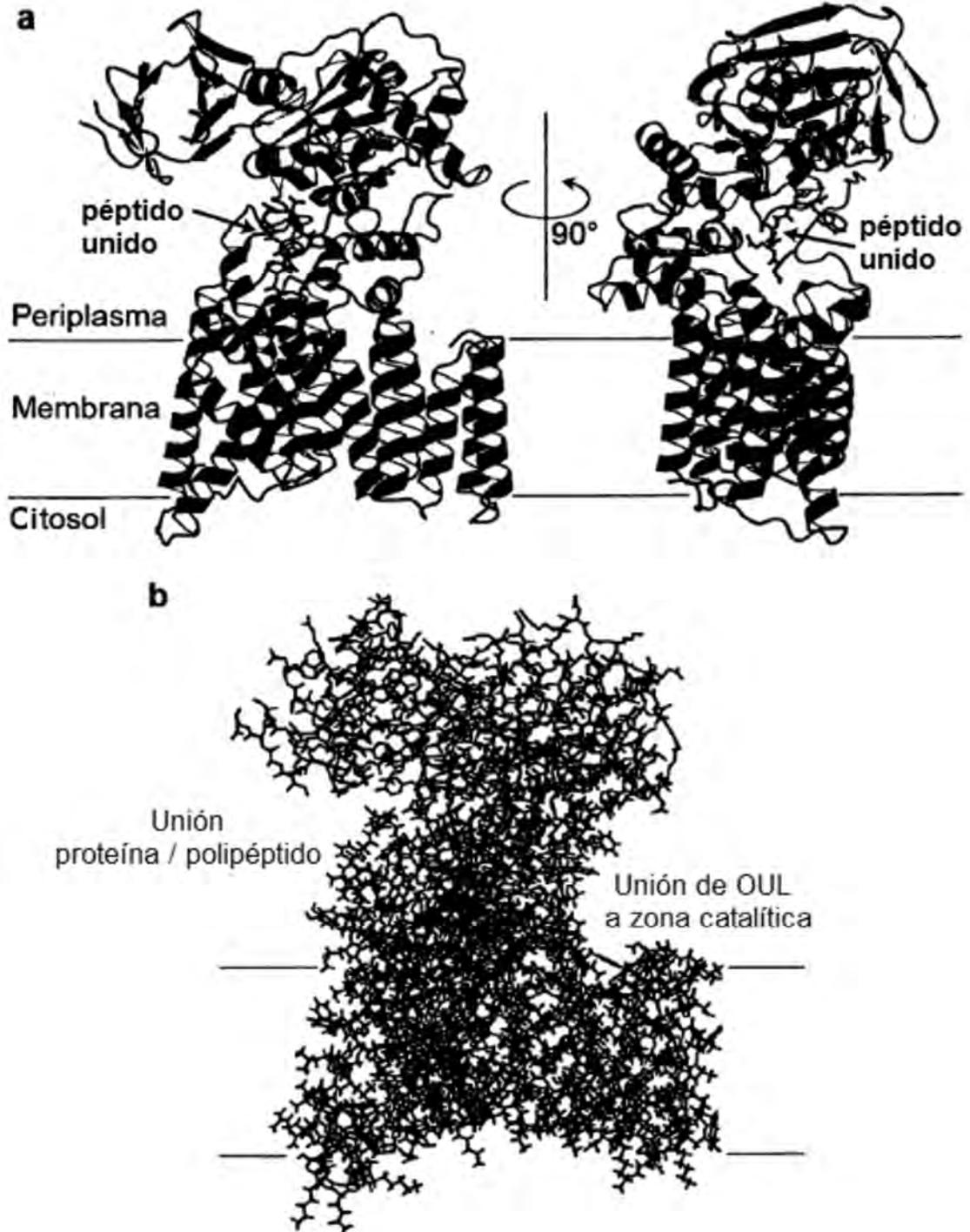
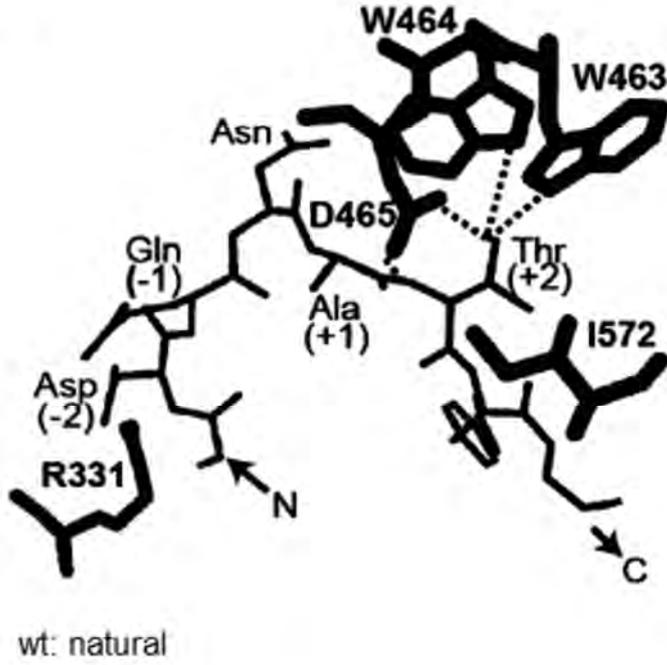


Fig. 4

a



b



Fig. 5

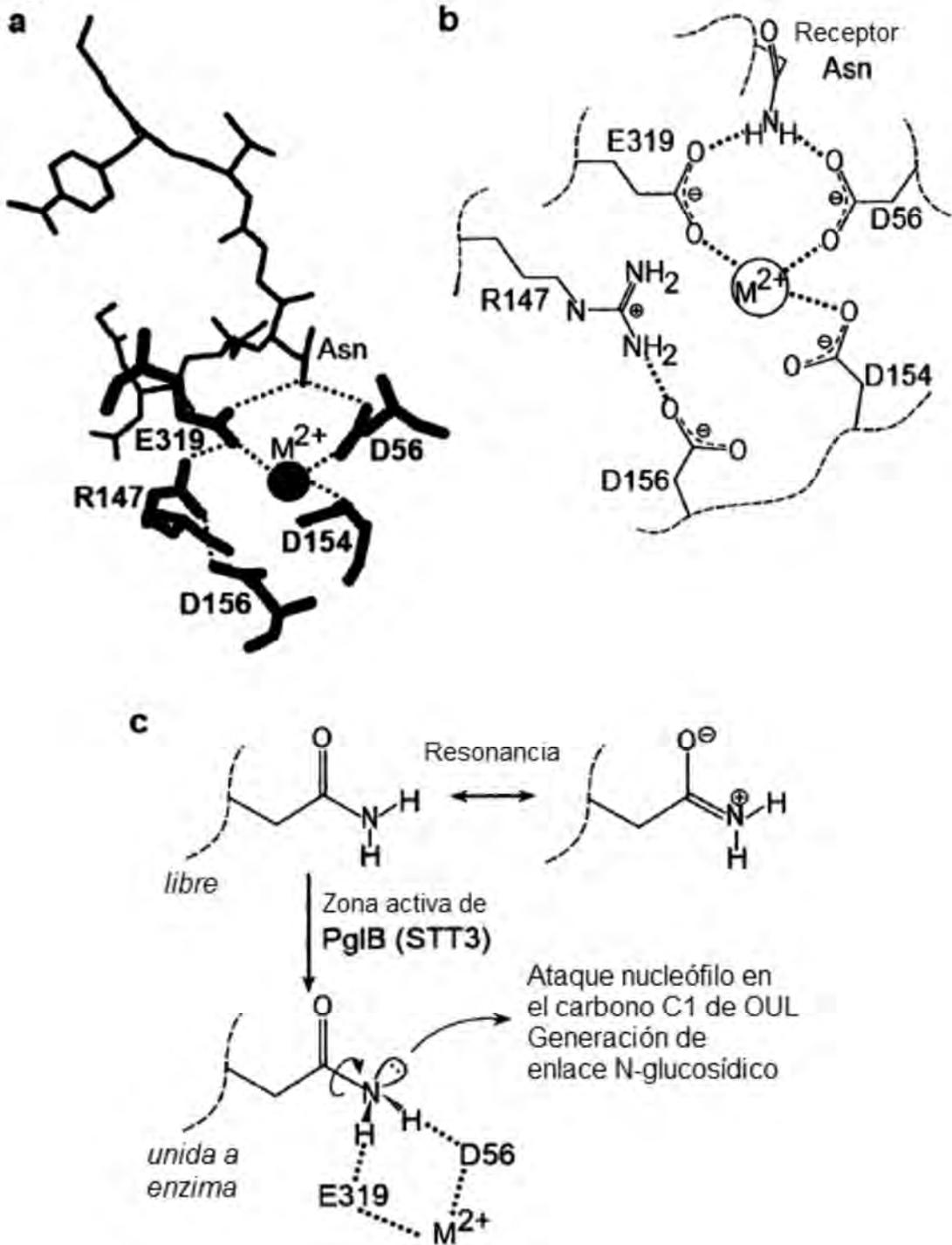


Fig. 6a

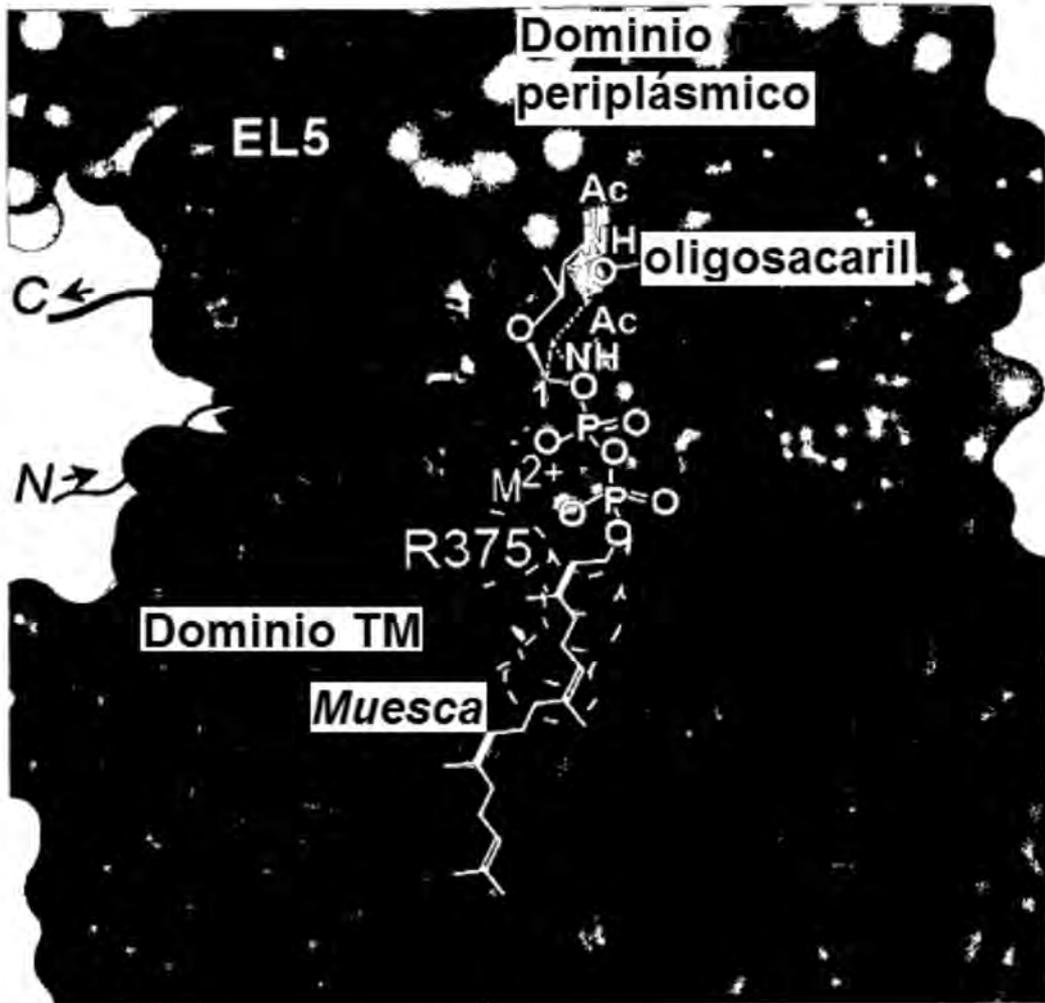
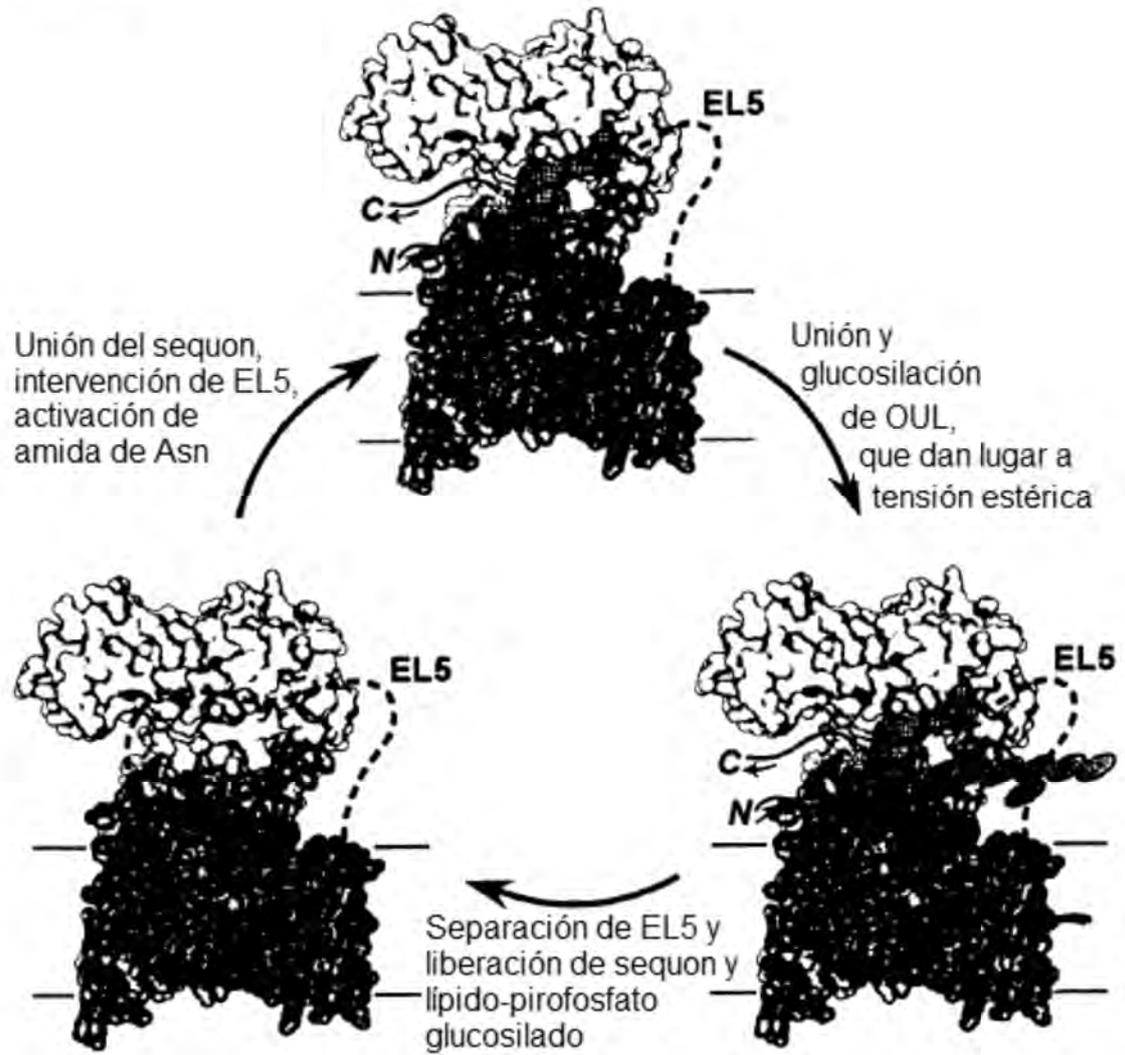


Fig. 6b



ATOM	118	CE2	TYR	A	15	16.117	-30.344	53.370	1.00110.67	C
ATOM	119	CZ	TYR	A	15	16.877	-31.471	53.262	1.00125.64	C
ATOM	120	OH	TYR	A	15	16.261	-32.649	52.937	1.00121.14	O
ATOM	121	N	THR	A	16	18.033	-25.908	52.135	1.00152.52	N
ATOM	122	CA	THR	A	16	17.282	-25.438	50.988	1.00132.69	C
ATOM	123	C	THR	A	16	18.193	-25.141	49.790	1.00129.79	C
ATOM	124	O	THR	A	16	17.862	-25.503	48.668	1.00118.87	O
ATOM	125	CB	THR	A	16	16.415	-24.218	51.358	1.00107.64	C
ATOM	126	CG2	THR	A	16	16.241	-23.277	50.170	1.00 92.56	C
ATOM	127	OG1	THR	A	16	15.128	-24.667	51.800	1.00103.07	O
ATOM	128	N	CYS	A	17	19.344	-24.512	50.021	1.00113.88	N
ATOM	129	CA	CYS	A	17	20.255	-24.169	48.917	1.00113.11	C
ATOM	130	C	CYS	A	17	21.049	-25.346	48.336	1.00123.63	C
ATOM	131	O	CYS	A	17	21.421	-25.335	47.157	1.00120.40	O
ATOM	132	CB	CYS	A	17	21.186	-23.021	49.303	1.00139.19	C
ATOM	133	SG	CYS	A	17	20.345	-21.433	49.290	1.00124.92	S
ATOM	134	N	ILE	A	18	21.310	-26.357	49.158	1.00122.90	N
ATOM	135	CA	ILE	A	18	21.928	-27.576	48.655	1.00133.28	C
ATOM	136	C	ILE	A	18	20.913	-28.348	47.821	1.00119.15	C
ATOM	137	O	ILE	A	18	21.260	-28.944	46.809	1.00119.75	O
ATOM	138	CB	ILE	A	18	22.487	-28.460	49.792	1.00109.53	C
ATOM	139	CG1	ILE	A	18	23.815	-27.886	50.306	1.00126.45	C
ATOM	140	CG2	ILE	A	18	22.673	-29.895	49.317	1.00118.86	C
ATOM	141	CD1	ILE	A	18	24.629	-28.853	51.139	1.00150.53	C
ATOM	142	N	LEU	A	19	19.652	-28.318	48.230	1.00148.03	N
ATOM	143	CA	LEU	A	19	18.606	-28.986	47.467	1.00129.11	C
ATOM	144	C	LEU	A	19	18.287	-28.238	46.160	1.00110.85	C
ATOM	145	O	LEU	A	19	17.947	-28.865	45.152	1.00101.31	O
ATOM	146	CB	LEU	A	19	17.348	-29.182	48.322	1.00105.24	C
ATOM	147	CG	LEU	A	19	17.487	-29.940	49.651	1.00123.39	C
ATOM	148	CD1	LEU	A	19	16.134	-30.461	50.159	1.00114.28	C
ATOM	149	CD2	LEU	A	19	18.476	-31.084	49.498	1.00138.17	C
ATOM	150	N	ILE	A	20	18.401	-26.907	46.188	1.00107.76	N
ATOM	151	CA	ILE	A	20	18.296	-26.072	44.990	1.00 94.55	C
ATOM	152	C	ILE	A	20	19.453	-26.358	44.041	1.00103.29	C
ATOM	153	O	ILE	A	20	19.266	-26.459	42.823	1.00 93.68	O
ATOM	154	CB	ILE	A	20	18.327	-24.569	45.326	1.00103.49	C
ATOM	155	CG1	ILE	A	20	16.920	-23.980	45.298	1.00 85.24	C
ATOM	156	CG2	ILE	A	20	19.141	-23.815	44.297	1.00105.23	C
ATOM	157	CD1	ILE	A	20	16.507	-23.193	46.537	1.00 87.29	C
ATOM	158	N	LEU	A	21	20.653	-26.481	44.606	1.00107.43	N
ATOM	159	CA	LEU	A	21	21.838	-26.840	43.830	1.00118.61	C
ATOM	160	C	LEU	A	21	21.705	-28.199	43.150	1.00118.82	C
ATOM	161	O	LEU	A	21	21.884	-28.304	41.946	1.00116.20	O
ATOM	162	CB	LEU	A	21	23.083	-26.820	44.716	1.00125.51	C
ATOM	163	CG	LEU	A	21	24.000	-25.641	44.422	1.00125.69	C
ATOM	164	CD1	LEU	A	21	25.027	-26.025	43.352	1.00142.02	C
ATOM	165	CD2	LEU	A	21	23.173	-24.414	44.018	1.00107.91	C
ATOM	166	N	ILE	A	22	21.400	-29.236	43.926	1.00118.98	N
ATOM	167	CA	ILE	A	22	21.213	-30.570	43.367	1.00119.00	C
ATOM	168	C	ILE	A	22	20.110	-30.568	42.323	1.00 97.42	C
ATOM	169	O	ILE	A	22	20.292	-31.080	41.218	1.00 96.14	O
ATOM	170	CB	ILE	A	22	20.816	-31.601	44.435	1.00 86.03	C
ATOM	171	CG1	ILE	A	22	21.681	-31.448	45.691	1.00108.85	C
ATOM	172	CG2	ILE	A	22	20.890	-33.019	43.845	1.00 89.59	C
ATOM	173	CD1	ILE	A	22	21.136	-32.151	46.930	1.00116.13	C
ATOM	174	N	ALA	A	23	18.958	-30.007	42.682	1.00135.66	N
ATOM	175	CA	ALA	A	23	17.823	-29.993	41.768	1.00117.23	C
ATOM	176	C	ALA	A	23	18.204	-29.357	40.451	1.00112.47	C
ATOM	177	O	ALA	A	23	17.999	-29.934	39.385	1.00107.46	O
ATOM	178	CB	ALA	A	23	16.688	-29.253	42.367	1.00 78.16	C

ATOM	301	CZ2	TRP	A	37	19.373	-39.160	17.598	1.00116.95	C
ATOM	302	CZ3	TRP	A	37	19.397	-36.858	18.272	1.00 88.96	C
ATOM	303	CH2	TRP	A	37	18.991	-37.869	17.411	1.00101.57	C
ATOM	304	N	ALA	A	38	23.392	-36.100	19.904	1.00138.62	N
ATOM	305	CA	ALA	A	38	23.299	-35.458	18.601	1.00131.90	C
ATOM	306	C	ALA	A	38	24.631	-34.954	18.061	1.00136.38	C
ATOM	307	O	ALA	A	38	24.677	-34.317	17.011	1.00136.68	O
ATOM	308	CB	ALA	A	38	22.317	-34.325	18.666	1.00 81.33	C
ATOM	309	N	SER	A	39	25.711	-35.236	18.779	1.00112.74	N
ATOM	310	CA	SER	A	39	27.031	-34.754	18.395	1.00117.03	C
ATOM	311	C	SER	A	39	27.724	-35.780	17.523	1.00136.24	C
ATOM	312	O	SER	A	39	28.566	-35.435	16.696	1.00140.66	O
ATOM	313	CB	SER	A	39	27.873	-34.485	19.635	1.00105.46	C
ATOM	314	OG	SER	A	39	27.075	-33.990	20.693	1.00103.07	O
ATOM	315	N	GLU	A	40	27.363	-37.046	17.717	1.00121.82	N
ATOM	316	CA	GLU	A	40	27.928	-38.135	16.933	1.00142.31	C
ATOM	317	C	GLU	A	40	27.226	-38.217	15.589	1.00143.84	C
ATOM	318	O	GLU	A	40	27.333	-39.212	14.878	1.00160.58	O
ATOM	319	CB	GLU	A	40	27.823	-39.465	17.685	1.00171.60	C
ATOM	320	CG	GLU	A	40	28.522	-39.458	19.036	1.00175.09	C
ATOM	321	CD	GLU	A	40	29.031	-40.824	19.445	1.00202.70	C
ATOM	322	OE1	GLU	A	40	28.943	-41.765	18.629	1.00220.26	O
ATOM	323	OE2	GLU	A	40	29.525	-40.956	20.584	1.00208.37	O1-
ATOM	324	N	PHE	A	41	26.507	-37.155	15.250	1.00116.27	N
ATOM	325	CA	PHE	A	41	25.789	-37.069	13.988	1.00117.86	C
ATOM	326	C	PHE	A	41	26.171	-35.803	13.268	1.00110.00	C
ATOM	327	O	PHE	A	41	25.996	-34.704	13.775	1.00110.49	O
ATOM	328	CB	PHE	A	41	24.293	-37.097	14.230	1.00126.36	C
ATOM	329	CG	PHE	A	41	23.784	-38.440	14.576	1.00138.85	C
ATOM	330	CD1	PHE	A	41	22.842	-38.597	15.556	1.00135.31	C
ATOM	331	CD2	PHE	A	41	24.261	-39.553	13.919	1.00156.07	C
ATOM	332	CE1	PHE	A	41	22.383	-39.835	15.877	1.00148.62	C
ATOM	333	CE2	PHE	A	41	23.804	-40.797	14.232	1.00169.71	C
ATOM	334	CZ	PHE	A	41	22.862	-40.942	15.211	1.00166.06	C
ATOM	335	N	TYR	A	42	26.698	-35.952	12.069	1.00139.14	N
ATOM	336	CA	TYR	A	42	27.324	-34.812	11.447	1.00132.97	C
ATOM	337	C	TYR	A	42	26.322	-33.818	10.901	1.00119.69	C
ATOM	338	O	TYR	A	42	26.616	-32.630	10.810	1.00116.65	O
ATOM	339	CB	TYR	A	42	28.301	-35.233	10.355	1.00302.42	C
ATOM	340	CG	TYR	A	42	29.143	-34.065	9.968	1.00300.25	C
ATOM	341	CD1	TYR	A	42	30.313	-33.781	10.651	1.00294.21	C
ATOM	342	CD2	TYR	A	42	28.731	-33.195	8.974	1.00305.94	C
ATOM	343	CE1	TYR	A	42	31.072	-32.687	10.329	1.00293.91	C
ATOM	344	CE2	TYR	A	42	29.479	-32.098	8.645	1.00306.12	C
ATOM	345	CZ	TYR	A	42	30.651	-31.847	9.325	1.00300.12	C
ATOM	346	OH	TYR	A	42	31.410	-30.751	9.003	1.00301.77	O
ATOM	347	N	GLU	A	43	25.144	-34.317	10.541	1.00153.18	N
ATOM	348	CA	GLU	A	43	24.121	-33.526	9.871	1.00140.73	C
ATOM	349	C	GLU	A	43	23.527	-32.450	10.782	1.00128.54	C
ATOM	350	O	GLU	A	43	22.748	-31.609	10.328	1.00116.29	O
ATOM	351	CB	GLU	A	43	23.026	-34.459	9.372	1.00152.32	C
ATOM	352	CG	GLU	A	43	23.554	-35.830	8.973	1.00166.24	C
ATOM	353	CD	GLU	A	43	22.471	-36.755	8.445	1.00170.43	C
ATOM	354	OE1	GLU	A	43	21.299	-36.641	8.878	1.00167.81	O
ATOM	355	OE2	GLU	A	43	22.798	-37.599	7.585	1.00177.54	O1-
ATOM	356	N	PHE	A	44	23.921	-32.484	12.060	1.00121.10	N
ATOM	357	CA	PHE	A	44	23.377	-31.631	13.127	1.00112.73	C
ATOM	358	C	PHE	A	44	24.286	-30.481	13.512	1.00108.09	C
ATOM	359	O	PHE	A	44	24.032	-29.821	14.511	1.00105.64	O
ATOM	360	CB	PHE	A	44	23.179	-32.448	14.403	1.00 88.81	C
ATOM	361	CG	PHE	A	44	22.017	-33.372	14.360	1.00 93.22	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	362	CD1	PHE	A	44	21.968	-34.475	15.186	1.00106.67	C
ATOM	363	CD2	PHE	A	44	20.968	-33.134	13.510	1.00 85.48	C
ATOM	364	CE1	PHE	A	44	20.893	-35.323	15.161	1.00112.56	C
ATOM	365	CE2	PHE	A	44	19.901	-33.980	13.479	1.00 90.70	C
ATOM	366	CZ	PHE	A	44	19.861	-35.073	14.311	1.00104.34	C
ATOM	367	N	PHE	A	45	25.359	-30.266	12.761	1.00112.62	N
ATOM	368	CA	PHE	A	45	26.336	-29.243	13.118	1.00109.00	C
ATOM	369	C	PHE	A	45	26.467	-28.139	12.085	1.00105.62	C
ATOM	370	O	PHE	A	45	26.350	-28.376	10.884	1.00105.20	O
ATOM	371	CB	PHE	A	45	27.717	-29.857	13.319	1.00 95.12	C
ATOM	372	CG	PHE	A	45	27.845	-30.681	14.554	1.00100.57	C
ATOM	373	CD1	PHE	A	45	27.682	-32.055	14.500	1.00115.50	C
ATOM	374	CD2	PHE	A	45	28.144	-30.090	15.768	1.00 92.81	C
ATOM	375	CE1	PHE	A	45	27.804	-32.831	15.642	1.00122.83	C
ATOM	376	CE2	PHE	A	45	28.253	-30.861	16.911	1.00 99.79	C
ATOM	377	CZ	PHE	A	45	28.086	-32.235	16.847	1.00114.95	C
ATOM	378	N	PHE	A	46	26.738	-26.935	12.573	1.00155.08	N
ATOM	379	CA	PHE	A	46	27.122	-25.820	11.729	1.00155.68	C
ATOM	380	C	PHE	A	46	28.044	-24.967	12.560	1.00156.35	C
ATOM	381	O	PHE	A	46	27.943	-24.994	13.781	1.00149.88	O
ATOM	382	CB	PHE	A	46	25.910	-25.009	11.354	1.00114.24	C
ATOM	383	CG	PHE	A	46	26.159	-24.038	10.255	1.00113.67	C
ATOM	384	CD1	PHE	A	46	26.004	-24.419	8.934	1.00112.74	C
ATOM	385	CD2	PHE	A	46	26.535	-22.738	10.534	1.00116.06	C
ATOM	386	CE1	PHE	A	46	26.222	-23.521	7.904	1.00114.30	C
ATOM	387	CE2	PHE	A	46	26.750	-21.836	9.512	1.00117.68	C
ATOM	388	CZ	PHE	A	46	26.593	-22.231	8.191	1.00116.88	C
ATOM	389	N	ASN	A	47	28.917	-24.202	11.908	1.00101.63	N
ATOM	390	CA	ASN	A	47	30.007	-23.484	12.593	1.00106.68	C
ATOM	391	C	ASN	A	47	30.564	-24.201	13.831	1.00103.22	C
ATOM	392	O	ASN	A	47	30.632	-23.621	14.922	1.00105.43	O
ATOM	393	CB	ASN	A	47	29.630	-22.036	12.935	1.00126.66	C
ATOM	394	CG	ASN	A	47	29.732	-21.109	11.744	1.00128.63	C
ATOM	395	ND2	ASN	A	47	29.088	-19.954	11.837	1.00131.15	N
ATOM	396	OD1	ASN	A	47	30.388	-21.424	10.752	1.00129.28	O
ATOM	397	N	ASP	A	48	30.943	-25.466	13.643	1.00175.68	N
ATOM	398	CA	ASP	A	48	31.617	-26.275	14.665	1.00174.71	C
ATOM	399	C	ASP	A	48	30.862	-26.409	15.995	1.00165.11	C
ATOM	400	O	ASP	A	48	31.480	-26.431	17.066	1.00166.52	O
ATOM	401	CB	ASP	A	48	33.036	-25.750	14.891	1.00202.00	C
ATOM	402	CG	ASP	A	48	33.733	-25.389	13.587	1.00208.42	C
ATOM	403	OD1	ASP	A	48	33.428	-26.018	12.552	1.00216.81	O
ATOM	404	OD2	ASP	A	48	34.579	-24.471	13.593	1.00206.30	O1-
ATOM	405	N	GLN	A	49	29.533	-26.516	15.903	1.00141.63	N
ATOM	406	CA	GLN	A	49	28.646	-26.648	17.064	1.00132.16	C
ATOM	407	C	GLN	A	49	27.227	-27.043	16.659	1.00128.75	C
ATOM	408	O	GLN	A	49	26.745	-26.642	15.602	1.00129.29	O
ATOM	409	CB	GLN	A	49	28.605	-25.351	17.881	1.00129.66	C
ATOM	410	CG	GLN	A	49	27.611	-25.365	19.036	1.00122.04	C
ATOM	411	CD	GLN	A	49	27.747	-26.590	19.936	1.00129.64	C
ATOM	412	NE2	GLN	A	49	26.771	-26.794	20.802	1.00129.14	N
ATOM	413	OE1	GLN	A	49	28.713	-27.339	19.850	1.00137.12	O
ATOM	414	N	LEU	A	50	26.566	-27.828	17.505	1.00126.52	N
ATOM	415	CA	LEU	A	50	25.189	-28.230	17.253	1.00122.81	C
ATOM	416	C	LEU	A	50	24.334	-27.017	16.927	1.00111.81	C
ATOM	417	O	LEU	A	50	24.649	-25.912	17.358	1.00106.80	O
ATOM	418	CB	LEU	A	50	24.627	-28.933	18.474	1.00 83.26	C
ATOM	419	CG	LEU	A	50	24.998	-30.402	18.599	1.00 96.89	C
ATOM	420	CD1	LEU	A	50	24.455	-30.971	19.889	1.00 97.06	C
ATOM	421	CD2	LEU	A	50	24.443	-31.168	17.419	1.00104.07	C
ATOM	422	N	MET	A	51	23.264	-27.200	16.155	1.00122.42	N

ES 2 587 302 T3

ATOM	423	CA	MET	A	51	22.383	-26.073	15.838	1.00114.07	C
ATOM	424	C	MET	A	51	21.060	-26.135	16.615	1.00105.80	C
ATOM	425	O	MET	A	51	20.753	-27.155	17.230	1.00107.72	O
ATOM	426	CB	MET	A	51	22.155	-25.901	14.314	1.00 73.95	C
ATOM	427	CG	MET	A	51	22.565	-27.082	13.416	1.00 87.79	C
ATOM	428	SD	MET	A	51	22.036	-27.105	11.656	1.00 96.79	S
ATOM	429	CE	MET	A	51	22.650	-25.557	11.028	1.00 91.19	C
ATOM	430	N	ILE	A	52	20.324	-25.015	16.585	1.00 93.52	N
ATOM	431	CA	ILE	A	52	18.999	-24.781	17.201	1.00 85.92	C
ATOM	432	C	ILE	A	52	17.899	-25.842	16.923	1.00 88.58	C
ATOM	433	O	ILE	A	52	17.932	-26.551	15.926	1.00 96.24	O
ATOM	434	CB	ILE	A	52	18.494	-23.403	16.727	1.00110.23	C
ATOM	435	CG1	ILE	A	52	18.855	-22.315	17.710	1.00109.11	C
ATOM	436	CG2	ILE	A	52	17.012	-23.355	16.578	1.00103.91	C
ATOM	437	CD1	ILE	A	52	18.214	-21.010	17.307	1.00106.71	C
ATOM	438	N	THR	A	53	16.900	-25.940	17.787	1.00 98.48	N
ATOM	439	CA	THR	A	53	15.912	-26.987	17.624	1.00101.54	C
ATOM	440	C	THR	A	53	14.474	-26.504	17.413	1.00 96.51	C
ATOM	441	O	THR	A	53	13.545	-27.286	17.471	1.00 98.25	O
ATOM	442	CB	THR	A	53	15.974	-27.925	18.813	1.00 80.27	C
ATOM	443	CG2	THR	A	53	14.911	-28.980	18.735	1.00 84.64	C
ATOM	444	OG1	THR	A	53	17.225	-28.592	18.794	1.00 87.48	O
ATOM	445	N	THR	A	54	14.257	-25.223	17.170	1.00 99.89	N
ATOM	446	CA	THR	A	54	12.905	-24.787	16.834	1.00 96.71	C
ATOM	447	C	THR	A	54	12.958	-23.629	15.892	1.00 97.73	C
ATOM	448	O	THR	A	54	13.678	-22.681	16.146	1.00 96.60	O
ATOM	449	CB	THR	A	54	12.091	-24.318	18.045	1.00121.81	C
ATOM	450	CG2	THR	A	54	10.775	-23.734	17.570	1.00119.64	C
ATOM	451	OG1	THR	A	54	11.803	-25.430	18.889	1.00122.60	O
ATOM	452	N	ASN	A	55	12.182	-23.697	14.822	1.00 98.54	N
ATOM	453	CA	ASN	A	55	12.148	-22.643	13.828	1.00102.33	C
ATOM	454	C	ASN	A	55	12.119	-21.258	14.494	1.00 97.61	C
ATOM	455	O	ASN	A	55	12.984	-20.400	14.255	1.00101.28	O
ATOM	456	CB	ASN	A	55	10.941	-22.888	12.894	1.00 81.50	C
ATOM	457	CG	ASN	A	55	10.827	-24.377	12.438	1.00 88.23	C
ATOM	458	ND2	ASN	A	55	10.616	-24.597	11.137	1.00 95.75	N
ATOM	459	OD1	ASN	A	55	10.947	-25.299	13.248	1.00 88.29	O
ATOM	460	N	ASP	A	56	11.126	-21.076	15.362	1.00121.13	N
ATOM	461	CA	ASP	A	56	10.965	-19.887	16.207	1.00117.88	C
ATOM	462	C	ASP	A	56	12.297	-19.259	16.601	1.00117.07	C
ATOM	463	O	ASP	A	56	12.484	-18.068	16.418	1.00118.42	O
ATOM	464	CB	ASP	A	56	10.151	-20.220	17.474	1.00136.91	C
ATOM	465	CG	ASP	A	56	8.698	-19.723	17.396	1.00138.43	C
ATOM	466	OD1	ASP	A	56	8.221	-19.437	16.265	1.00144.15	O
ATOM	467	OD2	ASP	A	56	8.029	-19.621	18.457	1.00135.05	O1-
ATOM	468	N	GLY	A	57	13.207	-20.064	17.149	1.00 70.21	N
ATOM	469	CA	GLY	A	57	14.538	-19.626	17.554	1.00 70.81	C
ATOM	470	C	GLY	A	57	15.299	-18.725	16.608	1.00 75.99	C
ATOM	471	O	GLY	A	57	15.845	-17.727	17.039	1.00 75.97	O
ATOM	472	N	TYR	A	58	15.328	-19.052	15.319	1.00 85.11	N
ATOM	473	CA	TYR	A	58	16.133	-18.231	14.403	1.00 92.16	C
ATOM	474	C	TYR	A	58	15.608	-16.814	14.322	1.00 92.98	C
ATOM	475	O	TYR	A	58	16.300	-15.908	13.889	1.00 98.40	O
ATOM	476	CB	TYR	A	58	16.208	-18.852	13.012	1.00101.12	C
ATOM	477	CG	TYR	A	58	16.982	-20.141	12.969	1.00102.31	C
ATOM	478	CD1	TYR	A	58	16.444	-21.300	13.476	1.00 98.50	C
ATOM	479	CD2	TYR	A	58	18.236	-20.208	12.398	1.00108.80	C
ATOM	480	CE1	TYR	A	58	17.123	-22.473	13.435	1.00101.81	C
ATOM	481	CE2	TYR	A	58	18.926	-21.401	12.359	1.00111.61	C
ATOM	482	CZ	TYR	A	58	18.357	-22.528	12.876	1.00108.49	C
ATOM	483	OH	TYR	A	58	19.015	-23.734	12.838	1.00113.67	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	2009	CB	ALA	A	245	10.116	6.531	39.701	1.00	98.29	C
ATOM	2010	N	LEU	A	246	7.826	5.463	40.891	1.00	137.85	N
ATOM	2011	CA	LEU	A	246	6.541	5.352	41.585	1.00	136.97	C
ATOM	2012	C	LEU	A	246	6.502	4.173	42.581	1.00	134.71	C
ATOM	2013	O	LEU	A	246	6.106	4.338	43.756	1.00	134.57	O
ATOM	2014	CB	LEU	A	246	5.414	5.281	40.536	1.00	98.43	C
ATOM	2015	CG	LEU	A	246	3.896	5.357	40.797	1.00	98.62	C
ATOM	2016	CD1	LEU	A	246	3.535	6.004	42.118	1.00	97.90	C
ATOM	2017	CD2	LEU	A	246	3.148	6.043	39.638	1.00	101.63	C
ATOM	2018	N	ILE	A	247	6.945	3.000	42.128	1.00	147.29	N
ATOM	2019	CA	ILE	A	247	7.143	1.857	43.028	1.00	145.70	C
ATOM	2020	C	ILE	A	247	8.042	2.195	44.210	1.00	145.63	C
ATOM	2021	O	ILE	A	247	7.605	2.120	45.354	1.00	145.11	O
ATOM	2022	CB	ILE	A	247	7.770	0.643	42.324	1.00	153.30	C
ATOM	2023	CG1	ILE	A	247	6.754	-0.016	41.398	1.00	153.79	C
ATOM	2024	CG2	ILE	A	247	8.278	-0.361	43.354	1.00	152.28	C
ATOM	2025	CD1	ILE	A	247	5.502	-0.480	42.099	1.00	153.89	C
ATOM	2026	N	VAL	A	248	9.297	2.551	43.939	1.00	146.05	N
ATOM	2027	CA	VAL	A	248	10.246	2.849	45.016	1.00	146.82	C
ATOM	2028	C	VAL	A	248	9.762	3.931	46.011	1.00	147.83	C
ATOM	2029	O	VAL	A	248	9.907	3.748	47.230	1.00	148.22	O
ATOM	2030	CB	VAL	A	248	11.697	3.117	44.521	1.00	113.59	C
ATOM	2031	CG1	VAL	A	248	12.280	4.394	45.165	1.00	116.05	C
ATOM	2032	CG2	VAL	A	248	12.578	1.894	44.833	1.00	113.62	C
ATOM	2033	N	LEU	A	249	9.172	5.032	45.524	1.00	150.31	N
ATOM	2034	CA	LEU	A	249	8.603	6.035	46.451	1.00	151.78	C
ATOM	2035	C	LEU	A	249	7.477	5.411	47.279	1.00	151.30	C
ATOM	2036	O	LEU	A	249	7.551	5.349	48.523	1.00	152.34	O
ATOM	2037	CB	LEU	A	249	8.118	7.315	45.741	1.00	144.65	C
ATOM	2038	CG	LEU	A	249	8.992	7.970	44.654	1.00	145.90	C
ATOM	2039	CD1	LEU	A	249	8.360	9.281	44.177	1.00	148.39	C
ATOM	2040	CD2	LEU	A	249	10.469	8.180	45.060	1.00	146.69	C
ATOM	2041	N	LEU	A	250	6.452	4.923	46.581	1.00	132.72	N
ATOM	2042	CA	LEU	A	250	5.361	4.210	47.248	1.00	132.24	C
ATOM	2043	C	LEU	A	250	5.825	3.060	48.149	1.00	132.34	C
ATOM	2044	O	LEU	A	250	5.017	2.438	48.838	1.00	130.99	O
ATOM	2045	CB	LEU	A	250	4.344	3.705	46.219	1.00	129.57	C
ATOM	2046	CG	LEU	A	250	3.189	4.679	46.007	1.00	126.87	C
ATOM	2047	CD1	LEU	A	250	2.429	4.408	44.719	1.00	126.29	C
ATOM	2048	CD2	LEU	A	250	2.275	4.606	47.215	1.00	123.21	C
ATOM	2049	N	PHE	A	251	7.125	2.784	48.136	1.00	158.70	N
ATOM	2050	CA	PHE	A	251	7.701	1.737	48.971	1.00	159.01	C
ATOM	2051	C	PHE	A	251	8.312	2.352	50.211	1.00	160.95	C
ATOM	2052	O	PHE	A	251	7.841	2.133	51.331	1.00	162.87	O
ATOM	2053	CB	PHE	A	251	8.780	0.980	48.198	1.00	152.51	C
ATOM	2054	CG	PHE	A	251	9.535	-0.030	49.020	1.00	153.54	C
ATOM	2055	CD1	PHE	A	251	9.041	-1.318	49.184	1.00	153.43	C
ATOM	2056	CD2	PHE	A	251	10.752	0.302	49.610	1.00	155.27	C
ATOM	2057	CE1	PHE	A	251	9.740	-2.255	49.927	1.00	155.07	C
ATOM	2058	CE2	PHE	A	251	11.456	-0.631	50.361	1.00	156.92	C
ATOM	2059	CZ	PHE	A	251	10.947	-1.913	50.518	1.00	156.85	C
ATOM	2060	N	ALA	A	252	9.367	3.130	50.011	1.00	185.80	N
ATOM	2061	CA	ALA	A	252	9.979	3.830	51.124	1.00	188.14	C
ATOM	2062	C	ALA	A	252	8.894	4.489	51.990	1.00	190.19	C
ATOM	2063	O	ALA	A	252	8.879	4.288	53.213	1.00	192.63	O
ATOM	2064	CB	ALA	A	252	11.025	4.849	50.632	1.00	128.44	C
ATOM	2065	N	ILE	A	253	7.965	5.243	51.394	1.00	172.52	N
ATOM	2066	CA	ILE	A	253	6.971	5.892	52.263	1.00	169.66	C
ATOM	2067	C	ILE	A	253	6.322	4.848	53.182	1.00	168.13	C
ATOM	2068	O	ILE	A	253	6.108	5.130	54.349	1.00	167.86	O
ATOM	2069	CB	ILE	A	253	5.838	6.709	51.563	1.00	133.74	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2070	CG1	ILE	A	253	4.830	5.760	50.903	1.00130.55	C
ATOM	2071	CG2	ILE	A	253	6.396	7.843	50.662	1.00129.83	C
ATOM	2072	CD1	ILE	A	253	3.634	6.430	50.292	1.00130.06	C
ATOM	2073	N	PHE	A	254	6.018	3.650	52.676	1.00131.78	N
ATOM	2074	CA	PHE	A	254	5.351	2.623	53.492	1.00131.17	C
ATOM	2075	C	PHE	A	254	6.256	1.955	54.524	1.00135.41	C
ATOM	2076	O	PHE	A	254	5.804	1.609	55.606	1.00135.83	O
ATOM	2077	CB	PHE	A	254	4.677	1.554	52.633	1.00159.50	C
ATOM	2078	CG	PHE	A	254	3.841	0.582	53.428	1.00159.06	C
ATOM	2079	CD1	PHE	A	254	2.472	0.773	53.557	1.00156.09	C
ATOM	2080	CD2	PHE	A	254	4.423	-0.514	54.064	1.00162.40	C
ATOM	2081	CE1	PHE	A	254	1.690	-0.118	54.290	1.00156.61	C
ATOM	2082	CE2	PHE	A	254	3.645	-1.409	54.803	1.00162.84	C
ATOM	2083	CZ	PHE	A	254	2.277	-1.208	54.915	1.00160.05	C
ATOM	2084	N	ALA	A	255	7.529	1.768	54.193	1.00166.44	N
ATOM	2085	CA	ALA	A	255	8.453	1.168	55.157	1.00170.21	C
ATOM	2086	C	ALA	A	255	8.801	2.119	56.300	1.00173.54	C
ATOM	2087	O	ALA	A	255	8.906	1.702	57.456	1.00176.36	O
ATOM	2088	CB	ALA	A	255	9.694	0.663	54.477	1.00193.12	C
ATOM	2089	N	PHE	A	256	9.027	3.390	55.969	1.00216.51	N
ATOM	2090	CA	PHE	A	256	9.470	4.338	56.996	1.00219.62	C
ATOM	2091	C	PHE	A	256	8.381	5.248	57.561	1.00216.93	C
ATOM	2092	O	PHE	A	256	8.632	5.997	58.501	1.00220.27	O
ATOM	2093	CB	PHE	A	256	10.630	5.174	56.472	1.00186.51	C
ATOM	2094	CG	PHE	A	256	11.791	4.356	55.992	1.00184.76	C
ATOM	2095	CD1	PHE	A	256	11.959	4.079	54.639	1.00181.06	C
ATOM	2096	CD2	PHE	A	256	12.724	3.874	56.890	1.00187.46	C
ATOM	2097	CE1	PHE	A	256	13.037	3.333	54.195	1.00180.06	C
ATOM	2098	CE2	PHE	A	256	13.804	3.127	56.451	1.00186.43	C
ATOM	2099	CZ	PHE	A	256	13.961	2.856	55.105	1.00182.70	C
ATOM	2100	N	LYS	A	257	7.183	5.205	56.981	1.00168.15	N
ATOM	2101	CA	LYS	A	257	6.028	5.895	57.580	1.00165.86	C
ATOM	2102	C	LYS	A	257	5.232	4.955	58.452	1.00165.71	C
ATOM	2103	O	LYS	A	257	4.017	5.105	58.586	1.00163.67	O
ATOM	2104	CB	LYS	A	257	5.104	6.525	56.545	1.00161.35	C
ATOM	2105	CG	LYS	A	257	5.769	7.632	55.766	1.00161.63	C
ATOM	2106	CD	LYS	A	257	6.310	8.740	56.635	1.00162.16	C
ATOM	2107	CE	LYS	A	257	7.264	9.564	55.780	1.00162.68	C
ATOM	2108	NZ	LYS	A	257	7.492	10.950	56.290	1.00163.50	N1+
ATOM	2109	N	GLU	A	258	5.934	3.984	59.029	1.00288.64	N
ATOM	2110	CA	GLU	A	258	5.438	3.249	60.186	1.00290.85	C
ATOM	2111	C	GLU	A	258	4.085	2.567	59.900	1.00286.08	C
ATOM	2112	O	GLU	A	258	4.031	1.354	59.671	1.00283.87	O
ATOM	2113	CB	GLU	A	258	5.398	4.194	61.419	1.00205.21	C
ATOM	2114	CG	GLU	A	258	6.767	4.887	61.730	1.00208.79	C
ATOM	2115	CD	GLU	A	258	6.695	6.018	62.772	1.00216.24	C
ATOM	2116	OE1	GLU	A	258	5.647	6.163	63.436	1.00219.90	O
ATOM	2117	OE2	GLU	A	258	7.696	6.761	62.926	1.00218.88	O1-
ATOM	2118	N	GLU	A	259	3.004	3.348	59.893	1.00365.15	N
ATOM	2119	CA	GLU	A	259	1.653	2.800	59.730	1.00361.63	C
ATOM	2120	C	GLU	A	259	0.632	3.783	59.156	1.00358.30	C
ATOM	2121	O	GLU	A	259	-0.517	3.413	58.928	1.00358.08	O
ATOM	2122	CB	GLU	A	259	1.113	2.277	61.079	1.00251.22	C
ATOM	2123	CG	GLU	A	259	1.497	0.834	61.443	1.00254.41	C
ATOM	2124	CD	GLU	A	259	0.508	0.166	62.396	1.00259.39	C
ATOM	2125	OE1	GLU	A	259	-0.587	0.722	62.621	1.00260.73	O
ATOM	2126	OE2	GLU	A	259	0.827	-0.924	62.918	1.00262.54	O1-
ATOM	2127	N	LYS	A	260	1.041	5.020	58.906	1.00241.79	N
ATOM	2128	CA	LYS	A	260	0.062	6.097	58.736	1.00239.90	C
ATOM	2129	C	LYS	A	260	-0.430	6.373	57.303	1.00234.85	C
ATOM	2130	O	LYS	A	260	0.097	7.227	56.577	1.00231.70	O

ATOM	2131	CB	LYS	A	260	0.537	7.344	59.483	1.00182.75	C
ATOM	2132	CG	LYS	A	260	0.824	7.011	60.961	1.00184.57	C
ATOM	2133	CD	LYS	A	260	1.130	8.238	61.843	1.00186.05	C
ATOM	2134	CE	LYS	A	260	1.437	7.805	63.285	1.00188.21	C
ATOM	2135	NZ	LYS	A	260	1.776	8.902	64.232	1.00190.30	N1+
ATOM	2136	N	ILE	A	261	-1.470	5.615	56.945	1.00183.71	N
ATOM	2137	CA	ILE	A	261	-2.108	5.600	55.635	1.00179.77	C
ATOM	2138	C	ILE	A	261	-3.481	4.933	55.811	1.00178.83	C
ATOM	2139	O	ILE	A	261	-3.553	3.792	56.261	1.00180.49	O
ATOM	2140	CB	ILE	A	261	-1.270	4.776	54.614	1.00157.66	C
ATOM	2141	CG1	ILE	A	261	0.121	5.395	54.392	1.00159.39	C
ATOM	2142	CG2	ILE	A	261	-1.978	4.699	53.299	1.00154.38	C
ATOM	2143	CD1	ILE	A	261	0.793	5.040	53.055	1.00160.26	C
ATOM	2144	N	ASN	A	262	-4.565	5.634	55.479	1.00208.67	N
ATOM	2145	CA	ASN	A	262	-5.908	5.072	55.689	1.00208.37	C
ATOM	2146	C	ASN	A	262	-6.506	4.494	54.411	1.00207.11	C
ATOM	2147	O	ASN	A	262	-6.082	4.840	53.314	1.00205.65	O
ATOM	2148	CB	ASN	A	262	-6.853	6.070	56.414	1.00198.83	C
ATOM	2149	CG	ASN	A	262	-7.616	6.995	55.465	1.00199.91	C
ATOM	2150	ND2	ASN	A	262	-8.556	7.758	56.026	1.00200.45	N
ATOM	2151	OD1	ASN	A	262	-7.371	7.025	54.256	1.00200.86	O
ATOM	2152	N	PHE	A	263	-7.464	3.588	54.561	1.00191.55	N
ATOM	2153	CA	PHE	A	263	-8.003	2.857	53.424	1.00190.99	C
ATOM	2154	C	PHE	A	263	-8.423	3.775	52.290	1.00189.19	C
ATOM	2155	O	PHE	A	263	-8.032	3.553	51.177	1.00188.44	O
ATOM	2156	CB	PHE	A	263	-9.150	1.926	53.850	1.00247.43	C
ATOM	2157	CG	PHE	A	263	-8.765	0.954	54.935	1.00250.75	C
ATOM	2158	CD1	PHE	A	263	-8.995	1.270	56.276	1.00253.88	C
ATOM	2159	CD2	PHE	A	263	-8.163	-0.263	54.623	1.00251.46	C
ATOM	2160	CE1	PHE	A	263	-8.640	0.388	57.284	1.00257.70	C
ATOM	2161	CE2	PHE	A	263	-7.806	-1.149	55.621	1.00255.06	C
ATOM	2162	CZ	PHE	A	263	-8.043	-0.828	56.952	1.00258.22	C
ATOM	2163	N	TYR	A	264	-9.186	4.818	52.556	1.00546.27	N
ATOM	2164	CA	TYR	A	264	-9.661	5.608	51.436	1.00545.95	C
ATOM	2165	C	TYR	A	264	-8.541	6.043	50.490	1.00546.08	C
ATOM	2166	O	TYR	A	264	-8.748	6.021	49.280	1.00546.05	O
ATOM	2167	CB	TYR	A	264	-10.510	6.789	51.896	1.00202.82	C
ATOM	2168	CG	TYR	A	264	-11.662	6.402	52.807	1.00205.02	C
ATOM	2169	CD1	TYR	A	264	-11.459	6.229	54.173	1.00206.95	C
ATOM	2170	CD2	TYR	A	264	-12.954	6.223	52.308	1.00206.01	C
ATOM	2171	CE1	TYR	A	264	-12.497	5.889	55.010	1.00209.97	C
ATOM	2172	CE2	TYR	A	264	-14.000	5.882	53.146	1.00208.85	C
ATOM	2173	CZ	TYR	A	264	-13.760	5.716	54.493	1.00210.90	C
ATOM	2174	OH	TYR	A	264	-14.787	5.375	55.336	1.00214.65	O
ATOM	2175	N	MET	A	265	-7.360	6.386	51.019	1.00187.35	N
ATOM	2176	CA	MET	A	265	-6.271	6.910	50.166	1.00187.43	C
ATOM	2177	C	MET	A	265	-5.578	5.791	49.380	1.00187.18	C
ATOM	2178	O	MET	A	265	-5.025	5.987	48.293	1.00187.39	O
ATOM	2179	CB	MET	A	265	-5.248	7.699	50.973	1.00200.06	C
ATOM	2180	CG	MET	A	265	-4.514	6.868	51.976	1.00201.03	C
ATOM	2181	SD	MET	A	265	-3.548	7.876	53.095	1.00206.42	S
ATOM	2182	CE	MET	A	265	-4.845	8.495	54.161	1.00211.39	C
ATOM	2183	N	ILE	A	266	-5.657	4.601	49.942	1.00190.87	N
ATOM	2184	CA	ILE	A	266	-5.234	3.419	49.246	1.00191.04	C
ATOM	2185	C	ILE	A	266	-6.212	3.047	48.132	1.00190.40	C
ATOM	2186	O	ILE	A	266	-5.781	2.646	47.087	1.00190.88	O
ATOM	2187	CB	ILE	A	266	-5.113	2.277	50.216	1.00104.23	C
ATOM	2188	CG1	ILE	A	266	-3.980	2.542	51.197	1.00107.32	C
ATOM	2189	CG2	ILE	A	266	-4.809	0.991	49.498	1.00102.85	C
ATOM	2190	CD1	ILE	A	266	-4.001	1.528	52.378	1.00108.65	C
ATOM	2191	N	TRP	A	267	-7.514	3.179	48.353	1.00193.99	N

ATOM	2192	CA	TRP	A 267	-8.510	2.860	47.343	1.00193.89	C
ATOM	2193	C	TRP	A 267	-8.474	3.922	46.266	1.00194.71	C
ATOM	2194	O	TRP	A 267	-8.915	3.710	45.148	1.00196.10	O
ATOM	2195	CB	TRP	A 267	-9.905	2.838	47.938	1.00245.86	C
ATOM	2196	CG	TRP	A 267	-10.126	1.879	49.083	1.00246.53	C
ATOM	2197	CD1	TRP	A 267	-10.137	2.178	50.410	1.00247.25	C
ATOM	2198	CD2	TRP	A 267	-10.418	0.481	48.987	1.00247.43	C
ATOM	2199	CE2	TRP	A 267	-10.581	-0.003	50.301	1.00248.80	C
ATOM	2200	CE3	TRP	A 267	-10.549	-0.408	47.919	1.00247.77	C
ATOM	2201	NE1	TRP	A 267	-10.406	1.054	51.152	1.00248.77	N
ATOM	2202	CZ2	TRP	A 267	-10.867	-1.339	50.571	1.00250.49	C
ATOM	2203	CZ3	TRP	A 267	-10.832	-1.733	48.189	1.00249.17	C
ATOM	2204	CH2	TRP	A 267	-10.989	-2.185	49.503	1.00250.52	C
ATOM	2205	N	ALA	A 268	-7.991	5.096	46.636	1.00150.54	N
ATOM	2206	CA	ALA	A 268	-7.699	6.092	45.632	1.00151.86	C
ATOM	2207	C	ALA	A 268	-6.416	5.711	44.867	1.00153.22	C
ATOM	2208	O	ALA	A 268	-6.384	5.821	43.668	1.00155.04	O
ATOM	2209	CB	ALA	A 268	-7.592	7.500	46.252	1.00339.87	C
ATOM	2210	N	LEU	A 269	-5.383	5.190	45.525	1.00161.65	N
ATOM	2211	CA	LEU	A 269	-4.244	4.659	44.768	1.00163.42	C
ATOM	2212	C	LEU	A 269	-4.655	3.576	43.770	1.00164.48	C
ATOM	2213	O	LEU	A 269	-4.129	3.496	42.653	1.00167.09	O
ATOM	2214	CB	LEU	A 269	-3.155	4.112	45.687	1.00130.43	C
ATOM	2215	CG	LEU	A 269	-2.236	5.207	46.226	1.00131.61	C
ATOM	2216	CD1	LEU	A 269	-1.619	4.765	47.531	1.00132.49	C
ATOM	2217	CD2	LEU	A 269	-1.184	5.553	45.203	1.00134.03	C
ATOM	2218	N	ILE	A 270	-5.561	2.721	44.201	1.00144.50	N
ATOM	2219	CA	ILE	A 270	-6.117	1.685	43.399	1.00145.80	C
ATOM	2220	C	ILE	A 270	-6.902	2.288	42.232	1.00147.24	C
ATOM	2221	O	ILE	A 270	-6.638	1.991	41.072	1.00150.35	O
ATOM	2222	CB	ILE	A 270	-6.994	0.762	44.282	1.00126.75	C
ATOM	2223	CG1	ILE	A 270	-6.110	-0.191	45.132	1.00126.20	C
ATOM	2224	CG2	ILE	A 270	-7.966	-0.036	43.431	1.00129.21	C
ATOM	2225	CD1	ILE	A 270	-6.874	-1.391	45.692	1.00127.29	C
ATOM	2226	N	PHE	A 271	-7.842	3.170	42.508	1.00193.51	N
ATOM	2227	CA	PHE	A 271	-8.676	3.740	41.443	1.00195.23	C
ATOM	2228	C	PHE	A 271	-7.879	4.524	40.397	1.00197.50	C
ATOM	2229	O	PHE	A 271	-8.010	4.293	39.191	1.00200.33	O
ATOM	2230	CB	PHE	A 271	-9.793	4.611	42.044	1.00193.39	C
ATOM	2231	CG	PHE	A 271	-10.809	5.090	41.047	1.00195.50	C
ATOM	2232	CD1	PHE	A 271	-12.113	4.617	41.084	1.00196.31	C
ATOM	2233	CD2	PHE	A 271	-10.462	6.013	40.074	1.00197.43	C
ATOM	2234	CE1	PHE	A 271	-13.057	5.068	40.172	1.00198.85	C
ATOM	2235	CE2	PHE	A 271	-11.401	6.466	39.157	1.00200.07	C
ATOM	2236	CZ	PHE	A 271	-12.703	5.987	39.210	1.00200.73	C
ATOM	2237	N	ILE	A 272	-7.087	5.464	40.884	1.00184.76	N
ATOM	2238	CA	ILE	A 272	-6.047	6.172	40.157	1.00187.26	C
ATOM	2239	C	ILE	A 272	-5.228	5.259	39.270	1.00190.34	C
ATOM	2240	O	ILE	A 272	-5.166	5.432	38.038	1.00193.61	O
ATOM	2241	CB	ILE	A 272	-5.062	6.850	41.149	1.00113.97	C
ATOM	2242	CG1	ILE	A 272	-5.534	8.271	41.479	1.00113.02	C
ATOM	2243	CG2	ILE	A 272	-3.639	6.861	40.584	1.00116.76	C
ATOM	2244	CD1	ILE	A 272	-4.599	9.060	42.380	1.00112.68	C
ATOM	2245	N	SER	A 273	-4.587	4.283	39.897	1.00164.58	N
ATOM	2246	CA	SER	A 273	-3.730	3.386	39.155	1.00167.90	C
ATOM	2247	C	SER	A 273	-4.515	2.688	38.029	1.00169.65	C
ATOM	2248	O	SER	A 273	-4.084	2.645	36.877	1.00174.04	O
ATOM	2249	CB	SER	A 273	-3.031	2.411	40.100	1.00119.10	C
ATOM	2250	OG	SER	A 273	-3.160	1.113	39.603	1.00115.75	O
ATOM	2251	N	ILE	A 274	-5.694	2.179	38.337	1.00169.90	N
ATOM	2252	CA	ILE	A 274	-6.561	1.577	37.317	1.00172.07	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2253	C	ILE	A	274	-6.960	2.578	36.208	1.00175.03	C
ATOM	2254	O	ILE	A	274	-7.308	2.205	35.065	1.00177.58	O
ATOM	2255	CB	ILE	A	274	-7.787	0.946	37.957	1.00145.16	C
ATOM	2256	CG1	ILE	A	274	-7.378	0.096	39.151	1.00143.34	C
ATOM	2257	CG2	ILE	A	274	-8.617	0.183	36.917	1.00147.78	C
ATOM	2258	CD1	ILE	A	274	-8.428	-0.885	39.564	1.00141.56	C
ATOM	2259	N	SER	A	275	-6.888	3.857	36.552	1.00169.27	N
ATOM	2260	CA	SER	A	275	-7.065	4.899	35.560	1.00173.61	C
ATOM	2261	C	SER	A	275	-5.842	4.946	34.661	1.00178.20	C
ATOM	2262	O	SER	A	275	-5.985	5.106	33.454	1.00183.96	O
ATOM	2263	CB	SER	A	275	-7.311	6.244	36.220	1.00192.31	C
ATOM	2264	OG	SER	A	275	-8.514	6.214	36.946	1.00190.15	O
ATOM	2265	N	ILE	A	276	-4.649	4.810	35.252	1.00142.57	N
ATOM	2266	CA	ILE	A	276	-3.416	4.606	34.456	1.00147.36	C
ATOM	2267	C	ILE	A	276	-3.626	3.448	33.459	1.00151.17	C
ATOM	2268	O	ILE	A	276	-3.540	3.625	32.219	1.00158.05	O
ATOM	2269	CB	ILE	A	276	-2.170	4.369	35.361	1.00110.04	C
ATOM	2270	CG1	ILE	A	276	-2.194	5.303	36.557	1.00105.49	C
ATOM	2271	CG2	ILE	A	276	-0.875	4.504	34.594	1.00115.98	C
ATOM	2272	CD1	ILE	A	276	-0.874	5.383	37.303	1.00104.00	C
ATOM	2273	N	LEU	A	277	-3.917	2.267	34.004	1.00145.97	N
ATOM	2274	CA	LEU	A	277	-4.420	1.190	33.143	1.00149.97	C
ATOM	2275	C	LEU	A	277	-5.304	1.721	32.003	1.00154.66	C
ATOM	2276	O	LEU	A	277	-4.946	1.529	30.848	1.00161.04	O
ATOM	2277	CB	LEU	A	277	-5.177	0.133	33.950	1.00112.57	C
ATOM	2278	CG	LEU	A	277	-4.604	-1.279	34.111	1.00113.30	C
ATOM	2279	CD1	LEU	A	277	-5.703	-2.345	34.248	1.00114.49	C
ATOM	2280	CD2	LEU	A	277	-3.709	-1.614	32.933	1.00118.87	C
ATOM	2281	N	HIS	A	278	-6.416	2.409	32.307	1.00182.05	N
ATOM	2282	CA	HIS	A	278	-7.357	2.854	31.248	1.00186.40	C
ATOM	2283	C	HIS	A	278	-6.754	3.737	30.159	1.00191.84	C
ATOM	2284	O	HIS	A	278	-6.982	3.512	28.974	1.00196.09	O
ATOM	2285	CB	HIS	A	278	-8.588	3.547	31.839	1.00191.54	C
ATOM	2286	CG	HIS	A	278	-9.799	3.449	30.974	1.00195.29	C
ATOM	2287	CD2	HIS	A	278	-10.262	4.245	29.980	1.00199.82	C
ATOM	2288	ND1	HIS	A	278	-10.684	2.396	31.062	1.00195.25	N
ATOM	2289	CE1	HIS	A	278	-11.649	2.559	30.179	1.00199.54	C
ATOM	2290	NE2	HIS	A	278	-11.417	3.675	29.508	1.00202.41	N
ATOM	2291	N	LEU	A	279	-6.012	4.755	30.578	1.00168.84	N
ATOM	2292	CA	LEU	A	279	-5.257	5.621	29.676	1.00174.55	C
ATOM	2293	C	LEU	A	279	-4.314	4.796	28.797	1.00180.49	C
ATOM	2294	O	LEU	A	279	-4.041	5.163	27.651	1.00184.38	O
ATOM	2295	CB	LEU	A	279	-4.475	6.650	30.505	1.00182.03	C
ATOM	2296	CG	LEU	A	279	-5.324	7.630	31.335	1.00176.44	C
ATOM	2297	CD1	LEU	A	279	-4.467	8.715	31.994	1.00175.10	C
ATOM	2298	CD2	LEU	A	279	-6.450	8.278	30.518	1.00178.52	C
ATOM	2299	N	SER	A	280	-3.813	3.676	29.327	1.00302.19	N
ATOM	2300	CA	SER	A	280	-2.890	2.850	28.522	1.00302.39	C
ATOM	2301	C	SER	A	280	-3.561	1.794	27.622	1.00306.20	C
ATOM	2302	O	SER	A	280	-3.263	1.687	26.437	1.00310.43	O
ATOM	2303	CB	SER	A	280	-1.819	2.212	29.415	1.00164.44	C
ATOM	2304	OG	SER	A	280	-0.958	3.204	29.940	1.00162.01	O
ATOM	2305	N	GLY	A	281	-4.469	1.023	28.200	1.00163.22	N
ATOM	2306	CA	GLY	A	281	-5.145	-0.056	27.504	1.00166.58	C
ATOM	2307	C	GLY	A	281	-5.208	-1.218	28.464	1.00162.51	C
ATOM	2308	O	GLY	A	281	-4.176	-1.649	28.977	1.00159.54	O
ATOM	2309	N	GLY	A	282	-6.411	-1.710	28.730	1.00130.45	N
ATOM	2310	CA	GLY	A	282	-6.591	-2.739	29.736	1.00126.52	C
ATOM	2311	C	GLY	A	282	-7.968	-3.371	29.687	1.00125.51	C
ATOM	2312	O	GLY	A	282	-8.888	-2.947	30.385	1.00121.64	O
TER	2313		GLY	A	282					

ES 2 587 302 T3

ATOM	2314	N	ALA	A	307	-14.527	-8.193	-0.017	1.00175.74	N
ATOM	2315	CA	ALA	A	307	-14.394	-8.729	1.337	1.00174.84	C
ATOM	2316	C	ALA	A	307	-13.117	-9.612	1.586	1.00163.71	C
ATOM	2317	O	ALA	A	307	-12.535	-9.567	2.674	1.00150.53	O
ATOM	2318	CB	ALA	A	307	-15.704	-9.440	1.748	1.00113.26	C
ATOM	2319	N	PHE	A	308	-12.688	-10.375	0.568	1.00187.16	N
ATOM	2320	CA	PHE	A	308	-11.426	-11.178	0.550	1.00177.79	C
ATOM	2321	C	PHE	A	308	-11.045	-12.059	1.765	1.00177.92	C
ATOM	2322	O	PHE	A	308	-10.471	-11.572	2.740	1.00159.69	O
ATOM	2323	CB	PHE	A	308	-10.219	-10.323	0.124	1.00137.61	C
ATOM	2324	CG	PHE	A	308	-10.059	-10.174	-1.380	1.00143.52	C
ATOM	2325	CD1	PHE	A	308	-11.096	-9.691	-2.162	1.00155.71	C
ATOM	2326	CD2	PHE	A	308	-8.861	-10.489	-1.998	1.00137.69	C
ATOM	2327	CE1	PHE	A	308	-10.948	-9.545	-3.533	1.00161.57	C
ATOM	2328	CE2	PHE	A	308	-8.709	-10.345	-3.353	1.00143.98	C
ATOM	2329	CZ	PHE	A	308	-9.757	-9.871	-4.128	1.00155.64	C
ATOM	2330	N	MET	A	309	-11.319	-13.365	1.642	1.00119.67	N
ATOM	2331	CA	MET	A	309	-11.128	-14.380	2.696	1.00119.95	C
ATOM	2332	C	MET	A	309	-10.104	-15.445	2.289	1.00120.03	C
ATOM	2333	O	MET	A	309	-10.145	-15.945	1.169	1.00140.09	O
ATOM	2334	CB	MET	A	309	-12.454	-15.105	2.991	1.00131.39	C
ATOM	2335	CG	MET	A	309	-13.750	-14.329	2.649	1.00138.38	C
ATOM	2336	SD	MET	A	309	-15.083	-15.298	1.887	1.00168.84	S
ATOM	2337	CE	MET	A	309	-15.306	-16.655	3.032	1.00156.15	C
ATOM	2338	N	TYR	A	310	-9.211	-15.815	3.205	1.00129.14	N
ATOM	2339	CA	TYR	A	310	-8.145	-16.786	2.920	1.00127.27	C
ATOM	2340	C	TYR	A	310	-8.216	-17.985	3.881	1.00134.24	C
ATOM	2341	O	TYR	A	310	-8.760	-17.861	4.967	1.00126.24	O
ATOM	2342	CB	TYR	A	310	-6.769	-16.113	3.024	1.00164.44	C
ATOM	2343	CG	TYR	A	310	-6.650	-14.785	2.291	1.00154.29	C
ATOM	2344	CD1	TYR	A	310	-7.116	-13.607	2.860	1.00138.43	C
ATOM	2345	CD2	TYR	A	310	-6.062	-14.706	1.035	1.00158.78	C
ATOM	2346	CE1	TYR	A	310	-7.015	-12.390	2.189	1.00132.38	C
ATOM	2347	CE2	TYR	A	310	-5.950	-13.494	0.367	1.00154.18	C
ATOM	2348	CZ	TYR	A	310	-6.427	-12.346	0.951	1.00143.70	C
ATOM	2349	OH	TYR	A	310	-6.318	-11.151	0.295	1.00141.27	O
ATOM	2350	N	PHE	A	311	-7.672	-19.134	3.481	1.00143.26	N
ATOM	2351	CA	PHE	A	311	-7.657	-20.360	4.301	1.00141.54	C
ATOM	2352	C	PHE	A	311	-7.080	-20.090	5.697	1.00111.27	C
ATOM	2353	O	PHE	A	311	-6.404	-19.097	5.893	1.00 94.87	O
ATOM	2354	CB	PHE	A	311	-6.831	-21.418	3.564	1.00121.05	C
ATOM	2355	CG	PHE	A	311	-6.846	-22.788	4.195	1.00113.65	C
ATOM	2356	CD1	PHE	A	311	-7.825	-23.699	3.882	1.00128.95	C
ATOM	2357	CD2	PHE	A	311	-5.839	-23.186	5.055	1.00 94.13	C
ATOM	2358	CE1	PHE	A	311	-7.816	-24.964	4.445	1.00124.20	C
ATOM	2359	CE2	PHE	A	311	-5.835	-24.452	5.617	1.00 90.22	C
ATOM	2360	CZ	PHE	A	311	-6.820	-25.334	5.314	1.00104.66	C
ATOM	2361	N	ASN	A	312	-7.317	-20.948	6.681	1.00135.60	N
ATOM	2362	CA	ASN	A	312	-6.910	-20.597	8.052	1.00109.71	C
ATOM	2363	C	ASN	A	312	-5.607	-21.245	8.537	1.00100.84	C
ATOM	2364	O	ASN	A	312	-5.510	-22.455	8.580	1.00105.05	O
ATOM	2365	CB	ASN	A	312	-8.048	-20.913	9.034	1.00144.47	C
ATOM	2366	CG	ASN	A	312	-7.798	-20.350	10.419	1.00121.46	C
ATOM	2367	ND2	ASN	A	312	-8.819	-20.385	11.264	1.00114.34	N
ATOM	2368	OD1	ASN	A	312	-6.695	-19.898	10.730	1.00112.03	O
ATOM	2369	N	VAL	A	313	-4.610	-20.462	8.936	1.00113.42	N
ATOM	2370	CA	VAL	A	313	-3.340	-21.068	9.372	1.00105.89	C
ATOM	2371	C	VAL	A	313	-3.399	-21.771	10.714	1.00 90.40	C
ATOM	2372	O	VAL	A	313	-2.353	-22.103	11.269	1.00 82.69	O
ATOM	2373	CB	VAL	A	313	-2.187	-20.042	9.520	1.00115.00	C
ATOM	2374	CG1	VAL	A	313	-0.949	-20.502	8.756	1.00111.77	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2375	CG2	VAL	A	313	-2.637	-18.664	9.095	1.00106.76	C
ATOM	2376	N	ASN	A	314	-4.587	-21.977	11.262	1.00123.80	N
ATOM	2377	CA	ASN	A	314	-4.652	-22.499	12.621	1.00110.32	C
ATOM	2378	C	ASN	A	314	-4.821	-24.020	12.708	1.00116.77	C
ATOM	2379	O	ASN	A	314	-4.246	-24.668	13.591	1.00109.60	O
ATOM	2380	CB	ASN	A	314	-5.690	-21.742	13.456	1.00139.52	C
ATOM	2381	CG	ASN	A	314	-5.211	-20.357	13.868	1.00129.81	C
ATOM	2382	ND2	ASN	A	314	-6.091	-19.369	13.762	1.00130.61	N
ATOM	2383	OD1	ASN	A	314	-4.063	-20.180	14.270	1.00122.88	O
ATOM	2384	N	GLU	A	315	-5.588	-24.596	11.788	1.00115.40	N
ATOM	2385	CA	GLU	A	315	-5.656	-26.050	11.697	1.00125.19	C
ATOM	2386	C	GLU	A	315	-4.414	-26.565	10.975	1.00132.69	C
ATOM	2387	O	GLU	A	315	-4.422	-27.637	10.362	1.00146.39	O
ATOM	2388	CB	GLU	A	315	-6.942	-26.515	10.996	1.00160.80	C
ATOM	2389	CG	GLU	A	315	-7.201	-25.902	9.629	1.00175.50	C
ATOM	2390	CD	GLU	A	315	-8.235	-24.796	9.678	1.00173.95	C
ATOM	2391	OE1	GLU	A	315	-8.801	-24.453	8.619	1.00190.25	O
ATOM	2392	OE2	GLU	A	315	-8.488	-24.269	10.780	1.00158.16	O1-
ATOM	2393	N	THR	A	316	-3.339	-25.787	11.064	1.00 73.77	N
ATOM	2394	CA	THR	A	316	-2.124	-26.064	10.313	1.00 81.39	C
ATOM	2395	C	THR	A	316	-0.876	-26.034	11.183	1.00 71.40	C
ATOM	2396	O	THR	A	316	0.114	-26.584	10.783	1.00 74.47	O
ATOM	2397	CB	THR	A	316	-1.989	-25.156	9.012	1.00 75.11	C
ATOM	2398	CG2	THR	A	316	-0.533	-24.776	8.692	1.00 73.66	C
ATOM	2399	OG1	THR	A	316	-2.542	-25.844	7.882	1.00 88.15	O
ATOM	2400	N	ILE	A	317	-0.914	-25.453	12.375	1.00103.51	N
ATOM	2401	CA	ILE	A	317	0.330	-25.297	13.147	1.00 92.03	C
ATOM	2402	C	ILE	A	317	0.639	-26.458	14.093	1.00 88.14	C
ATOM	2403	O	ILE	A	317	-0.193	-26.790	14.905	1.00 83.45	O
ATOM	2404	CB	ILE	A	317	0.284	-24.015	13.970	1.00100.78	C
ATOM	2405	CG1	ILE	A	317	-0.050	-22.834	13.051	1.00103.29	C
ATOM	2406	CG2	ILE	A	317	1.585	-23.837	14.750	1.00 87.94	C
ATOM	2407	CD1	ILE	A	317	0.837	-21.629	13.247	1.00 81.93	C
ATOM	2408	N	MET	A	318	1.819	-27.068	14.020	1.00 90.07	N
ATOM	2409	CA	MET	A	318	2.045	-28.308	14.784	1.00 90.23	C
ATOM	2410	C	MET	A	318	1.844	-28.122	16.272	1.00 77.84	C
ATOM	2411	O	MET	A	318	1.162	-28.899	16.954	1.00 79.97	O
ATOM	2412	CB	MET	A	318	3.477	-28.799	14.630	1.00102.79	C
ATOM	2413	CG	MET	A	318	3.923	-29.188	13.259	1.00117.25	C
ATOM	2414	SD	MET	A	318	5.343	-30.244	13.528	1.00117.44	S
ATOM	2415	CE	MET	A	318	4.584	-31.577	14.447	1.00123.04	C
ATOM	2416	N	GLU	A	319	2.540	-27.095	16.740	1.00106.62	N
ATOM	2417	CA	GLU	A	319	2.642	-26.628	18.108	1.00100.52	C
ATOM	2418	C	GLU	A	319	1.276	-26.424	18.777	1.00100.19	C
ATOM	2419	O	GLU	A	319	1.157	-26.312	19.995	1.00 98.86	O
ATOM	2420	CB	GLU	A	319	3.407	-25.309	18.013	1.00144.15	C
ATOM	2421	CG	GLU	A	319	3.623	-24.551	19.265	1.00138.48	C
ATOM	2422	CD	GLU	A	319	4.165	-23.174	18.984	1.00122.40	C
ATOM	2423	OE1	GLU	A	319	3.535	-22.442	18.186	1.00119.67	O
ATOM	2424	OE2	GLU	A	319	5.218	-22.826	19.563	1.00113.84	O1-
ATOM	2425	N	VAL	A	320	0.233	-26.399	17.971	1.00111.50	N
ATOM	2426	CA	VAL	A	320	-1.072	-26.032	18.472	1.00111.28	C
ATOM	2427	C	VAL	A	320	-2.153	-27.069	18.060	1.00118.34	C
ATOM	2428	O	VAL	A	320	-3.362	-26.811	18.107	1.00120.25	O
ATOM	2429	CB	VAL	A	320	-1.368	-24.594	18.034	1.00 97.62	C
ATOM	2430	CG1	VAL	A	320	-2.301	-24.564	16.836	1.00100.48	C
ATOM	2431	CG2	VAL	A	320	-1.880	-23.791	19.199	1.00 93.00	C
ATOM	2432	N	ASN	A	321	-1.678	-28.255	17.676	1.00122.50	N
ATOM	2433	CA	ASN	A	321	-2.514	-29.418	17.404	1.00134.71	C
ATOM	2434	C	ASN	A	321	-3.162	-29.808	18.728	1.00134.51	C
ATOM	2435	O	ASN	A	321	-2.835	-29.217	19.750	1.00128.33	O

ATOM	2436	CB	ASN	A	321	-1.631	-30.557	16.866	1.00121.08	C
ATOM	2437	CG	ASN	A	321	-2.430	-31.662	16.197	1.00137.54	C
ATOM	2438	ND2	ASN	A	321	-1.806	-32.826	16.026	1.00147.61	N
ATOM	2439	OD1	ASN	A	321	-3.590	-31.473	15.834	1.00142.36	O
ATOM	2440	N	THR	A	322	-4.054	-30.797	18.730	1.00 89.32	N
ATOM	2441	CA	THR	A	322	-4.792	-31.160	19.947	1.00 92.64	C
ATOM	2442	C	THR	A	322	-4.260	-32.362	20.733	1.00100.46	C
ATOM	2443	O	THR	A	322	-3.166	-32.854	20.476	1.00 99.98	O
ATOM	2444	CB	THR	A	322	-6.232	-31.428	19.606	1.00115.49	C
ATOM	2445	CG2	THR	A	322	-7.137	-30.828	20.674	1.00114.81	C
ATOM	2446	OG1	THR	A	322	-6.501	-30.836	18.333	1.00114.96	O
ATOM	2447	N	ILE	A	323	-5.021	-32.836	21.712	1.00 93.21	N
ATOM	2448	CA	ILE	A	323	-4.586	-34.051	22.381	1.00103.51	C
ATOM	2449	C	ILE	A	323	-5.684	-35.031	22.856	1.00120.09	C
ATOM	2450	O	ILE	A	323	-6.845	-34.647	23.074	1.00122.73	O
ATOM	2451	CB	ILE	A	323	-3.640	-33.744	23.545	1.00129.86	C
ATOM	2452	CG1	ILE	A	323	-2.689	-32.615	23.198	1.00114.82	C
ATOM	2453	CG2	ILE	A	323	-2.797	-34.944	23.840	1.00138.85	C
ATOM	2454	CD1	ILE	A	323	-1.255	-32.951	23.521	1.00110.80	C
ATOM	2455	N	ASP	A	324	-5.290	-36.306	22.972	1.00150.31	N
ATOM	2456	CA	ASP	A	324	-6.059	-37.328	23.671	1.00169.03	C
ATOM	2457	C	ASP	A	324	-5.674	-37.177	25.114	1.00171.97	C
ATOM	2458	O	ASP	A	324	-4.500	-37.265	25.443	1.00168.54	O
ATOM	2459	CB	ASP	A	324	-5.651	-38.735	23.235	1.00300.27	C
ATOM	2460	CG	ASP	A	324	-5.555	-38.883	21.740	1.00301.52	C
ATOM	2461	OD1	ASP	A	324	-6.283	-38.176	21.016	1.00296.97	O
ATOM	2462	OD2	ASP	A	324	-4.745	-39.718	21.290	1.00309.35	O1-
ATOM	2463	N	PRO	A	325	-6.660	-36.970	25.987	1.00119.92	N
ATOM	2464	CA	PRO	A	325	-6.387	-36.689	27.406	1.00116.77	C
ATOM	2465	C	PRO	A	325	-5.289	-37.582	27.992	1.00120.96	C
ATOM	2466	O	PRO	A	325	-4.703	-37.205	29.001	1.00117.32	O
ATOM	2467	CB	PRO	A	325	-7.743	-36.942	28.096	1.00 75.12	C
ATOM	2468	CG	PRO	A	325	-8.599	-37.658	27.050	1.00 84.10	C
ATOM	2469	CD	PRO	A	325	-8.093	-37.185	25.720	1.00 77.92	C
ATOM	2470	N	GLU	A	326	-5.024	-38.733	27.371	1.00 97.86	N
ATOM	2471	CA	GLU	A	326	-3.907	-39.587	27.761	1.00102.23	C
ATOM	2472	C	GLU	A	326	-2.635	-38.766	27.751	1.00 90.63	C
ATOM	2473	O	GLU	A	326	-1.945	-38.630	28.760	1.00 89.03	O
ATOM	2474	CB	GLU	A	326	-3.753	-40.753	26.778	1.00156.62	C
ATOM	2475	CG	GLU	A	326	-4.522	-42.018	27.145	1.00172.43	C
ATOM	2476	CD	GLU	A	326	-3.608	-43.191	27.483	1.00182.71	C
ATOM	2477	OE1	GLU	A	326	-2.373	-43.054	27.337	1.00177.63	O
ATOM	2478	OE2	GLU	A	326	-4.126	-44.251	27.896	1.00194.01	O1-
ATOM	2479	N	VAL	A	327	-2.332	-38.214	26.586	1.00107.83	N
ATOM	2480	CA	VAL	A	327	-1.151	-37.394	26.421	1.00 97.45	C
ATOM	2481	C	VAL	A	327	-1.326	-36.073	27.139	1.00 87.06	C
ATOM	2482	O	VAL	A	327	-0.365	-35.409	27.445	1.00 79.61	O
ATOM	2483	CB	VAL	A	327	-0.845	-37.077	24.943	1.00 93.06	C
ATOM	2484	CG1	VAL	A	327	0.647	-37.118	24.703	1.00 89.64	C
ATOM	2485	CG2	VAL	A	327	-1.574	-38.023	24.001	1.00104.31	C
ATOM	2486	N	PHE	A	328	-2.550	-35.647	27.379	1.00112.53	N
ATOM	2487	CA	PHE	A	328	-2.694	-34.447	28.165	1.00104.37	C
ATOM	2488	C	PHE	A	328	-1.977	-34.760	29.481	1.00106.93	C
ATOM	2489	O	PHE	A	328	-0.902	-34.188	29.792	1.00100.28	O
ATOM	2490	CB	PHE	A	328	-4.167	-34.109	28.365	1.00101.03	C
ATOM	2491	CG	PHE	A	328	-4.387	-32.867	29.147	1.00 93.62	C
ATOM	2492	CD1	PHE	A	328	-3.963	-31.650	28.657	1.00 82.73	C
ATOM	2493	CD2	PHE	A	328	-4.999	-32.912	30.384	1.00 98.87	C
ATOM	2494	CE1	PHE	A	328	-4.153	-30.497	29.383	1.00 76.72	C
ATOM	2495	CE2	PHE	A	328	-5.194	-31.766	31.110	1.00 93.36	C
ATOM	2496	CZ	PHE	A	328	-4.766	-30.559	30.607	1.00 82.00	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2497	N	MET	A	329	-2.540	-35.711	30.225	1.00117.86	N
ATOM	2498	CA	MET	A	329	-1.944	-36.114	31.483	1.00117.35	C
ATOM	2499	C	MET	A	329	-0.462	-36.240	31.259	1.00110.75	C
ATOM	2500	O	MET	A	329	0.289	-35.525	31.887	1.00101.60	O
ATOM	2501	CB	MET	A	329	-2.493	-37.437	32.000	1.00 98.43	C
ATOM	2502	CG	MET	A	329	-3.799	-37.860	31.382	1.00110.31	C
ATOM	2503	SD	MET	A	329	-5.165	-37.888	32.541	1.00116.50	S
ATOM	2504	CE	MET	A	329	-4.420	-38.796	33.867	1.00113.23	C
ATOM	2505	N	GLN	A	330	-0.041	-37.115	30.343	1.00105.00	N
ATOM	2506	CA	GLN	A	330	1.399	-37.367	30.124	1.00100.71	C
ATOM	2507	C	GLN	A	330	2.222	-36.102	30.035	1.00 91.11	C
ATOM	2508	O	GLN	A	330	2.953	-35.786	30.949	1.00 83.36	O
ATOM	2509	CB	GLN	A	330	1.639	-38.195	28.874	1.00102.82	C
ATOM	2510	CG	GLN	A	330	1.398	-39.665	29.071	1.00107.85	C
ATOM	2511	CD	GLN	A	330	1.223	-40.363	27.761	1.00122.03	C
ATOM	2512	NE2	GLN	A	330	0.346	-41.363	27.730	1.00130.98	N
ATOM	2513	OE1	GLN	A	330	1.852	-39.994	26.772	1.00121.89	O
ATOM	2514	N	ARG	A	331	2.129	-35.408	28.912	1.00 96.97	N
ATOM	2515	CA	ARG	A	331	2.624	-34.042	28.765	1.00 85.89	C
ATOM	2516	C	ARG	A	331	2.702	-33.229	30.069	1.00 80.67	C
ATOM	2517	O	ARG	A	331	3.740	-32.620	30.373	1.00 74.67	O
ATOM	2518	CB	ARG	A	331	1.779	-33.284	27.740	1.00 79.84	C
ATOM	2519	CG	ARG	A	331	2.069	-33.638	26.303	1.00 80.73	C
ATOM	2520	CD	ARG	A	331	1.532	-32.566	25.398	1.00 74.64	C
ATOM	2521	NE	ARG	A	331	2.523	-31.959	24.493	1.00 70.42	N
ATOM	2522	CZ	ARG	A	331	3.005	-30.714	24.606	1.00 62.18	C
ATOM	2523	NH1	ARG	A	331	2.615	-29.962	25.618	1.00 57.08	N1+
ATOM	2524	NH2	ARG	A	331	3.869	-30.208	23.721	1.00 60.28	N
ATOM	2525	N	ILE	A	332	1.620	-33.193	30.844	1.00 98.83	N
ATOM	2526	CA	ILE	A	332	1.718	-32.419	32.088	1.00 92.37	C
ATOM	2527	C	ILE	A	332	2.581	-33.059	33.192	1.00 89.45	C
ATOM	2528	O	ILE	A	332	3.304	-32.352	33.891	1.00 81.35	O
ATOM	2529	CB	ILE	A	332	0.355	-32.013	32.616	1.00 76.35	C
ATOM	2530	CG1	ILE	A	332	-0.197	-30.896	31.746	1.00 73.85	C
ATOM	2531	CG2	ILE	A	332	0.453	-31.545	34.045	1.00 75.38	C
ATOM	2532	CD1	ILE	A	332	-1.696	-30.719	31.864	1.00 77.04	C
ATOM	2533	N	SER	A	333	2.529	-34.386	33.331	1.00110.48	N
ATOM	2534	CA	SER	A	333	3.283	-35.090	34.383	1.00105.53	C
ATOM	2535	C	SER	A	333	4.077	-36.371	33.987	1.00106.71	C
ATOM	2536	O	SER	A	333	4.834	-36.899	34.797	1.00102.25	O
ATOM	2537	CB	SER	A	333	2.404	-35.327	35.631	1.00103.88	C
ATOM	2538	OG	SER	A	333	1.032	-35.491	35.309	1.00111.23	O
ATOM	2539	N	SER	A	334	3.923	-36.852	32.755	1.00134.83	N
ATOM	2540	CA	SER	A	334	4.670	-38.016	32.267	1.00137.43	C
ATOM	2541	C	SER	A	334	4.229	-39.293	32.939	1.00141.35	C
ATOM	2542	O	SER	A	334	5.076	-40.066	33.376	1.00138.10	O
ATOM	2543	CB	SER	A	334	6.172	-37.865	32.536	1.00113.58	C
ATOM	2544	OG	SER	A	334	6.726	-36.756	31.864	1.00112.61	O
ATOM	2545	N	SER	A	335	2.921	-39.513	33.031	1.00116.55	N
ATOM	2546	CA	SER	A	335	2.394	-40.663	33.767	1.00121.58	C
ATOM	2547	C	SER	A	335	0.984	-40.446	34.318	1.00126.73	C
ATOM	2548	O	SER	A	335	0.819	-39.797	35.351	1.00121.53	O
ATOM	2549	CB	SER	A	335	3.321	-41.008	34.930	1.00201.79	C
ATOM	2550	OG	SER	A	335	2.873	-42.164	35.606	1.00206.69	O
ATOM	2551	N	VAL	A	336	-0.026	-41.009	33.655	1.00 97.09	N
ATOM	2552	CA	VAL	A	336	-1.418	-40.834	34.093	1.00104.32	C
ATOM	2553	C	VAL	A	336	-1.676	-41.061	35.596	1.00103.23	C
ATOM	2554	O	VAL	A	336	-2.364	-40.282	36.234	1.00104.41	O
ATOM	2555	CB	VAL	A	336	-2.391	-41.694	33.261	1.00 72.65	C
ATOM	2556	CG1	VAL	A	336	-3.763	-41.730	33.911	1.00 81.04	C
ATOM	2557	CG2	VAL	A	336	-2.485	-41.145	31.863	1.00 76.89	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2558	N	LEU	A	337	-1.124	-42.131	36.149	1.00	95.54	N
ATOM	2559	CA	LEU	A	337	-1.267	-42.438	37.570	1.00	96.04	C
ATOM	2560	C	LEU	A	337	-0.732	-41.267	38.386	1.00	86.28	C
ATOM	2561	O	LEU	A	337	-1.375	-40.801	39.340	1.00	88.86	O
ATOM	2562	CB	LEU	A	337	-0.540	-43.773	37.881	1.00105.18	C	C
ATOM	2563	CG	LEU	A	337	-0.262	-44.417	39.251	1.00108.63	C	C
ATOM	2564	CD1	LEU	A	337	1.251	-44.363	39.562	1.00102.17	C	C
ATOM	2565	CD2	LEU	A	337	-1.115	-43.838	40.395	1.00113.44	C	C
ATOM	2566	N	VAL	A	338	0.430	-40.770	37.972	1.00121.98	N	N
ATOM	2567	CA	VAL	A	338	1.072	-39.633	38.618	1.00112.87	C	C
ATOM	2568	C	VAL	A	338	0.249	-38.356	38.449	1.00113.11	C	C
ATOM	2569	O	VAL	A	338	0.278	-37.485	39.297	1.00110.05	O	O
ATOM	2570	CB	VAL	A	338	2.495	-39.417	38.073	1.00103.18	C	C
ATOM	2571	CG1	VAL	A	338	3.196	-38.335	38.838	1.00	94.52	C
ATOM	2572	CG2	VAL	A	338	3.283	-40.675	38.195	1.00104.67	C	C
ATOM	2573	N	PHE	A	339	-0.482	-38.251	37.347	1.00100.43	N	N
ATOM	2574	CA	PHE	A	339	-1.354	-37.109	37.110	1.00102.54	C	C
ATOM	2575	C	PHE	A	339	-2.513	-37.158	38.089	1.00110.01	C	C
ATOM	2576	O	PHE	A	339	-2.877	-36.151	38.677	1.00108.63	O	O
ATOM	2577	CB	PHE	A	339	-1.863	-37.153	35.670	1.00102.69	C	C
ATOM	2578	CG	PHE	A	339	-2.704	-35.985	35.281	1.00105.67	C	C
ATOM	2579	CD1	PHE	A	339	-2.126	-34.838	34.823	1.00	98.28	C
ATOM	2580	CD2	PHE	A	339	-4.075	-36.049	35.352	1.00115.89	C	C
ATOM	2581	CE1	PHE	A	339	-2.897	-33.778	34.462	1.00	97.89	C
ATOM	2582	CE2	PHE	A	339	-4.850	-34.990	34.986	1.00115.55	C	C
ATOM	2583	CZ	PHE	A	339	-4.265	-33.857	34.544	1.00106.55	C	C
ATOM	2584	N	ILE	A	340	-3.086	-38.343	38.268	1.00105.04	N	N
ATOM	2585	CA	ILE	A	340	-4.210	-38.512	39.179	1.00114.56	C	C
ATOM	2586	C	ILE	A	340	-3.732	-38.322	40.603	1.00111.23	C	C
ATOM	2587	O	ILE	A	340	-4.528	-37.987	41.478	1.00117.87	O	O
ATOM	2588	CB	ILE	A	340	-4.886	-39.921	39.107	1.00	79.33	C
ATOM	2589	CG1	ILE	A	340	-4.449	-40.732	37.869	1.00	79.66	C
ATOM	2590	CG2	ILE	A	340	-6.397	-39.791	39.228	1.00	92.68	C
ATOM	2591	CD1	ILE	A	340	-5.507	-40.909	36.785	1.00	94.07	C
ATOM	2592	N	LEU	A	341	-2.443	-38.564	40.853	1.00124.70	N	N
ATOM	2593	CA	LEU	A	341	-1.915	-38.372	42.213	1.00122.51	C	C
ATOM	2594	C	LEU	A	341	-1.675	-36.892	42.492	1.00114.97	C	C
ATOM	2595	O	LEU	A	341	-1.931	-36.372	43.590	1.00117.40	O	O
ATOM	2596	CB	LEU	A	341	-0.623	-39.173	42.420	1.00	93.55	C
ATOM	2597	CG	LEU	A	341	-0.792	-40.684	42.642	1.00102.36	C	C
ATOM	2598	CD1	LEU	A	341	0.485	-41.274	43.192	1.00	98.73	C
ATOM	2599	CD2	LEU	A	341	-1.962	-40.950	43.575	1.00114.50	C	C
ATOM	2600	N	SER	A	342	-1.195	-36.229	41.450	1.00117.42	N	N
ATOM	2601	CA	SER	A	342	-0.830	-34.826	41.461	1.00109.95	C	C
ATOM	2602	C	SER	A	342	-2.061	-33.944	41.589	1.00116.30	C	C
ATOM	2603	O	SER	A	342	-2.040	-32.998	42.350	1.00114.72	O	O
ATOM	2604	CB	SER	A	342	-0.053	-34.470	40.186	1.00107.74	C	C
ATOM	2605	OG	SER	A	342	1.241	-35.050	40.170	1.00101.39	O	O
ATOM	2606	N	PHE	A	343	-3.125	-34.243	40.849	1.00109.43	N	N
ATOM	2607	CA	PHE	A	343	-4.345	-33.444	40.938	1.00116.56	C	C
ATOM	2608	C	PHE	A	343	-4.868	-33.407	42.377	1.00123.42	C	C
ATOM	2609	O	PHE	A	343	-5.201	-32.340	42.932	1.00124.68	O	O
ATOM	2610	CB	PHE	A	343	-5.405	-33.995	39.997	1.00105.45	C	C
ATOM	2611	CG	PHE	A	343	-6.533	-33.050	39.746	1.00112.23	C	C
ATOM	2612	CD1	PHE	A	343	-6.293	-31.780	39.262	1.00104.58	C	C
ATOM	2613	CD2	PHE	A	343	-7.842	-33.430	39.975	1.00125.43	C	C
ATOM	2614	CE1	PHE	A	343	-7.341	-30.903	39.020	1.00107.57	C	C
ATOM	2615	CE2	PHE	A	343	-8.893	-32.556	39.732	1.00128.52	C	C
ATOM	2616	CZ	PHE	A	343	-8.641	-31.297	39.255	1.00119.52	C	C
ATOM	2617	N	ILE	A	344	-4.918	-34.592	42.976	1.00106.23	N	N
ATOM	2618	CA	ILE	A	344	-5.310	-34.776	44.370	1.00114.20	C	C

ATOM	2619	C	ILE	A	344	-4.387	-34.005	45.301	1.00106.88	C
ATOM	2620	O	ILE	A	344	-4.855	-33.245	46.143	1.00111.23	O
ATOM	2621	CB	ILE	A	344	-5.283	-36.281	44.765	1.00 95.72	C
ATOM	2622	CG1	ILE	A	344	-6.407	-37.049	44.061	1.00106.22	C
ATOM	2623	CG2	ILE	A	344	-5.365	-36.440	46.282	1.00103.41	C
ATOM	2624	CD1	ILE	A	344	-6.182	-38.519	43.999	1.00109.60	C
ATOM	2625	N	GLY	A	345	-3.079	-34.209	45.146	1.00146.15	N
ATOM	2626	CA	GLY	A	345	-2.097	-33.502	45.952	1.00139.27	C
ATOM	2627	C	GLY	A	345	-2.283	-31.996	45.904	1.00135.87	C
ATOM	2628	O	GLY	A	345	-2.054	-31.285	46.889	1.00137.19	O
ATOM	2629	N	PHE	A	346	-2.709	-31.512	44.744	1.00115.18	N
ATOM	2630	CA	PHE	A	346	-2.958	-30.099	44.520	1.00112.99	C
ATOM	2631	C	PHE	A	346	-4.222	-29.651	45.237	1.00124.74	C
ATOM	2632	O	PHE	A	346	-4.249	-28.588	45.839	1.00125.67	O
ATOM	2633	CB	PHE	A	346	-3.077	-29.789	43.030	1.00 98.64	C
ATOM	2634	CG	PHE	A	346	-3.538	-28.396	42.757	1.00 98.12	C
ATOM	2635	CD1	PHE	A	346	-2.651	-27.338	42.795	1.00 89.67	C
ATOM	2636	CD2	PHE	A	346	-4.869	-28.134	42.499	1.00107.14	C
ATOM	2637	CE1	PHE	A	346	-3.083	-26.048	42.566	1.00 89.91	C
ATOM	2638	CE2	PHE	A	346	-5.305	-26.834	42.262	1.00107.47	C
ATOM	2639	CZ	PHE	A	346	-4.410	-25.795	42.299	1.00 98.76	C
ATOM	2640	N	ILE	A	347	-5.272	-30.464	45.147	1.00 73.68	N
ATOM	2641	CA	ILE	A	347	-6.518	-30.228	45.894	1.00 87.13	C
ATOM	2642	C	ILE	A	347	-6.334	-30.149	47.406	1.00 92.94	C
ATOM	2643	O	ILE	A	347	-6.794	-29.220	48.051	1.00100.18	O
ATOM	2644	CB	ILE	A	347	-7.537	-31.338	45.634	1.00118.59	C
ATOM	2645	CG1	ILE	A	347	-8.163	-31.168	44.251	1.00119.64	C
ATOM	2646	CG2	ILE	A	347	-8.587	-31.319	46.718	1.00133.19	C
ATOM	2647	CD1	ILE	A	347	-8.663	-29.754	44.000	1.00124.15	C
ATOM	2648	N	LEU	A	348	-5.679	-31.148	47.972	1.00101.38	N
ATOM	2649	CA	LEU	A	348	-5.405	-31.127	49.393	1.00108.57	C
ATOM	2650	C	LEU	A	348	-4.515	-29.933	49.695	1.00100.75	C
ATOM	2651	O	LEU	A	348	-4.876	-29.093	50.511	1.00108.29	O
ATOM	2652	CB	LEU	A	348	-4.753	-32.433	49.851	1.00 89.63	C
ATOM	2653	CG	LEU	A	348	-5.378	-33.744	49.328	1.00 96.29	C
ATOM	2654	CD1	LEU	A	348	-4.519	-34.996	49.646	1.00 97.45	C
ATOM	2655	CD2	LEU	A	348	-6.830	-33.902	49.791	1.00112.12	C
ATOM	2656	N	LEU	A	349	-3.372	-29.831	49.025	1.00118.99	N
ATOM	2657	CA	LEU	A	349	-2.490	-28.672	49.214	1.00111.31	C
ATOM	2658	C	LEU	A	349	-3.242	-27.342	49.280	1.00114.76	C
ATOM	2659	O	LEU	A	349	-2.961	-26.505	50.137	1.00118.34	O
ATOM	2660	CB	LEU	A	349	-1.450	-28.596	48.099	1.00121.61	C
ATOM	2661	CG	LEU	A	349	-0.489	-27.416	48.246	1.00113.95	C
ATOM	2662	CD1	LEU	A	349	0.261	-27.533	49.556	1.00117.98	C
ATOM	2663	CD2	LEU	A	349	0.483	-27.350	47.083	1.00101.54	C
ATOM	2664	N	CYS	A	350	-4.180	-27.148	48.354	1.00 90.70	N
ATOM	2665	CA	CYS	A	350	-5.038	-25.966	48.323	1.00 95.71	C
ATOM	2666	C	CYS	A	350	-5.873	-25.938	49.561	1.00110.49	C
ATOM	2667	O	CYS	A	350	-5.564	-25.191	50.471	1.00112.58	O
ATOM	2668	CB	CYS	A	350	-5.942	-25.950	47.097	1.00132.41	C
ATOM	2669	SG	CYS	A	350	-5.160	-25.200	45.688	1.00118.08	S
ATOM	2670	N	LYS	A	351	-6.913	-26.771	49.609	1.00113.12	N
ATOM	2671	CA	LYS	A	351	-7.763	-26.842	50.809	1.00129.61	C
ATOM	2672	C	LYS	A	351	-6.979	-27.408	51.999	1.00133.83	C
ATOM	2673	O	LYS	A	351	-7.437	-28.312	52.701	1.00146.83	O
ATOM	2674	CB	LYS	A	351	-9.049	-27.640	50.556	1.00192.81	C
ATOM	2675	CG	LYS	A	351	-9.415	-27.833	49.079	1.00186.98	C
ATOM	2676	CD	LYS	A	351	-9.666	-26.532	48.318	1.00183.00	C
ATOM	2677	CE	LYS	A	351	-9.740	-26.815	46.818	1.00174.54	C
ATOM	2678	NZ	LYS	A	351	-9.995	-25.605	46.007	1.00175.39	N1+
ATOM	2679	N	ASP	A	352	-5.767	-26.872	52.152	1.00118.85	N

ATOM	2680	CA	ASP	A	352	-4.907	-27.016	53.314	1.00121.87	C
ATOM	2681	C	ASP	A	352	-4.045	-25.754	53.437	1.00112.96	C
ATOM	2682	O	ASP	A	352	-3.298	-25.611	54.394	1.00114.88	O
ATOM	2683	CB	ASP	A	352	-3.977	-28.218	53.162	1.00149.20	C
ATOM	2684	CG	ASP	A	352	-4.420	-29.412	53.975	1.00161.40	C
ATOM	2685	OD1	ASP	A	352	-5.639	-29.589	54.168	1.00173.67	O
ATOM	2686	OD2	ASP	A	352	-3.543	-30.182	54.413	1.00159.77	O1-
ATOM	2687	N	HIS	A	353	-4.131	-24.841	52.471	1.00209.35	N
ATOM	2688	CA	HIS	A	353	-3.244	-23.674	52.482	1.00201.47	C
ATOM	2689	C	HIS	A	353	-3.786	-22.366	51.894	1.00198.70	C
ATOM	2690	O	HIS	A	353	-3.379	-21.287	52.318	1.00197.91	O
ATOM	2691	CB	HIS	A	353	-1.903	-24.029	51.858	1.00126.85	C
ATOM	2692	CG	HIS	A	353	-1.015	-24.817	52.772	1.00129.75	C
ATOM	2693	CD2	HIS	A	353	-1.056	-26.116	53.152	1.00133.06	C
ATOM	2694	ND1	HIS	A	353	0.055	-24.257	53.432	1.00130.13	N
ATOM	2695	CE1	HIS	A	353	0.645	-25.183	54.172	1.00133.49	C
ATOM	2696	NE2	HIS	A	353	-0.009	-26.316	54.023	1.00135.21	N
ATOM	2697	N	LYS	A	354	-4.679	-22.462	50.915	1.00114.05	N
ATOM	2698	CA	LYS	A	354	-5.429	-21.298	50.423	1.00114.96	C
ATOM	2699	C	LYS	A	354	-4.613	-20.440	49.484	1.00101.42	C
ATOM	2700	O	LYS	A	354	-5.130	-19.967	48.494	1.00 98.25	O
ATOM	2701	CB	LYS	A	354	-5.947	-20.426	51.576	1.00135.67	C
ATOM	2702	CG	LYS	A	354	-6.766	-21.152	52.633	1.00151.08	C
ATOM	2703	CD	LYS	A	354	-6.832	-20.334	53.930	1.00162.08	C
ATOM	2704	CE	LYS	A	354	-7.446	-21.144	55.074	1.00177.32	C
ATOM	2705	NZ	LYS	A	354	-7.740	-20.315	56.278	1.00189.65	N1+
ATOM	2706	N	SER	A	355	-3.347	-20.227	49.818	1.00144.90	N
ATOM	2707	CA	SER	A	355	-2.452	-19.419	48.997	1.00132.54	C
ATOM	2708	C	SER	A	355	-2.144	-20.131	47.693	1.00122.93	C
ATOM	2709	O	SER	A	355	-1.978	-19.508	46.639	1.00115.97	O
ATOM	2710	CB	SER	A	355	-1.149	-19.188	49.745	1.00 93.85	C
ATOM	2711	OG	SER	A	355	-1.360	-19.388	51.126	1.00105.18	O
ATOM	2712	N	MET	A	356	-2.050	-21.452	47.788	1.00126.34	N
ATOM	2713	CA	MET	A	356	-1.803	-22.304	46.642	1.00119.25	C
ATOM	2714	C	MET	A	356	-2.959	-22.137	45.675	1.00122.49	C
ATOM	2715	O	MET	A	356	-2.835	-22.400	44.491	1.00117.00	O
ATOM	2716	CB	MET	A	356	-1.664	-23.748	47.108	1.00136.92	C
ATOM	2717	CG	MET	A	356	-0.956	-24.650	46.138	1.00128.74	C
ATOM	2718	SD	MET	A	356	0.423	-23.887	45.260	1.00115.57	S
ATOM	2719	CE	MET	A	356	1.331	-23.144	46.603	1.00115.87	C
ATOM	2720	N	LEU	A	357	-4.082	-21.673	46.202	1.00106.80	N
ATOM	2721	CA	LEU	A	357	-5.246	-21.312	45.407	1.00112.14	C
ATOM	2722	C	LEU	A	357	-4.826	-20.252	44.390	1.00104.42	C
ATOM	2723	O	LEU	A	357	-5.324	-20.189	43.262	1.00103.17	O
ATOM	2724	CB	LEU	A	357	-6.319	-20.760	46.347	1.00 74.02	C
ATOM	2725	CG	LEU	A	357	-7.793	-20.976	46.079	1.00 84.79	C
ATOM	2726	CD1	LEU	A	357	-8.041	-22.437	45.784	1.00 89.96	C
ATOM	2727	CD2	LEU	A	357	-8.548	-20.528	47.293	1.00 95.56	C
ATOM	2728	N	LEU	A	358	-3.874	-19.431	44.797	1.00143.06	N
ATOM	2729	CA	LEU	A	358	-3.394	-18.370	43.947	1.00136.83	C
ATOM	2730	C	LEU	A	358	-2.688	-18.906	42.703	1.00128.42	C
ATOM	2731	O	LEU	A	358	-2.293	-18.128	41.846	1.00120.98	O
ATOM	2732	CB	LEU	A	358	-2.467	-17.454	44.736	1.00 79.64	C
ATOM	2733	CG	LEU	A	358	-3.109	-16.297	45.502	1.00 87.58	C
ATOM	2734	CD1	LEU	A	358	-2.059	-15.410	46.171	1.00 84.45	C
ATOM	2735	CD2	LEU	A	358	-3.976	-15.480	44.565	1.00 90.02	C
ATOM	2736	N	ALA	A	359	-2.526	-20.225	42.596	1.00117.46	N
ATOM	2737	CA	ALA	A	359	-1.943	-20.825	41.393	1.00110.57	C
ATOM	2738	C	ALA	A	359	-2.991	-21.071	40.329	1.00112.04	C
ATOM	2739	O	ALA	A	359	-2.661	-21.203	39.155	1.00107.22	O
ATOM	2740	CB	ALA	A	359	-1.250	-22.122	41.722	1.00 55.94	C

ATOM	2741	N	LEU	A	360	-4.255	-21.127	40.729	1.00100.35	N
ATOM	2742	CA	LEU	A	360	-5.298	-21.545	39.791	1.00102.23	C
ATOM	2743	C	LEU	A	360	-5.155	-21.092	38.323	1.00 91.77	C
ATOM	2744	O	LEU	A	360	-5.223	-21.940	37.436	1.00 90.97	O
ATOM	2745	CB	LEU	A	360	-6.714	-21.304	40.334	1.00 86.08	C
ATOM	2746	CG	LEU	A	360	-7.245	-22.410	41.259	1.00 97.27	C
ATOM	2747	CD1	LEU	A	360	-8.405	-21.892	42.096	1.00108.47	C
ATOM	2748	CD2	LEU	A	360	-7.632	-23.673	40.478	1.00 98.93	C
ATOM	2749	N	PRO	A	361	-4.936	-19.786	38.049	1.00109.37	N
ATOM	2750	CA	PRO	A	361	-4.771	-19.371	36.641	1.00 99.96	C
ATOM	2751	C	PRO	A	361	-3.810	-20.276	35.837	1.00 95.45	C
ATOM	2752	O	PRO	A	361	-4.186	-20.841	34.785	1.00 92.54	O
ATOM	2753	CB	PRO	A	361	-4.190	-17.965	36.766	1.00100.84	C
ATOM	2754	CG	PRO	A	361	-4.724	-17.462	38.041	1.00109.35	C
ATOM	2755	CD	PRO	A	361	-4.783	-18.647	38.968	1.00117.18	C
ATOM	2756	N	MET	A	362	-2.591	-20.437	36.354	1.00 91.41	N
ATOM	2757	CA	MET	A	362	-1.598	-21.284	35.712	1.00 88.29	C
ATOM	2758	C	MET	A	362	-2.046	-22.726	35.566	1.00 94.27	C
ATOM	2759	O	MET	A	362	-1.695	-23.378	34.596	1.00 92.67	O
ATOM	2760	CB	MET	A	362	-0.313	-21.262	36.490	1.00121.15	C
ATOM	2761	CG	MET	A	362	0.346	-19.943	36.517	1.00115.53	C
ATOM	2762	SD	MET	A	362	1.964	-20.289	37.179	1.00115.47	S
ATOM	2763	CE	MET	A	362	2.577	-21.432	35.949	1.00113.00	C
ATOM	2764	N	LEU	A	363	-2.794	-23.246	36.528	1.00 77.51	N
ATOM	2765	CA	LEU	A	363	-3.441	-24.521	36.298	1.00 84.28	C
ATOM	2766	C	LEU	A	363	-4.353	-24.401	35.072	1.00 83.43	C
ATOM	2767	O	LEU	A	363	-4.151	-25.090	34.062	1.00 82.17	O
ATOM	2768	CB	LEU	A	363	-4.241	-24.956	37.519	1.00 87.98	C
ATOM	2769	CG	LEU	A	363	-3.886	-26.280	38.209	1.00 91.72	C
ATOM	2770	CD1	LEU	A	363	-5.155	-27.035	38.601	1.00102.30	C
ATOM	2771	CD2	LEU	A	363	-3.003	-27.153	37.346	1.00 87.08	C
ATOM	2772	N	ALA	A	364	-5.321	-23.491	35.142	1.00 97.49	N
ATOM	2773	CA	ALA	A	364	-6.327	-23.364	34.097	1.00 94.39	C
ATOM	2774	C	ALA	A	364	-5.724	-23.288	32.684	1.00 85.52	C
ATOM	2775	O	ALA	A	364	-6.147	-24.034	31.782	1.00 87.12	O
ATOM	2776	CB	ALA	A	364	-7.210	-22.168	34.369	1.00 58.11	C
ATOM	2777	N	LEU	A	365	-4.737	-22.406	32.496	1.00 87.34	N
ATOM	2778	CA	LEU	A	365	-3.982	-22.333	31.242	1.00 80.83	C
ATOM	2779	C	LEU	A	365	-3.552	-23.711	30.676	1.00 84.14	C
ATOM	2780	O	LEU	A	365	-3.847	-24.039	29.512	1.00 84.01	O
ATOM	2781	CB	LEU	A	365	-2.771	-21.434	31.429	1.00 70.23	C
ATOM	2782	CG	LEU	A	365	-2.835	-20.170	30.591	1.00 64.27	C
ATOM	2783	CD1	LEU	A	365	-1.620	-19.285	30.808	1.00 59.42	C
ATOM	2784	CD2	LEU	A	365	-2.952	-20.587	29.149	1.00 65.04	C
ATOM	2785	N	GLY	A	366	-2.889	-24.524	31.505	1.00 67.04	N
ATOM	2786	CA	GLY	A	366	-2.543	-25.885	31.117	1.00 71.75	C
ATOM	2787	C	GLY	A	366	-3.745	-26.640	30.600	1.00 77.89	C
ATOM	2788	O	GLY	A	366	-3.724	-27.218	29.515	1.00 78.78	O
ATOM	2789	N	PHE	A	367	-4.823	-26.588	31.375	1.00 71.42	N
ATOM	2790	CA	PHE	A	367	-6.066	-27.240	30.998	1.00 78.25	C
ATOM	2791	C	PHE	A	367	-6.668	-26.615	29.751	1.00 74.00	C
ATOM	2792	O	PHE	A	367	-7.289	-27.317	28.941	1.00 78.79	O
ATOM	2793	CB	PHE	A	367	-7.051	-27.228	32.162	1.00101.89	C
ATOM	2794	CG	PHE	A	367	-6.720	-28.224	33.212	1.00110.77	C
ATOM	2795	CD1	PHE	A	367	-5.724	-27.961	34.139	1.00109.88	C
ATOM	2796	CD2	PHE	A	367	-7.370	-29.448	33.253	1.00121.37	C
ATOM	2797	CE1	PHE	A	367	-5.397	-28.890	35.105	1.00116.47	C
ATOM	2798	CE2	PHE	A	367	-7.051	-30.378	34.215	1.00130.87	C
ATOM	2799	CZ	PHE	A	367	-6.063	-30.099	35.147	1.00126.43	C
ATOM	2800	N	MET	A	368	-6.461	-25.303	29.579	1.00 99.95	N
ATOM	2801	CA	MET	A	368	-7.001	-24.636	28.406	1.00 97.12	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2802	C	MET	A	368	-6.453	-25.402	27.205	1.00	98.34	C
ATOM	2803	O	MET	A	368	-7.099	-25.509	26.162	1.00	101.82	O
ATOM	2804	CB	MET	A	368	-6.600	-23.162	28.374	1.00	156.82	C
ATOM	2805	CG	MET	A	368	-7.472	-22.333	27.455	1.00	156.31	C
ATOM	2806	SD	MET	A	368	-6.741	-20.775	26.914	1.00	148.84	S
ATOM	2807	CE	MET	A	368	-5.071	-21.281	26.509	1.00	144.89	C
ATOM	2808	N	ALA	A	369	-5.264	-25.975	27.388	1.00	101.72	N
ATOM	2809	CA	ALA	A	369	-4.633	-26.781	26.357	1.00	104.38	C
ATOM	2810	C	ALA	A	369	-5.658	-27.611	25.603	1.00	112.75	C
ATOM	2811	O	ALA	A	369	-5.743	-27.571	24.373	1.00	114.78	O
ATOM	2812	CB	ALA	A	369	-3.609	-27.688	26.986	1.00	57.03	C
ATOM	2813	N	LEU	A	370	-6.451	-28.348	26.364	1.00	96.79	N
ATOM	2814	CA	LEU	A	370	-7.365	-29.330	25.805	1.00	106.23	C
ATOM	2815	C	LEU	A	370	-8.276	-28.826	24.676	1.00	108.90	C
ATOM	2816	O	LEU	A	370	-8.794	-29.640	23.905	1.00	117.43	O
ATOM	2817	CB	LEU	A	370	-8.200	-29.973	26.917	1.00	76.60	C
ATOM	2818	CG	LEU	A	370	-7.478	-30.874	27.927	1.00	80.80	C
ATOM	2819	CD1	LEU	A	370	-8.226	-30.839	29.226	1.00	87.91	C
ATOM	2820	CD2	LEU	A	370	-7.310	-32.320	27.450	1.00	88.46	C
ATOM	2821	N	ARG	A	371	-8.478	-27.509	24.576	1.00	131.41	N
ATOM	2822	CA	ARG	A	371	-9.323	-26.943	23.509	1.00	134.77	C
ATOM	2823	C	ARG	A	371	-8.610	-25.804	22.795	1.00	128.27	C
ATOM	2824	O	ARG	A	371	-9.087	-25.264	21.795	1.00	131.74	O
ATOM	2825	CB	ARG	A	371	-10.682	-26.473	24.059	1.00	198.73	C
ATOM	2826	CG	ARG	A	371	-11.588	-25.813	23.024	1.00	205.14	C
ATOM	2827	CD	ARG	A	371	-13.045	-25.755	23.471	1.00	210.33	C
ATOM	2828	NE	ARG	A	371	-13.832	-26.885	22.967	1.00	221.24	N
ATOM	2829	CZ	ARG	A	371	-15.142	-26.843	22.712	1.00	229.21	C
ATOM	2830	NH1	ARG	A	371	-15.829	-25.723	22.905	1.00	227.57	N1+
ATOM	2831	NH2	ARG	A	371	-15.771	-27.922	22.256	1.00	239.74	N
ATOM	2832	N	ALA	A	372	-7.439	-25.467	23.314	1.00	114.42	N
ATOM	2833	CA	ALA	A	372	-6.744	-24.270	22.890	1.00	108.03	C
ATOM	2834	C	ALA	A	372	-5.497	-24.639	22.125	1.00	108.61	C
ATOM	2835	O	ALA	A	372	-5.127	-23.995	21.139	1.00	110.18	O
ATOM	2836	CB	ALA	A	372	-6.372	-23.436	24.097	1.00	84.76	C
ATOM	2837	N	GLY	A	373	-4.839	-25.683	22.599	1.00	111.34	N
ATOM	2838	CA	GLY	A	373	-3.588	-26.072	22.008	1.00	112.99	C
ATOM	2839	C	GLY	A	373	-2.767	-27.013	22.849	1.00	110.62	C
ATOM	2840	O	GLY	A	373	-2.909	-27.132	24.059	1.00	106.91	O
ATOM	2841	N	LEU	A	374	-1.886	-27.688	22.147	1.00	102.39	N
ATOM	2842	CA	LEU	A	374	-0.950	-28.613	22.711	1.00	102.03	C
ATOM	2843	C	LEU	A	374	0.087	-27.885	23.545	1.00	93.47	C
ATOM	2844	O	LEU	A	374	0.553	-28.401	24.549	1.00	93.01	O
ATOM	2845	CB	LEU	A	374	-0.282	-29.289	21.535	1.00	86.88	C
ATOM	2846	CG	LEU	A	374	1.045	-29.962	21.713	1.00	92.56	C
ATOM	2847	CD1	LEU	A	374	0.742	-31.384	21.388	1.00	100.36	C
ATOM	2848	CD2	LEU	A	374	2.020	-29.375	20.730	1.00	89.13	C
ATOM	2849	N	ARG	A	375	0.433	-26.672	23.128	1.00	116.01	N
ATOM	2850	CA	ARG	A	375	1.575	-25.959	23.689	1.00	109.23	C
ATOM	2851	C	ARG	A	375	1.279	-25.305	25.023	1.00	103.80	C
ATOM	2852	O	ARG	A	375	2.139	-24.614	25.577	1.00	98.87	O
ATOM	2853	CB	ARG	A	375	2.069	-24.894	22.713	1.00	128.87	C
ATOM	2854	CG	ARG	A	375	1.732	-23.477	23.119	1.00	121.80	C
ATOM	2855	CD	ARG	A	375	1.428	-22.627	21.911	1.00	123.54	C
ATOM	2856	NE	ARG	A	375	0.681	-21.442	22.287	1.00	119.69	N
ATOM	2857	CZ	ARG	A	375	1.244	-20.314	22.694	1.00	115.07	C
ATOM	2858	NH1	ARG	A	375	2.570	-20.239	22.758	1.00	113.68	N1+
ATOM	2859	NH2	ARG	A	375	0.486	-19.270	23.041	1.00	112.61	N
ATOM	2860	N	PHE	A	376	0.069	-25.528	25.533	1.00	82.23	N
ATOM	2861	CA	PHE	A	376	-0.364	-24.935	26.801	1.00	79.16	C
ATOM	2862	C	PHE	A	376	-0.187	-25.814	28.049	1.00	82.94	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2863	O	PHE	A	376	-0.044	-25.299	29.152	1.00	81.17	O
ATOM	2864	CB	PHE	A	376	-1.797	-24.422	26.690	1.00	91.91	C
ATOM	2865	CG	PHE	A	376	-1.939	-23.272	25.747	1.00	88.95	C
ATOM	2866	CD1	PHE	A	376	-2.610	-23.412	24.560	1.00	93.33	C
ATOM	2867	CD2	PHE	A	376	-1.372	-22.050	26.038	1.00	83.18	C
ATOM	2868	CE1	PHE	A	376	-2.737	-22.347	23.698	1.00	92.50	C
ATOM	2869	CE2	PHE	A	376	-1.485	-20.992	25.173	1.00	81.90	C
ATOM	2870	CZ	PHE	A	376	-2.168	-21.141	24.009	1.00	86.78	C
ATOM	2871	N	THR	A	377	-0.182	-27.128	27.866	1.00	96.80	N
ATOM	2872	CA	THR	A	377	0.033	-28.062	28.959	1.00	102.49	C
ATOM	2873	C	THR	A	377	1.177	-27.632	29.851	1.00	99.35	C
ATOM	2874	O	THR	A	377	1.133	-27.830	31.066	1.00	103.71	O
ATOM	2875	CB	THR	A	377	0.374	-29.429	28.418	1.00	95.16	C
ATOM	2876	CG2	THR	A	377	-0.858	-30.301	28.354	1.00	102.18	C
ATOM	2877	OG1	THR	A	377	0.879	-29.276	27.095	1.00	93.94	O
ATOM	2878	N	ILE	A	378	2.206	-27.060	29.234	1.00	89.89	N
ATOM	2879	CA	ILE	A	378	3.357	-26.465	29.935	1.00	86.38	C
ATOM	2880	C	ILE	A	378	2.981	-25.697	31.224	1.00	86.12	C
ATOM	2881	O	ILE	A	378	3.503	-25.978	32.320	1.00	89.03	O
ATOM	2882	CB	ILE	A	378	4.179	-25.560	28.957	1.00	82.11	C
ATOM	2883	CG1	ILE	A	378	5.442	-26.278	28.524	1.00	85.13	C
ATOM	2884	CG2	ILE	A	378	4.557	-24.222	29.588	1.00	77.01	C
ATOM	2885	CD1	ILE	A	378	6.511	-26.229	29.574	1.00	86.82	C
ATOM	2886	N	TYR	A	379	2.056	-24.751	31.077	1.00	101.64	N
ATOM	2887	CA	TYR	A	379	1.576	-23.924	32.178	1.00	102.12	C
ATOM	2888	C	TYR	A	379	1.164	-24.708	33.417	1.00	110.49	C
ATOM	2889	O	TYR	A	379	1.242	-24.209	34.534	1.00	110.87	O
ATOM	2890	CB	TYR	A	379	0.409	-23.084	31.696	1.00	109.19	C
ATOM	2891	CG	TYR	A	379	0.856	-21.980	30.805	1.00	101.72	C
ATOM	2892	CD1	TYR	A	379	0.213	-21.724	29.623	1.00	99.73	C
ATOM	2893	CD2	TYR	A	379	1.934	-21.191	31.148	1.00	98.11	C
ATOM	2894	CE1	TYR	A	379	0.627	-20.705	28.800	1.00	94.86	C
ATOM	2895	CE2	TYR	A	379	2.354	-20.158	30.342	1.00	92.60	C
ATOM	2896	CZ	TYR	A	379	1.697	-19.920	29.164	1.00	91.20	C
ATOM	2897	OH	TYR	A	379	2.095	-18.897	28.327	1.00	87.55	O
ATOM	2898	N	ALA	A	380	0.723	-25.941	33.230	1.00	103.63	N
ATOM	2899	CA	ALA	A	380	0.197	-26.668	34.362	1.00	110.75	C
ATOM	2900	C	ALA	A	380	1.200	-27.649	34.943	1.00	111.60	C
ATOM	2901	O	ALA	A	380	0.871	-28.361	35.876	1.00	114.84	O
ATOM	2902	CB	ALA	A	380	-1.102	-27.356	33.991	1.00	74.29	C
ATOM	2903	N	VAL	A	381	2.422	-27.681	34.408	1.00	98.72	N
ATOM	2904	CA	VAL	A	381	3.462	-28.554	34.981	1.00	97.25	C
ATOM	2905	C	VAL	A	381	3.814	-28.183	36.424	1.00	91.79	C
ATOM	2906	O	VAL	A	381	3.442	-28.912	37.356	1.00	93.16	O
ATOM	2907	CB	VAL	A	381	4.780	-28.604	34.144	1.00	92.37	C
ATOM	2908	CG1	VAL	A	381	5.941	-29.044	35.009	1.00	86.11	C
ATOM	2909	CG2	VAL	A	381	4.645	-29.541	32.956	1.00	97.81	C
ATOM	2910	N	PRO	A	382	4.500	-27.030	36.620	1.00	106.48	N
ATOM	2911	CA	PRO	A	382	5.094	-26.692	37.923	1.00	101.42	C
ATOM	2912	C	PRO	A	382	4.086	-26.775	39.061	1.00	105.14	C
ATOM	2913	O	PRO	A	382	4.361	-27.454	40.051	1.00	104.48	O
ATOM	2914	CB	PRO	A	382	5.615	-25.264	37.727	1.00	100.16	C
ATOM	2915	CG	PRO	A	382	4.898	-24.739	36.551	1.00	104.33	C
ATOM	2916	CD	PRO	A	382	4.595	-25.907	35.671	1.00	108.77	C
ATOM	2917	N	VAL	A	383	2.928	-26.140	38.911	1.00	97.60	N
ATOM	2918	CA	VAL	A	383	1.870	-26.291	39.900	1.00	103.06	C
ATOM	2919	C	VAL	A	383	1.545	-27.763	40.188	1.00	107.57	C
ATOM	2920	O	VAL	A	383	1.662	-28.242	41.333	1.00	109.05	O
ATOM	2921	CB	VAL	A	383	0.611	-25.563	39.469	1.00	103.21	C
ATOM	2922	CG1	VAL	A	383	-0.575	-26.061	40.266	1.00	111.54	C
ATOM	2923	CG2	VAL	A	383	0.798	-24.087	39.672	1.00	100.27	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	2924	N	MET	A	384	1.188	-28.500	39.143	1.00100.40	N
ATOM	2925	CA	MET	A	384	0.799	-29.881	39.337	1.00105.64	C
ATOM	2926	C	MET	A	384	1.965	-30.695	39.864	1.00100.96	C
ATOM	2927	O	MET	A	384	1.815	-31.864	40.163	1.00105.36	O
ATOM	2928	CB	MET	A	384	0.312	-30.468	38.028	1.00 90.90	C
ATOM	2929	CG	MET	A	384	-1.081	-30.090	37.659	1.00 98.89	C
ATOM	2930	SD	MET	A	384	-2.145	-31.447	38.083	1.00108.88	S
ATOM	2931	CE	MET	A	384	-3.062	-30.734	39.434	1.00114.86	C
ATOM	2932	N	ALA	A	385	3.140	-30.088	39.967	1.00 98.36	N
ATOM	2933	CA	ALA	A	385	4.255	-30.791	40.582	1.00 94.74	C
ATOM	2934	C	ALA	A	385	4.228	-30.598	42.105	1.00 96.47	C
ATOM	2935	O	ALA	A	385	4.325	-31.563	42.860	1.00100.02	O
ATOM	2936	CB	ALA	A	385	5.583	-30.355	39.969	1.00 67.86	C
ATOM	2937	N	LEU	A	386	4.047	-29.360	42.555	1.00 89.28	N
ATOM	2938	CA	LEU	A	386	3.955	-29.116	43.992	1.00 93.32	C
ATOM	2939	C	LEU	A	386	2.855	-30.018	44.520	1.00102.65	C
ATOM	2940	O	LEU	A	386	3.035	-30.702	45.529	1.00107.26	O
ATOM	2941	CB	LEU	A	386	3.625	-27.649	44.310	1.00103.55	C
ATOM	2942	CG	LEU	A	386	4.666	-26.565	44.022	1.00 96.51	C
ATOM	2943	CD1	LEU	A	386	4.075	-25.179	44.191	1.00 97.95	C
ATOM	2944	CD2	LEU	A	386	5.882	-26.739	44.911	1.00 95.65	C
ATOM	2945	N	GLY	A	387	1.720	-30.013	43.820	1.00113.25	N
ATOM	2946	CA	GLY	A	387	0.622	-30.907	44.120	1.00123.20	C
ATOM	2947	C	GLY	A	387	1.178	-32.278	44.414	1.00124.98	C
ATOM	2948	O	GLY	A	387	1.073	-32.774	45.540	1.00132.11	O
ATOM	2949	N	PHE	A	388	1.799	-32.881	43.404	1.00 97.65	N
ATOM	2950	CA	PHE	A	388	2.362	-34.200	43.591	1.00 99.25	C
ATOM	2951	C	PHE	A	388	3.169	-34.261	44.872	1.00 99.15	C
ATOM	2952	O	PHE	A	388	2.903	-35.118	45.712	1.00106.62	O
ATOM	2953	CB	PHE	A	388	3.205	-34.656	42.408	1.00 96.65	C
ATOM	2954	CG	PHE	A	388	3.803	-36.033	42.597	1.00 98.65	C
ATOM	2955	CD1	PHE	A	388	2.998	-37.162	42.584	1.00106.64	C
ATOM	2956	CD2	PHE	A	388	5.165	-36.204	42.802	1.00 93.99	C
ATOM	2957	CE1	PHE	A	388	3.535	-38.421	42.759	1.00109.13	C
ATOM	2958	CE2	PHE	A	388	5.704	-37.468	42.974	1.00 96.80	C
ATOM	2959	CZ	PHE	A	388	4.887	-38.573	42.949	1.00104.21	C
ATOM	2960	N	GLY	A	389	4.121	-33.348	45.037	1.00101.70	N
ATOM	2961	CA	GLY	A	389	4.922	-33.330	46.243	1.00103.09	C
ATOM	2962	C	GLY	A	389	4.076	-33.399	47.492	1.00113.09	C
ATOM	2963	O	GLY	A	389	4.266	-34.262	48.353	1.00118.89	O
ATOM	2964	N	TYR	A	390	3.111	-32.503	47.586	1.00 97.55	N
ATOM	2965	CA	TYR	A	390	2.279	-32.464	48.758	1.00108.69	C
ATOM	2966	C	TYR	A	390	1.700	-33.842	49.031	1.00118.30	C
ATOM	2967	O	TYR	A	390	1.732	-34.302	50.169	1.00128.03	O
ATOM	2968	CB	TYR	A	390	1.190	-31.393	48.612	1.00 83.94	C
ATOM	2969	CG	TYR	A	390	0.539	-31.065	49.936	1.00 96.11	C
ATOM	2970	CD1	TYR	A	390	1.292	-30.547	50.988	1.00 98.75	C
ATOM	2971	CD2	TYR	A	390	-0.817	-31.297	50.150	1.00106.55	C
ATOM	2972	CE1	TYR	A	390	0.715	-30.266	52.210	1.00111.76	C
ATOM	2973	CE2	TYR	A	390	-1.404	-31.004	51.371	1.00119.37	C
ATOM	2974	CZ	TYR	A	390	-0.629	-30.489	52.397	1.00122.09	C
ATOM	2975	OH	TYR	A	390	-1.194	-30.190	53.615	1.00135.51	O
ATOM	2976	N	PHE	A	391	1.209	-34.511	47.987	1.00 95.44	N
ATOM	2977	CA	PHE	A	391	0.551	-35.813	48.139	1.00105.32	C
ATOM	2978	C	PHE	A	391	1.415	-36.836	48.859	1.00108.94	C
ATOM	2979	O	PHE	A	391	0.910	-37.753	49.487	1.00120.58	O
ATOM	2980	CB	PHE	A	391	0.105	-36.372	46.789	1.00 98.96	C
ATOM	2981	CG	PHE	A	391	-0.448	-37.761	46.889	1.00108.46	C
ATOM	2982	CD1	PHE	A	391	-1.780	-37.963	47.200	1.00119.56	C
ATOM	2983	CD2	PHE	A	391	0.366	-38.866	46.723	1.00107.23	C
ATOM	2984	CE1	PHE	A	391	-2.288	-39.231	47.321	1.00129.25	C

ATOM	2985	CE2	PHE	A	391	-0.142	-40.130	46.844	1.00116.62	C
ATOM	2986	CZ	PHE	A	391	-1.468	-40.312	47.145	1.00127.63	C
ATOM	2987	N	LEU	A	392	2.731	-36.698	48.707	1.00 96.01	N
ATOM	2988	CA	LEU	A	392	3.631	-37.628	49.379	1.00 99.46	C
ATOM	2989	C	LEU	A	392	3.561	-37.301	50.861	1.00109.40	C
ATOM	2990	O	LEU	A	392	3.227	-38.172	51.663	1.00121.14	O
ATOM	2991	CB	LEU	A	392	5.049	-37.495	48.837	1.00121.08	C
ATOM	2992	CG	LEU	A	392	5.131	-37.568	47.314	1.00111.74	C
ATOM	2993	CD1	LEU	A	392	6.577	-37.697	46.827	1.00103.61	C
ATOM	2994	CD2	LEU	A	392	4.282	-38.698	46.744	1.00117.64	C
ATOM	2995	N	TYR	A	393	3.815	-36.033	51.209	1.00119.06	N
ATOM	2996	CA	TYR	A	393	3.628	-35.541	52.582	1.00130.15	C
ATOM	2997	C	TYR	A	393	2.281	-36.035	53.065	1.00144.19	C
ATOM	2998	O	TYR	A	393	2.201	-36.904	53.933	1.00157.12	O
ATOM	2999	CB	TYR	A	393	3.692	-34.004	52.641	1.00112.37	C
ATOM	3000	CG	TYR	A	393	3.201	-33.397	53.946	1.00125.80	C
ATOM	3001	CD1	TYR	A	393	3.820	-33.694	55.160	1.00133.99	C
ATOM	3002	CD2	TYR	A	393	2.125	-32.523	53.963	1.00130.39	C
ATOM	3003	CE1	TYR	A	393	3.366	-33.137	56.366	1.00144.94	C
ATOM	3004	CE2	TYR	A	393	1.666	-31.963	55.158	1.00141.11	C
ATOM	3005	CZ	TYR	A	393	2.290	-32.274	56.354	1.00148.44	C
ATOM	3006	OH	TYR	A	393	1.837	-31.720	57.531	1.00160.48	O
ATOM	3007	N	ALA	A	394	1.228	-35.478	52.476	1.00102.65	N
ATOM	3008	CA	ALA	A	394	-0.119	-36.008	52.611	1.00115.19	C
ATOM	3009	C	ALA	A	394	-0.084	-37.475	53.024	1.00124.99	C
ATOM	3010	O	ALA	A	394	-0.420	-37.816	54.165	1.00141.05	O
ATOM	3011	CB	ALA	A	394	-0.881	-35.847	51.282	1.00107.62	C
ATOM	3012	N	PHE	A	395	0.362	-38.326	52.099	1.00119.60	N
ATOM	3013	CA	PHE	A	395	0.340	-39.778	52.282	1.00127.72	C
ATOM	3014	C	PHE	A	395	1.146	-40.260	53.486	1.00136.71	C
ATOM	3015	O	PHE	A	395	0.660	-41.056	54.301	1.00151.88	O
ATOM	3016	CB	PHE	A	395	0.842	-40.482	51.019	1.00 95.65	C
ATOM	3017	CG	PHE	A	395	0.877	-41.999	51.134	1.00103.52	C
ATOM	3018	CD1	PHE	A	395	-0.248	-42.762	50.808	1.00110.73	C
ATOM	3019	CD2	PHE	A	395	2.028	-42.655	51.567	1.00104.72	C
ATOM	3020	CE1	PHE	A	395	-0.220	-44.114	50.909	1.00118.62	C
ATOM	3021	CE2	PHE	A	395	2.054	-44.010	51.672	1.00112.59	C
ATOM	3022	CZ	PHE	A	395	0.936	-44.742	51.341	1.00119.37	C
ATOM	3023	N	PHE	A	396	2.381	-39.780	53.589	1.00114.08	N
ATOM	3024	CA	PHE	A	396	3.247	-40.167	54.695	1.00123.19	C
ATOM	3025	C	PHE	A	396	2.649	-39.721	56.025	1.00139.33	C
ATOM	3026	O	PHE	A	396	3.132	-40.089	57.091	1.00151.90	O
ATOM	3027	CB	PHE	A	396	4.648	-39.596	54.499	1.00153.01	C
ATOM	3028	CG	PHE	A	396	5.539	-40.476	53.696	1.00143.64	C
ATOM	3029	CD1	PHE	A	396	5.062	-41.104	52.568	1.00134.68	C
ATOM	3030	CD2	PHE	A	396	6.849	-40.685	54.074	1.00145.23	C
ATOM	3031	CE1	PHE	A	396	5.876	-41.932	51.829	1.00127.43	C
ATOM	3032	CE2	PHE	A	396	7.670	-41.507	53.340	1.00137.64	C
ATOM	3033	CZ	PHE	A	396	7.186	-42.133	52.216	1.00128.70	C
ATOM	3034	N	ASN	A	397	1.595	-38.916	55.941	1.00143.78	N
ATOM	3035	CA	ASN	A	397	0.785	-38.600	57.099	1.00161.55	C
ATOM	3036	C	ASN	A	397	-0.102	-39.769	57.481	1.00176.58	C
ATOM	3037	O	ASN	A	397	-0.008	-40.274	58.597	1.00193.28	O
ATOM	3038	CB	ASN	A	397	-0.074	-37.377	56.839	1.00141.11	C
ATOM	3039	CG	ASN	A	397	0.286	-36.242	57.737	1.00138.39	C
ATOM	3040	ND2	ASN	A	397	-0.719	-35.638	58.357	1.00141.77	N
ATOM	3041	OD1	ASN	A	397	1.465	-35.925	57.905	1.00134.09	O
ATOM	3042	N	PHE	A	398	-0.957	-40.201	56.554	1.00128.91	N
ATOM	3043	CA	PHE	A	398	-1.866	-41.319	56.811	1.00142.80	C
ATOM	3044	C	PHE	A	398	-1.147	-42.325	57.670	1.00153.31	C
ATOM	3045	O	PHE	A	398	-1.706	-42.854	58.613	1.00171.91	O

ATOM	3046	CB	PHE	A	398	-2.275	-42.009	55.511	1.00120.71	C
ATOM	3047	CG	PHE	A	398	-3.740	-42.351	55.427	1.00133.95	C
ATOM	3048	CD1	PHE	A	398	-4.683	-41.630	56.142	1.00144.67	C
ATOM	3049	CD2	PHE	A	398	-4.172	-43.393	54.615	1.00136.26	C
ATOM	3050	CE1	PHE	A	398	-6.028	-41.944	56.045	1.00157.68	C
ATOM	3051	CE2	PHE	A	398	-5.510	-43.709	54.512	1.00149.21	C
ATOM	3052	CZ	PHE	A	398	-6.441	-42.985	55.227	1.00159.94	C
ATOM	3053	N	LEU	A	399	0.110	-42.577	57.339	1.00156.23	N
ATOM	3054	CA	LEU	A	399	0.906	-43.541	58.074	1.00165.69	C
ATOM	3055	C	LEU	A	399	1.209	-43.072	59.496	1.00181.13	C
ATOM	3056	O	LEU	A	399	0.688	-43.631	60.459	1.00201.49	O
ATOM	3057	CB	LEU	A	399	2.190	-43.842	57.316	1.00125.06	C
ATOM	3058	CG	LEU	A	399	1.997	-44.233	55.852	1.00111.53	C
ATOM	3059	CD1	LEU	A	399	3.112	-45.167	55.477	1.00104.75	C
ATOM	3060	CD2	LEU	A	399	0.652	-44.903	55.644	1.00123.52	C
ATOM	3061	N	GLU	A	400	2.041	-42.045	59.631	1.00180.92	N
ATOM	3062	CA	GLU	A	400	2.407	-41.537	60.954	1.00192.32	C
ATOM	3063	C	GLU	A	400	1.187	-41.195	61.809	1.00208.09	C
ATOM	3064	O	GLU	A	400	1.232	-41.321	63.029	1.00224.87	O
ATOM	3065	CB	GLU	A	400	3.335	-40.319	60.845	1.00261.38	C
ATOM	3066	CG	GLU	A	400	4.793	-40.659	60.549	1.00251.94	C
ATOM	3067	CD	GLU	A	400	5.667	-39.425	60.388	1.00237.94	C
ATOM	3068	OE1	GLU	A	400	5.130	-38.297	60.452	1.00236.16	O
ATOM	3069	OE2	GLU	A	400	6.892	-39.581	60.197	1.00229.79	O1-
ATOM	3070	N	LYS	A	401	0.097	-40.783	61.168	1.00132.06	N
ATOM	3071	CA	LYS	A	401	-1.083	-40.298	61.891	1.00146.39	C
ATOM	3072	C	LYS	A	401	-2.211	-41.322	62.033	1.00165.27	C
ATOM	3073	O	LYS	A	401	-3.094	-41.158	62.873	1.00183.09	O
ATOM	3074	CB	LYS	A	401	-1.626	-38.997	61.275	1.00183.00	C
ATOM	3075	CG	LYS	A	401	-2.310	-38.081	62.287	1.00195.52	C
ATOM	3076	CD	LYS	A	401	-3.081	-36.952	61.625	1.00186.44	C
ATOM	3077	CE	LYS	A	401	-3.795	-36.109	62.674	1.00201.75	C
ATOM	3078	NZ	LYS	A	401	-4.830	-35.222	62.078	1.00197.31	N1+
ATOM	3079	N	LYS	A	402	-2.192	-42.366	61.212	1.00176.32	N
ATOM	3080	CA	LYS	A	402	-3.088	-43.501	61.419	1.00191.98	C
ATOM	3081	C	LYS	A	402	-2.306	-44.564	62.183	1.00204.19	C
ATOM	3082	O	LYS	A	402	-2.482	-45.762	61.974	1.00209.15	O
ATOM	3083	CB	LYS	A	402	-3.592	-44.059	60.087	1.00133.14	C
ATOM	3084	CG	LYS	A	402	-4.999	-44.623	60.118	1.00148.63	C
ATOM	3085	CD	LYS	A	402	-6.012	-43.632	59.579	1.00153.39	C
ATOM	3086	CE	LYS	A	402	-7.375	-44.276	59.453	1.00169.31	C
ATOM	3087	NZ	LYS	A	402	-7.812	-44.855	60.754	1.00195.49	N1+
ATOM	3088	N	GLN	A	403	-1.433	-44.095	63.068	1.00161.29	N
ATOM	3089	CA	GLN	A	403	-0.550	-44.943	63.864	1.00174.04	C
ATOM	3090	C	GLN	A	403	0.143	-45.992	63.024	1.00164.44	C
ATOM	3091	O	GLN	A	403	-0.405	-47.052	62.754	1.00174.91	O
ATOM	3092	CB	GLN	A	403	-1.288	-45.573	65.052	1.00146.24	C
ATOM	3093	CG	GLN	A	403	-1.160	-44.780	66.356	1.00155.75	C
ATOM	3094	CD	GLN	A	403	-1.831	-45.465	67.534	1.00185.61	C
ATOM	3095	NE2	GLN	A	403	-2.640	-44.709	68.265	1.00196.10	N
ATOM	3096	OE1	GLN	A	403	-1.632	-46.658	67.782	1.00200.18	O
ATOM	3097	N	ILE	A	404	1.360	-45.677	62.610	1.00208.24	N
ATOM	3098	CA	ILE	A	404	2.156	-46.590	61.812	1.00196.99	C
ATOM	3099	C	ILE	A	404	3.633	-46.309	62.047	1.00190.83	C
ATOM	3100	O	ILE	A	404	4.262	-45.544	61.309	1.00172.15	O
ATOM	3101	CB	ILE	A	404	1.809	-46.486	60.309	1.00140.25	C
ATOM	3102	CG1	ILE	A	404	0.471	-47.167	60.026	1.00149.71	C
ATOM	3103	CG2	ILE	A	404	2.886	-47.123	59.454	1.00124.60	C
ATOM	3104	CD1	ILE	A	404	0.142	-47.281	58.552	1.00132.39	C
ATOM	3105	N	LYS	A	405	4.168	-46.913	63.105	1.00202.69	N
ATOM	3106	CA	LYS	A	405	5.588	-46.819	63.412	1.00201.43	C

ATOM	3107	C	LYS	A	405	6.391	-47.022	62.131	1.00178.81	C
ATOM	3108	O	LYS	A	405	6.408	-48.121	61.567	1.00177.44	O
ATOM	3109	CB	LYS	A	405	5.994	-47.870	64.457	1.00157.01	C
ATOM	3110	CG	LYS	A	405	5.325	-47.736	65.829	1.00177.80	C
ATOM	3111	CD	LYS	A	405	5.829	-48.814	66.791	1.00200.15	C
ATOM	3112	CE	LYS	A	405	5.360	-48.574	68.216	1.00220.11	C
ATOM	3113	NZ	LYS	A	405	6.142	-49.385	69.188	1.00238.45	N1+
ATOM	3114	N	LEU	A	406	7.033	-45.954	61.664	1.00175.87	N
ATOM	3115	CA	LEU	A	406	7.903	-46.024	60.497	1.00156.14	C
ATOM	3116	C	LEU	A	406	9.207	-45.308	60.817	1.00156.77	C
ATOM	3117	O	LEU	A	406	9.218	-44.095	60.998	1.00159.46	O
ATOM	3118	CB	LEU	A	406	7.231	-45.376	59.283	1.00133.51	C
ATOM	3119	CG	LEU	A	406	7.369	-46.034	57.904	1.00119.36	C
ATOM	3120	CD1	LEU	A	406	7.608	-44.965	56.860	1.00 98.69	C
ATOM	3121	CD2	LEU	A	406	8.481	-47.071	57.875	1.00119.90	C
ATOM	3122	N	SER	A	407	10.300	-46.061	60.897	1.00183.40	N
ATOM	3123	CA	SER	A	407	11.603	-45.494	61.227	1.00184.78	C
ATOM	3124	C	SER	A	407	12.075	-44.566	60.120	1.00162.28	C
ATOM	3125	O	SER	A	407	11.390	-44.407	59.111	1.00146.95	O
ATOM	3126	CB	SER	A	407	12.625	-46.604	61.447	1.00180.15	C
ATOM	3127	OG	SER	A	407	12.507	-47.592	60.441	1.00170.14	O
ATOM	3128	N	LEU	A	408	13.244	-43.961	60.300	1.00210.57	N
ATOM	3129	CA	LEU	A	408	13.730	-42.969	59.341	1.00191.31	C
ATOM	3130	C	LEU	A	408	14.421	-43.573	58.108	1.00176.57	C
ATOM	3131	O	LEU	A	408	14.272	-43.065	56.992	1.00158.76	O
ATOM	3132	CB	LEU	A	408	14.616	-41.932	60.035	1.00131.96	C
ATOM	3133	CG	LEU	A	408	13.856	-40.907	60.892	1.00141.79	C
ATOM	3134	CD1	LEU	A	408	14.382	-39.481	60.666	1.00140.65	C
ATOM	3135	CD2	LEU	A	408	12.350	-40.968	60.645	1.00134.14	C
ATOM	3136	N	ARG	A	409	15.170	-44.653	58.316	1.00162.42	N
ATOM	3137	CA	ARG	A	409	15.738	-45.418	57.213	1.00151.38	C
ATOM	3138	C	ARG	A	409	14.620	-45.762	56.245	1.00140.97	C
ATOM	3139	O	ARG	A	409	14.689	-45.448	55.061	1.00125.42	O
ATOM	3140	CB	ARG	A	409	16.416	-46.694	57.739	1.00190.92	C
ATOM	3141	CG	ARG	A	409	16.667	-47.777	56.700	1.00182.06	C
ATOM	3142	CD	ARG	A	409	17.701	-48.784	57.181	1.00196.42	C
ATOM	3143	NE	ARG	A	409	18.907	-48.749	56.353	1.00189.20	N
ATOM	3144	CZ	ARG	A	409	19.971	-49.528	56.531	1.00200.82	C
ATOM	3145	NH1	ARG	A	409	19.993	-50.412	57.520	1.00220.67	N1+
ATOM	3146	NH2	ARG	A	409	21.019	-49.420	55.719	1.00193.60	N
ATOM	3147	N	ASN	A	410	13.571	-46.378	56.770	1.00211.95	N
ATOM	3148	CA	ASN	A	410	12.457	-46.828	55.953	1.00205.19	C
ATOM	3149	C	ASN	A	410	11.705	-45.688	55.275	1.00190.82	C
ATOM	3150	O	ASN	A	410	11.392	-45.776	54.090	1.00178.64	O
ATOM	3151	CB	ASN	A	410	11.504	-47.680	56.789	1.00161.88	C
ATOM	3152	CG	ASN	A	410	12.226	-48.773	57.562	1.00178.27	C
ATOM	3153	ND2	ASN	A	410	11.618	-49.222	58.661	1.00196.92	N
ATOM	3154	OD1	ASN	A	410	13.319	-49.210	57.176	1.00175.26	O
ATOM	3155	N	LYS	A	411	11.414	-44.622	56.017	1.00164.96	N
ATOM	3156	CA	LYS	A	411	10.711	-43.485	55.425	1.00152.32	C
ATOM	3157	C	LYS	A	411	11.525	-42.879	54.291	1.00135.12	C
ATOM	3158	O	LYS	A	411	10.985	-42.520	53.249	1.00124.45	O
ATOM	3159	CB	LYS	A	411	10.386	-42.402	56.453	1.00116.89	C
ATOM	3160	CG	LYS	A	411	9.598	-41.218	55.844	1.00106.47	C
ATOM	3161	CD	LYS	A	411	9.733	-39.900	56.649	1.00112.19	C
ATOM	3162	CE	LYS	A	411	8.378	-39.313	57.057	1.00115.18	C
ATOM	3163	NZ	LYS	A	411	8.524	-38.181	58.006	1.00121.31	N1+
ATOM	3164	N	ASN	A	412	12.829	-42.768	54.493	1.00147.27	N
ATOM	3165	CA	ASN	A	412	13.678	-42.187	53.468	1.00132.83	C
ATOM	3166	C	ASN	A	412	13.847	-43.089	52.230	1.00124.77	C
ATOM	3167	O	ASN	A	412	13.776	-42.615	51.095	1.00111.75	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	3168	CB	ASN	A	412	15.014	-41.731	54.067	1.00152.68	C
ATOM	3169	CG	ASN	A	412	14.871	-40.457	54.907	1.00156.39	C
ATOM	3170	ND2	ASN	A	412	15.980	-39.759	55.129	1.00159.31	N
ATOM	3171	OD1	ASN	A	412	13.775	-40.105	55.338	1.00157.41	O
ATOM	3172	N	ILE	A	413	14.045	-44.386	52.440	1.00145.90	N
ATOM	3173	CA	ILE	A	413	14.098	-45.313	51.315	1.00140.15	C
ATOM	3174	C	ILE	A	413	12.794	-45.222	50.532	1.00133.11	C
ATOM	3175	O	ILE	A	413	12.796	-45.121	49.307	1.00122.41	O
ATOM	3176	CB	ILE	A	413	14.278	-46.773	51.766	1.00116.65	C
ATOM	3177	CG1	ILE	A	413	15.394	-46.898	52.794	1.00127.48	C
ATOM	3178	CG2	ILE	A	413	14.574	-47.672	50.576	1.00110.99	C
ATOM	3179	CD1	ILE	A	413	15.329	-48.201	53.564	1.00143.15	C
ATOM	3180	N	LEU	A	414	11.677	-45.260	51.251	1.00144.72	N
ATOM	3181	CA	LEU	A	414	10.363	-45.174	50.624	1.00142.09	C
ATOM	3182	C	LEU	A	414	10.194	-43.877	49.824	1.00129.83	C
ATOM	3183	O	LEU	A	414	9.697	-43.892	48.707	1.00123.70	O
ATOM	3184	CB	LEU	A	414	9.238	-45.351	51.660	1.00105.28	C
ATOM	3185	CG	LEU	A	414	8.848	-46.797	51.955	1.00118.55	C
ATOM	3186	CD1	LEU	A	414	7.341	-46.986	51.866	1.00127.08	C
ATOM	3187	CD2	LEU	A	414	9.554	-47.678	50.957	1.00112.51	C
ATOM	3188	N	LEU	A	415	10.617	-42.755	50.383	1.00122.58	N
ATOM	3189	CA	LEU	A	415	10.544	-41.520	49.629	1.00111.49	C
ATOM	3190	C	LEU	A	415	11.379	-41.610	48.354	1.00101.72	C
ATOM	3191	O	LEU	A	415	10.889	-41.313	47.265	1.00 95.26	O
ATOM	3192	CB	LEU	A	415	10.981	-40.330	50.482	1.00102.56	C
ATOM	3193	CG	LEU	A	415	9.804	-39.559	51.083	1.00107.98	C
ATOM	3194	CD1	LEU	A	415	10.219	-38.679	52.265	1.00112.72	C
ATOM	3195	CD2	LEU	A	415	9.080	-38.758	49.995	1.00 99.74	C
ATOM	3196	N	ILE	A	416	12.637	-42.026	48.492	1.00139.06	N
ATOM	3197	CA	ILE	A	416	13.564	-42.062	47.363	1.00131.25	C
ATOM	3198	C	ILE	A	416	13.035	-42.949	46.251	1.00130.77	C
ATOM	3199	O	ILE	A	416	13.139	-42.620	45.070	1.00125.04	O
ATOM	3200	CB	ILE	A	416	14.962	-42.543	47.791	1.00118.97	C
ATOM	3201	CG1	ILE	A	416	15.658	-41.455	48.607	1.00120.48	C
ATOM	3202	CG2	ILE	A	416	15.800	-42.908	46.577	1.00112.16	C
ATOM	3203	CD1	ILE	A	416	16.951	-41.883	49.232	1.00125.88	C
ATOM	3204	N	LEU	A	417	12.446	-44.071	46.628	1.00117.92	N
ATOM	3205	CA	LEU	A	417	11.881	-44.956	45.633	1.00118.70	C
ATOM	3206	C	LEU	A	417	10.598	-44.391	45.018	1.00116.52	C
ATOM	3207	O	LEU	A	417	10.523	-44.265	43.817	1.00111.95	O
ATOM	3208	CB	LEU	A	417	11.716	-46.375	46.169	1.00103.13	C
ATOM	3209	CG	LEU	A	417	13.072	-47.082	46.309	1.00105.22	C
ATOM	3210	CD1	LEU	A	417	13.302	-47.544	47.734	1.00116.81	C
ATOM	3211	CD2	LEU	A	417	13.195	-48.249	45.333	1.00105.12	C
ATOM	3212	N	ILE	A	418	9.600	-44.024	45.814	1.00125.34	N
ATOM	3213	CA	ILE	A	418	8.436	-43.328	45.250	1.00123.10	C
ATOM	3214	C	ILE	A	418	8.900	-42.301	44.187	1.00112.56	C
ATOM	3215	O	ILE	A	418	8.383	-42.249	43.064	1.00109.87	O
ATOM	3216	CB	ILE	A	418	7.579	-42.644	46.359	1.00 90.14	C
ATOM	3217	CG1	ILE	A	418	6.450	-43.569	46.862	1.00103.11	C
ATOM	3218	CG2	ILE	A	418	6.999	-41.345	45.847	1.00 84.85	C
ATOM	3219	CD1	ILE	A	418	5.195	-43.677	45.941	1.00107.86	C
ATOM	3220	N	ALA	A	419	9.925	-41.532	44.537	1.00108.76	N
ATOM	3221	CA	ALA	A	419	10.464	-40.476	43.679	1.00 99.83	C
ATOM	3222	C	ALA	A	419	11.121	-40.942	42.361	1.00 96.86	C
ATOM	3223	O	ALA	A	419	10.716	-40.516	41.250	1.00 93.67	O
ATOM	3224	CB	ALA	A	419	11.437	-39.622	44.481	1.00 65.12	C
ATOM	3225	N	PHE	A	420	12.154	-41.777	42.475	1.00129.18	N
ATOM	3226	CA	PHE	A	420	12.817	-42.285	41.282	1.00127.90	C
ATOM	3227	C	PHE	A	420	11.777	-42.935	40.380	1.00131.73	C
ATOM	3228	O	PHE	A	420	11.758	-42.720	39.154	1.00131.29	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	3229	CB	PHE	A	420	13.905	-43.305	41.617	1.00150.96	C
ATOM	3230	CG	PHE	A	420	14.411	-44.054	40.407	1.00151.43	C
ATOM	3231	CD1	PHE	A	420	15.412	-43.513	39.608	1.00147.44	C
ATOM	3232	CD2	PHE	A	420	13.867	-45.285	40.051	1.00157.09	C
ATOM	3233	CE1	PHE	A	420	15.871	-44.188	38.481	1.00149.55	C
ATOM	3234	CE2	PHE	A	420	14.323	-45.965	38.930	1.00158.88	C
ATOM	3235	CZ	PHE	A	420	15.325	-45.413	38.144	1.00155.33	C
ATOM	3236	N	PHE	A	421	10.914	-43.730	41.000	1.00103.43	N
ATOM	3237	CA	PHE	A	421	9.819	-44.366	40.309	1.00108.08	C
ATOM	3238	C	PHE	A	421	9.032	-43.334	39.509	1.00104.74	C
ATOM	3239	O	PHE	A	421	9.020	-43.407	38.285	1.00105.11	O
ATOM	3240	CB	PHE	A	421	8.909	-45.138	41.257	1.00223.01	C
ATOM	3241	CG	PHE	A	421	7.775	-45.819	40.558	1.00228.86	C
ATOM	3242	CD1	PHE	A	421	7.869	-47.151	40.188	1.00233.82	C
ATOM	3243	CD2	PHE	A	421	6.621	-45.111	40.238	1.00230.01	C
ATOM	3244	CE1	PHE	A	421	6.824	-47.772	39.531	1.00240.21	C
ATOM	3245	CE2	PHE	A	421	5.574	-45.723	39.580	1.00236.52	C
ATOM	3246	CZ	PHE	A	421	5.675	-47.058	39.225	1.00241.74	C
ATOM	3247	N	SER	A	422	8.416	-42.348	40.164	1.00125.99	N
ATOM	3248	CA	SER	A	422	7.597	-41.369	39.414	1.00123.60	C
ATOM	3249	C	SER	A	422	8.325	-40.450	38.385	1.00117.77	C
ATOM	3250	O	SER	A	422	7.706	-39.981	37.428	1.00119.14	O
ATOM	3251	CB	SER	A	422	6.719	-40.550	40.360	1.00106.85	C
ATOM	3252	OG	SER	A	422	7.514	-39.815	41.258	1.00103.17	O
ATOM	3253	N	ILE	A	423	9.623	-40.212	38.575	1.00 93.17	N
ATOM	3254	CA	ILE	A	423	10.454	-39.410	37.651	1.00 88.72	C
ATOM	3255	C	ILE	A	423	11.006	-40.147	36.379	1.00 92.27	C
ATOM	3256	O	ILE	A	423	11.170	-39.584	35.232	1.00 92.10	O
ATOM	3257	CB	ILE	A	423	11.619	-38.857	38.489	1.00101.70	C
ATOM	3258	CG1	ILE	A	423	11.108	-37.733	39.380	1.00 99.08	C
ATOM	3259	CG2	ILE	A	423	12.780	-38.391	37.631	1.00 97.84	C
ATOM	3260	CD1	ILE	A	423	12.082	-36.605	39.480	1.00 93.36	C
ATOM	3261	N	SER	A	424	11.308	-41.421	36.596	1.00100.12	N
ATOM	3262	CA	SER	A	424	11.862	-42.253	35.542	1.00104.79	C
ATOM	3263	C	SER	A	424	11.103	-42.219	34.205	1.00108.66	C
ATOM	3264	O	SER	A	424	11.713	-42.372	33.172	1.00109.80	O
ATOM	3265	CB	SER	A	424	11.976	-43.686	36.030	1.00 89.94	C
ATOM	3266	OG	SER	A	424	10.716	-44.119	36.472	1.00 93.80	O
ATOM	3267	N	PRO	A	425	9.773	-42.044	34.219	1.00106.96	N
ATOM	3268	CA	PRO	A	425	9.030	-41.954	32.956	1.00112.33	C
ATOM	3269	C	PRO	A	425	9.438	-40.753	32.137	1.00108.92	C
ATOM	3270	O	PRO	A	425	9.581	-40.817	30.914	1.00114.08	O
ATOM	3271	CB	PRO	A	425	7.604	-41.728	33.419	1.00 97.17	C
ATOM	3272	CG	PRO	A	425	7.552	-42.334	34.715	1.00 97.33	C
ATOM	3273	CD	PRO	A	425	8.863	-42.089	35.366	1.00 91.10	C
ATOM	3274	N	ALA	A	426	9.592	-39.636	32.824	1.00118.31	N
ATOM	3275	CA	ALA	A	426	10.089	-38.446	32.177	1.00114.87	C
ATOM	3276	C	ALA	A	426	11.529	-38.665	31.724	1.00114.35	C
ATOM	3277	O	ALA	A	426	11.893	-38.303	30.578	1.00117.25	O
ATOM	3278	CB	ALA	A	426	9.988	-37.298	33.092	1.00 54.65	C
ATOM	3279	N	LEU	A	427	12.353	-39.278	32.584	1.00 87.72	N
ATOM	3280	CA	LEU	A	427	13.694	-39.663	32.055	1.00 89.27	C
ATOM	3281	C	LEU	A	427	13.665	-40.424	30.686	1.00 99.11	C
ATOM	3282	O	LEU	A	427	14.330	-40.034	29.692	1.00102.44	O
ATOM	3283	CB	LEU	A	427	14.463	-40.505	33.062	1.00112.10	C
ATOM	3284	CG	LEU	A	427	14.874	-39.877	34.381	1.00104.26	C
ATOM	3285	CD1	LEU	A	427	15.368	-40.977	35.299	1.00105.56	C
ATOM	3286	CD2	LEU	A	427	15.929	-38.786	34.179	1.00 99.13	C
ATOM	3287	N	MET	A	428	12.900	-41.520	30.673	1.00 96.26	N
ATOM	3288	CA	MET	A	428	12.664	-42.390	29.525	1.00107.25	C
ATOM	3289	C	MET	A	428	12.264	-41.543	28.345	1.00112.20	C

ATOM	3290	O	MET	A	428	12.849	-41.646	27.272	1.00119.86	O
ATOM	3291	CB	MET	A	428	11.524	-43.369	29.830	1.00169.16	C
ATOM	3292	CG	MET	A	428	11.933	-44.828	29.998	1.00174.17	C
ATOM	3293	SD	MET	A	428	10.521	-45.959	30.207	1.00183.11	S
ATOM	3294	CE	MET	A	428	9.972	-45.626	31.887	1.00177.23	C
ATOM	3295	N	HIS	A	429	11.252	-40.704	28.546	1.00 94.96	N
ATOM	3296	CA	HIS	A	429	10.804	-39.827	27.478	1.00 99.98	C
ATOM	3297	C	HIS	A	429	11.938	-38.993	26.924	1.00 99.10	C
ATOM	3298	O	HIS	A	429	12.040	-38.813	25.713	1.00107.45	O
ATOM	3299	CB	HIS	A	429	9.698	-38.896	27.932	1.00105.98	C
ATOM	3300	CG	HIS	A	429	9.337	-37.881	26.898	1.00110.88	C
ATOM	3301	CD2	HIS	A	429	9.734	-36.599	26.731	1.00105.53	C
ATOM	3302	ND1	HIS	A	429	8.497	-38.165	25.844	1.00122.32	N
ATOM	3303	CE1	HIS	A	429	8.370	-37.090	25.085	1.00117.20	C
ATOM	3304	NE2	HIS	A	429	9.116	-36.130	25.598	1.00108.92	N
ATOM	3305	N	ILE	A	430	12.779	-38.467	27.814	1.00 93.53	N
ATOM	3306	CA	ILE	A	430	13.923	-37.683	27.343	1.00 92.96	C
ATOM	3307	C	ILE	A	430	14.882	-38.512	26.502	1.00101.57	C
ATOM	3308	O	ILE	A	430	15.458	-38.002	25.534	1.00107.61	O
ATOM	3309	CB	ILE	A	430	14.764	-37.101	28.473	1.00 95.24	C
ATOM	3310	CG1	ILE	A	430	13.964	-36.179	29.359	1.00 87.30	C
ATOM	3311	CG2	ILE	A	430	15.891	-36.264	27.911	1.00 96.04	C
ATOM	3312	CD1	ILE	A	430	14.869	-35.555	30.373	1.00 78.11	C
ATOM	3313	N	TYR	A	431	15.095	-39.769	26.900	1.00 89.19	N
ATOM	3314	CA	TYR	A	431	15.984	-40.651	26.121	1.00 98.43	C
ATOM	3315	C	TYR	A	431	15.406	-40.874	24.747	1.00112.01	C
ATOM	3316	O	TYR	A	431	16.119	-40.870	23.748	1.00121.85	O
ATOM	3317	CB	TYR	A	431	16.165	-42.005	26.811	1.00 90.27	C
ATOM	3318	CG	TYR	A	431	16.796	-43.085	25.953	1.00101.87	C
ATOM	3319	CD1	TYR	A	431	18.149	-43.387	26.049	1.00101.41	C
ATOM	3320	CD2	TYR	A	431	16.026	-43.827	25.062	1.00114.44	C
ATOM	3321	CE1	TYR	A	431	18.720	-44.394	25.264	1.00113.02	C
ATOM	3322	CE2	TYR	A	431	16.585	-44.825	24.268	1.00126.33	C
ATOM	3323	CZ	TYR	A	431	17.927	-45.104	24.374	1.00125.45	C
ATOM	3324	OH	TYR	A	431	18.457	-46.098	23.585	1.00138.13	O
ATOM	3325	N	TYR	A	432	14.096	-41.072	24.719	1.00 91.54	N
ATOM	3326	CA	TYR	A	432	13.403	-41.431	23.509	1.00103.15	C
ATOM	3327	C	TYR	A	432	13.135	-40.213	22.664	1.00101.79	C
ATOM	3328	O	TYR	A	432	12.762	-40.335	21.514	1.00105.36	O
ATOM	3329	CB	TYR	A	432	12.097	-42.161	23.837	1.00171.52	C
ATOM	3330	CG	TYR	A	432	12.269	-43.658	24.035	1.00177.29	C
ATOM	3331	CD1	TYR	A	432	11.396	-44.384	24.837	1.00174.34	C
ATOM	3332	CD2	TYR	A	432	13.305	-44.342	23.415	1.00185.56	C
ATOM	3333	CE1	TYR	A	432	11.556	-45.749	25.015	1.00179.02	C
ATOM	3334	CE2	TYR	A	432	13.473	-45.703	23.589	1.00191.44	C
ATOM	3335	CZ	TYR	A	432	12.597	-46.402	24.387	1.00187.32	C
ATOM	3336	OH	TYR	A	432	12.766	-47.756	24.555	1.00192.53	O
ATOM	3337	N	TYR	A	433	13.343	-39.031	23.229	1.00119.00	N
ATOM	3338	CA	TYR	A	433	13.019	-37.781	22.529	1.00112.37	C
ATOM	3339	C	TYR	A	433	14.227	-37.128	21.831	1.00113.20	C
ATOM	3340	O	TYR	A	433	14.860	-36.208	22.377	1.00107.75	O
ATOM	3341	CB	TYR	A	433	12.330	-36.802	23.491	1.00116.68	C
ATOM	3342	CG	TYR	A	433	11.723	-35.579	22.839	1.00110.39	C
ATOM	3343	CD1	TYR	A	433	10.372	-35.524	22.546	1.00111.81	C
ATOM	3344	CD2	TYR	A	433	12.503	-34.472	22.534	1.00103.12	C
ATOM	3345	CE1	TYR	A	433	9.819	-34.405	21.958	1.00106.37	C
ATOM	3346	CE2	TYR	A	433	11.954	-33.351	21.946	1.00 97.26	C
ATOM	3347	CZ	TYR	A	433	10.615	-33.322	21.661	1.00 98.98	C
ATOM	3348	OH	TYR	A	433	10.082	-32.200	21.079	1.00 94.32	O
ATOM	3349	N	LYS	A	434	14.513	-37.606	20.618	1.00109.61	N
ATOM	3350	CA	LYS	A	434	15.711	-37.224	19.871	1.00113.68	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	3351	C	LYS	A	434	15.417	-36.372	18.649	1.00112.97	C
ATOM	3352	O	LYS	A	434	15.469	-36.878	17.534	1.00120.29	O
ATOM	3353	CB	LYS	A	434	16.446	-38.469	19.377	1.00108.63	C
ATOM	3354	CG	LYS	A	434	16.616	-39.555	20.397	1.00112.32	C
ATOM	3355	CD	LYS	A	434	17.360	-40.717	19.791	1.00121.07	C
ATOM	3356	CE	LYS	A	434	17.692	-41.780	20.819	1.00124.01	C
ATOM	3357	NZ	LYS	A	434	18.911	-41.389	21.577	1.00122.74	N1+
ATOM	3358	N	SER	A	435	15.137	-35.086	18.834	1.00118.24	N
ATOM	3359	CA	SER	A	435	14.859	-34.226	17.682	1.00118.10	C
ATOM	3360	C	SER	A	435	16.063	-34.144	16.772	1.00127.55	C
ATOM	3361	O	SER	A	435	17.192	-34.373	17.198	1.00132.47	O
ATOM	3362	CB	SER	A	435	14.474	-32.804	18.109	1.00100.73	C
ATOM	3363	OG	SER	A	435	14.128	-32.757	19.476	1.00 92.51	O
ATOM	3364	N	SER	A	436	15.817	-33.819	15.512	1.00113.74	N
ATOM	3365	CA	SER	A	436	16.895	-33.387	14.658	1.00122.88	C
ATOM	3366	C	SER	A	436	16.979	-31.881	14.836	1.00115.55	C
ATOM	3367	O	SER	A	436	16.556	-31.339	15.841	1.00102.55	O
ATOM	3368	CB	SER	A	436	16.652	-33.771	13.196	1.00167.88	C
ATOM	3369	OG	SER	A	436	15.744	-32.893	12.559	1.00162.67	O
ATOM	3370	N	THR	A	437	17.525	-31.198	13.857	1.00106.34	N
ATOM	3371	CA	THR	A	437	17.649	-29.772	13.945	1.00 99.65	C
ATOM	3372	C	THR	A	437	16.526	-29.197	13.126	1.00103.26	C
ATOM	3373	O	THR	A	437	15.941	-29.896	12.307	1.00115.80	O
ATOM	3374	CB	THR	A	437	18.954	-29.368	13.304	1.00106.36	C
ATOM	3375	CG2	THR	A	437	19.126	-27.857	13.335	1.00101.53	C
ATOM	3376	OG1	THR	A	437	20.034	-30.019	13.981	1.00104.28	O
ATOM	3377	N	VAL	A	438	16.209	-27.930	13.335	1.00 95.76	N
ATOM	3378	CA	VAL	A	438	15.336	-27.242	12.395	1.00101.26	C
ATOM	3379	C	VAL	A	438	15.755	-27.670	10.995	1.00120.74	C
ATOM	3380	O	VAL	A	438	14.942	-28.194	10.235	1.00127.99	O
ATOM	3381	CB	VAL	A	438	15.442	-25.702	12.543	1.00 72.46	C
ATOM	3382	CG1	VAL	A	438	14.581	-24.966	11.510	1.00 80.52	C
ATOM	3383	CG2	VAL	A	438	15.068	-25.304	13.949	1.00 56.98	C
ATOM	3384	N	PHE	A	439	17.038	-27.471	10.686	1.00 83.77	N
ATOM	3385	CA	PHE	A	439	17.610	-27.793	9.386	1.00103.87	C
ATOM	3386	C	PHE	A	439	18.820	-28.683	9.572	1.00108.72	C
ATOM	3387	O	PHE	A	439	19.337	-28.820	10.673	1.00 96.51	O
ATOM	3388	CB	PHE	A	439	18.093	-26.537	8.678	1.00 89.77	C
ATOM	3389	CG	PHE	A	439	17.027	-25.782	7.982	1.00 94.21	C
ATOM	3390	CD1	PHE	A	439	15.725	-26.174	8.068	1.00 84.39	C
ATOM	3391	CD2	PHE	A	439	17.332	-24.672	7.231	1.00108.13	C
ATOM	3392	CE1	PHE	A	439	14.735	-25.467	7.422	1.00 88.39	C
ATOM	3393	CE2	PHE	A	439	16.351	-23.967	6.581	1.00112.92	C
ATOM	3394	CZ	PHE	A	439	15.050	-24.365	6.679	1.00102.58	C
ATOM	3395	N	THR	A	440	19.289	-29.271	8.478	1.00 85.91	N
ATOM	3396	CA	THR	A	440	20.534	-30.011	8.487	1.00 98.28	C
ATOM	3397	C	THR	A	440	21.622	-29.101	7.964	1.00110.01	C
ATOM	3398	O	THR	A	440	21.350	-28.173	7.208	1.00111.18	O
ATOM	3399	CB	THR	A	440	20.460	-31.225	7.561	1.00101.39	C
ATOM	3400	CG2	THR	A	440	19.782	-32.394	8.262	1.00 89.49	C
ATOM	3401	OG1	THR	A	440	19.729	-30.872	6.376	1.00107.99	O
ATOM	3402	N	SER	A	441	22.857	-29.369	8.367	1.00116.96	N
ATOM	3403	CA	SER	A	441	24.004	-28.702	7.773	1.00115.60	C
ATOM	3404	C	SER	A	441	23.713	-28.364	6.326	1.00113.00	C
ATOM	3405	O	SER	A	441	23.612	-27.206	5.961	1.00107.54	O
ATOM	3406	CB	SER	A	441	25.227	-29.609	7.840	1.00 87.37	C
ATOM	3407	OG	SER	A	441	24.818	-30.939	8.089	1.00 93.46	O
ATOM	3408	N	TYR	A	442	23.559	-29.394	5.512	1.00116.27	N
ATOM	3409	CA	TYR	A	442	23.371	-29.223	4.085	1.00115.07	C
ATOM	3410	C	TYR	A	442	22.526	-27.988	3.760	1.00107.16	C
ATOM	3411	O	TYR	A	442	22.967	-27.105	3.011	1.00104.73	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	3412	CB	TYR	A	442	22.755	-30.488	3.499	1.00120.75	C
ATOM	3413	CG	TYR	A	442	23.484	-31.762	3.877	1.00130.41	C
ATOM	3414	CD1	TYR	A	442	23.850	-32.013	5.185	1.00110.58	C
ATOM	3415	CD2	TYR	A	442	23.792	-32.724	2.928	1.00112.55	C
ATOM	3416	CE1	TYR	A	442	24.515	-33.179	5.542	1.00119.95	C
ATOM	3417	CE2	TYR	A	442	24.447	-33.901	3.279	1.00121.79	C
ATOM	3418	CZ	TYR	A	442	24.812	-34.124	4.593	1.00125.62	C
ATOM	3419	OH	TYR	A	442	25.468	-35.283	4.969	1.00135.79	O
ATOM	3420	N	GLU	A	443	21.331	-27.914	4.351	1.00123.91	N
ATOM	3421	CA	GLU	A	443	20.381	-26.821	4.092	1.00117.18	C
ATOM	3422	C	GLU	A	443	20.895	-25.449	4.564	1.00111.92	C
ATOM	3423	O	GLU	A	443	20.893	-24.446	3.819	1.00107.74	O
ATOM	3424	CB	GLU	A	443	19.024	-27.148	4.733	1.00111.88	C
ATOM	3425	CG	GLU	A	443	18.603	-28.617	4.607	1.00118.25	C
ATOM	3426	CD	GLU	A	443	17.096	-28.799	4.585	1.00118.81	C
ATOM	3427	OE1	GLU	A	443	16.445	-28.403	5.558	1.00116.32	O
ATOM	3428	OE2	GLU	A	443	16.550	-29.325	3.594	1.00121.14	O1-
ATOM	3429	N	ALA	A	444	21.346	-25.415	5.809	1.00122.53	N
ATOM	3430	CA	ALA	A	444	22.012	-24.240	6.330	1.00118.63	C
ATOM	3431	C	ALA	A	444	22.980	-23.739	5.282	1.00119.01	C
ATOM	3432	O	ALA	A	444	22.725	-22.727	4.644	1.00115.38	O
ATOM	3433	CB	ALA	A	444	22.751	-24.575	7.584	1.00 65.20	C
ATOM	3434	N	SER	A	445	24.075	-24.480	5.095	1.00127.66	N
ATOM	3435	CA	SER	A	445	25.178	-24.082	4.222	1.00128.81	C
ATOM	3436	C	SER	A	445	24.724	-23.720	2.816	1.00127.66	C
ATOM	3437	O	SER	A	445	25.318	-22.855	2.179	1.00127.32	O
ATOM	3438	CB	SER	A	445	26.274	-25.155	4.189	1.00152.70	C
ATOM	3439	OG	SER	A	445	25.741	-26.423	3.861	1.00157.70	O
ATOM	3440	N	ILE	A	446	23.680	-24.377	2.326	1.00123.83	N
ATOM	3441	CA	ILE	A	446	23.096	-23.949	1.062	1.00122.77	C
ATOM	3442	C	ILE	A	446	22.662	-22.487	1.218	1.00116.95	C
ATOM	3443	O	ILE	A	446	22.983	-21.624	0.372	1.00117.06	O
ATOM	3444	CB	ILE	A	446	21.921	-24.874	0.608	1.00 75.54	C
ATOM	3445	CG1	ILE	A	446	22.467	-26.187	0.034	1.00 91.83	C
ATOM	3446	CG2	ILE	A	446	21.044	-24.179	-0.433	1.00 83.25	C
ATOM	3447	CD1	ILE	A	446	21.492	-27.322	0.055	1.00 84.15	C
ATOM	3448	N	LEU	A	447	21.973	-22.199	2.324	1.00125.60	N
ATOM	3449	CA	LEU	A	447	21.503	-20.826	2.571	1.00120.21	C
ATOM	3450	C	LEU	A	447	22.617	-19.792	2.810	1.00119.44	C
ATOM	3451	O	LEU	A	447	22.585	-18.686	2.258	1.00117.71	O
ATOM	3452	CB	LEU	A	447	20.467	-20.813	3.694	1.00102.12	C
ATOM	3453	CG	LEU	A	447	19.181	-21.523	3.250	1.00102.48	C
ATOM	3454	CD1	LEU	A	447	18.419	-22.074	4.425	1.00101.03	C
ATOM	3455	CD2	LEU	A	447	18.292	-20.623	2.403	1.00100.59	C
ATOM	3456	N	ASN	A	448	23.598	-20.157	3.628	1.00110.23	N
ATOM	3457	CA	ASN	A	448	24.802	-19.358	3.829	1.00110.55	C
ATOM	3458	C	ASN	A	448	25.467	-19.006	2.501	1.00113.83	C
ATOM	3459	O	ASN	A	448	25.738	-17.841	2.215	1.00111.10	O
ATOM	3460	CB	ASN	A	448	25.794	-20.118	4.705	1.00127.34	C
ATOM	3461	CG	ASN	A	448	26.855	-19.224	5.277	1.00126.05	C
ATOM	3462	ND2	ASN	A	448	28.091	-19.711	5.282	1.00130.27	N
ATOM	3463	OD1	ASN	A	448	26.574	-18.098	5.707	1.00119.26	O
ATOM	3464	N	ASP	A	449	25.739	-20.028	1.699	1.00132.07	N
ATOM	3465	CA	ASP	A	449	26.177	-19.826	0.331	1.00135.90	C
ATOM	3466	C	ASP	A	449	25.258	-18.807	-0.350	1.00133.43	C
ATOM	3467	O	ASP	A	449	25.739	-17.911	-1.043	1.00134.26	O
ATOM	3468	CB	ASP	A	449	26.178	-21.156	-0.427	1.00193.50	C
ATOM	3469	CG	ASP	A	449	27.037	-21.119	-1.677	1.00200.41	C
ATOM	3470	OD1	ASP	A	449	27.290	-20.011	-2.192	1.00212.02	O
ATOM	3471	OD2	ASP	A	449	27.456	-22.199	-2.146	1.00215.74	O1-
ATOM	3472	N	LEU	A	450	23.941	-18.932	-0.144	1.00133.99	N

ATOM	3473	CA	LEU	A	450	22.983	-17.961	-0.717	1.00130.48	C
ATOM	3474	C	LEU	A	450	23.230	-16.518	-0.243	1.00125.18	C
ATOM	3475	O	LEU	A	450	22.928	-15.555	-0.957	1.00122.72	O
ATOM	3476	CB	LEU	A	450	21.520	-18.367	-0.445	1.00100.33	C
ATOM	3477	CG	LEU	A	450	20.416	-17.892	-1.416	1.00101.11	C
ATOM	3478	CD1	LEU	A	450	19.133	-17.503	-0.698	1.00 95.95	C
ATOM	3479	CD2	LEU	A	450	20.872	-16.747	-2.310	1.00105.21	C
ATOM	3480	N	LYS	A	451	23.770	-16.373	0.965	1.00136.76	N
ATOM	3481	CA	LYS	A	451	24.095	-15.048	1.500	1.00129.33	C
ATOM	3482	C	LYS	A	451	25.076	-14.282	0.604	1.00129.93	C
ATOM	3483	O	LYS	A	451	24.821	-13.138	0.234	1.00124.74	O
ATOM	3484	CB	LYS	A	451	24.665	-15.181	2.910	1.00112.43	C
ATOM	3485	CG	LYS	A	451	24.473	-13.958	3.769	1.00104.64	C
ATOM	3486	CD	LYS	A	451	24.933	-14.209	5.211	1.00103.39	C
ATOM	3487	CE	LYS	A	451	26.455	-14.073	5.375	1.00104.00	C
ATOM	3488	NZ	LYS	A	451	26.946	-14.267	6.781	1.00102.19	N1+
ATOM	3489	N	ASN	A	452	26.186	-14.927	0.248	1.00145.37	N
ATOM	3490	CA	ASN	A	452	27.248	-14.311	-0.554	1.00147.35	C
ATOM	3491	C	ASN	A	452	26.915	-14.151	-2.028	1.00150.15	C
ATOM	3492	O	ASN	A	452	27.765	-13.740	-2.809	1.00153.67	O
ATOM	3493	CB	ASN	A	452	28.525	-15.138	-0.453	1.00123.97	C
ATOM	3494	CG	ASN	A	452	28.747	-15.680	0.930	1.00122.11	C
ATOM	3495	ND2	ASN	A	452	29.137	-16.951	1.020	1.00127.59	N
ATOM	3496	OD1	ASN	A	452	28.556	-14.969	1.917	1.00115.90	O
ATOM	3497	N	LYS	A	453	25.695	-14.499	-2.412	1.00130.32	N
ATOM	3498	CA	LYS	A	453	25.260	-14.343	-3.792	1.00132.28	C
ATOM	3499	C	LYS	A	453	24.212	-13.253	-3.877	1.00124.11	C
ATOM	3500	O	LYS	A	453	23.996	-12.656	-4.931	1.00124.44	O
ATOM	3501	CB	LYS	A	453	24.635	-15.635	-4.312	1.00111.00	C
ATOM	3502	CG	LYS	A	453	25.545	-16.830	-4.364	1.00134.67	C
ATOM	3503	CD	LYS	A	453	24.885	-17.905	-5.193	1.00139.25	C
ATOM	3504	CE	LYS	A	453	25.730	-19.142	-5.247	1.00145.75	C
ATOM	3505	NZ	LYS	A	453	25.340	-19.957	-6.414	1.00149.71	N1+
ATOM	3506	N	ALA	A	454	23.554	-13.007	-2.754	1.00154.76	N
ATOM	3507	CA	ALA	A	454	22.354	-12.192	-2.747	1.00148.54	C
ATOM	3508	C	ALA	A	454	22.537	-10.879	-1.995	1.00140.56	C
ATOM	3509	O	ALA	A	454	23.399	-10.767	-1.122	1.00138.31	O
ATOM	3510	CB	ALA	A	454	21.228	-12.984	-2.149	1.00 46.45	C
ATOM	3511	N	GLN	A	455	21.722	-9.885	-2.339	1.00146.39	N
ATOM	3512	CA	GLN	A	455	21.778	-8.586	-1.668	1.00139.31	C
ATOM	3513	C	GLN	A	455	20.845	-8.529	-0.450	1.00134.69	C
ATOM	3514	O	GLN	A	455	19.763	-9.127	-0.443	1.00136.48	O
ATOM	3515	CB	GLN	A	455	21.492	-7.433	-2.647	1.00143.24	C
ATOM	3516	CG	GLN	A	455	22.462	-7.340	-3.829	1.00147.38	C
ATOM	3517	CD	GLN	A	455	23.924	-7.471	-3.419	1.00165.39	C
ATOM	3518	NE2	GLN	A	455	24.734	-8.051	-4.300	1.00171.66	N
ATOM	3519	OE1	GLN	A	455	24.319	-7.063	-2.323	1.00160.44	O
ATOM	3520	N	ARG	A	456	21.283	-7.801	0.574	1.00121.82	N
ATOM	3521	CA	ARG	A	456	20.609	-7.768	1.870	1.00117.70	C
ATOM	3522	C	ARG	A	456	19.146	-7.345	1.823	1.00117.36	C
ATOM	3523	O	ARG	A	456	18.391	-7.593	2.771	1.00115.99	O
ATOM	3524	CB	ARG	A	456	21.382	-6.862	2.820	1.00108.17	C
ATOM	3525	CG	ARG	A	456	22.718	-7.424	3.209	1.00108.54	C
ATOM	3526	CD	ARG	A	456	22.532	-8.767	3.851	1.00111.62	C
ATOM	3527	NE	ARG	A	456	23.375	-9.787	3.242	1.00118.52	N
ATOM	3528	CZ	ARG	A	456	22.999	-10.565	2.233	1.00124.83	C
ATOM	3529	NH1	ARG	A	456	21.789	-10.440	1.711	1.00124.91	N1+
ATOM	3530	NH2	ARG	A	456	23.834	-11.473	1.747	1.00131.67	N
ATOM	3531	N	GLU	A	457	18.763	-6.705	0.722	1.00 83.40	N
ATOM	3532	CA	GLU	A	457	17.413	-6.186	0.547	1.00 84.33	C
ATOM	3533	C	GLU	A	457	16.587	-7.122	-0.377	1.00 90.22	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	3534	O	GLU	A	457	15.396	-6.869	-0.644	1.00	92.53	O
ATOM	3535	CB	GLU	A	457	17.474	-4.727	0.029	1.00	114.25	C
ATOM	3536	CG	GLU	A	457	16.198	-3.866	0.212	1.00	119.35	C
ATOM	3537	CD	GLU	A	457	16.058	-3.188	1.595	1.00	117.77	C
ATOM	3538	OE1	GLU	A	457	16.939	-3.360	2.474	1.00	111.91	O
ATOM	3539	OE2	GLU	A	457	15.048	-2.475	1.801	1.00	122.45	O1-
ATOM	3540	N	ASP	A	458	17.225	-8.210	-0.834	1.00	97.07	N
ATOM	3541	CA	ASP	A	458	16.622	-9.170	-1.768	1.00	102.92	C
ATOM	3542	C	ASP	A	458	15.581	-10.050	-1.102	1.00	104.26	C
ATOM	3543	O	ASP	A	458	15.831	-10.590	-0.035	1.00	102.51	O
ATOM	3544	CB	ASP	A	458	17.699	-10.079	-2.358	1.00	129.60	C
ATOM	3545	CG	ASP	A	458	18.350	-9.489	-3.585	1.00	131.91	C
ATOM	3546	OD1	ASP	A	458	17.767	-8.558	-4.176	1.00	132.98	O
ATOM	3547	OD2	ASP	A	458	19.439	-9.963	-3.973	1.00	134.57	O1-
ATOM	3548	N	TYR	A	459	14.426	-10.228	-1.737	1.00	113.70	N
ATOM	3549	CA	TYR	A	459	13.410	-11.134	-1.201	1.00	114.33	C
ATOM	3550	C	TYR	A	459	13.569	-12.581	-1.625	1.00	118.60	C
ATOM	3551	O	TYR	A	459	13.867	-12.882	-2.779	1.00	121.79	O
ATOM	3552	CB	TYR	A	459	12.020	-10.658	-1.570	1.00	144.77	C
ATOM	3553	CG	TYR	A	459	11.514	-9.705	-0.561	1.00	141.23	C
ATOM	3554	CD1	TYR	A	459	11.942	-8.395	-0.556	1.00	138.79	C
ATOM	3555	CD2	TYR	A	459	10.655	-10.119	0.426	1.00	139.04	C
ATOM	3556	CE1	TYR	A	459	11.498	-7.505	0.396	1.00	136.02	C
ATOM	3557	CE2	TYR	A	459	10.201	-9.243	1.383	1.00	134.08	C
ATOM	3558	CZ	TYR	A	459	10.625	-7.933	1.367	1.00	132.71	C
ATOM	3559	OH	TYR	A	459	10.176	-7.057	2.332	1.00	128.18	O
ATOM	3560	N	VAL	A	460	13.354	-13.479	-0.678	1.00	91.18	N
ATOM	3561	CA	VAL	A	460	13.294	-14.903	-0.983	1.00	95.85	C
ATOM	3562	C	VAL	A	460	11.877	-15.478	-0.759	1.00	95.44	C
ATOM	3563	O	VAL	A	460	11.327	-15.408	0.336	1.00	92.15	O
ATOM	3564	CB	VAL	A	460	14.401	-15.689	-0.216	1.00	57.65	C
ATOM	3565	CG1	VAL	A	460	13.845	-16.593	0.856	1.00	57.88	C
ATOM	3566	CG2	VAL	A	460	15.159	-16.511	-1.171	1.00	61.91	C
ATOM	3567	N	VAL	A	461	11.257	-16.010	-1.803	1.00	100.52	N
ATOM	3568	CA	VAL	A	461	9.978	-16.679	-1.606	1.00	97.74	C
ATOM	3569	C	VAL	A	461	10.242	-18.124	-1.196	1.00	98.08	C
ATOM	3570	O	VAL	A	461	10.970	-18.857	-1.871	1.00	101.17	O
ATOM	3571	CB	VAL	A	461	9.066	-16.624	-2.851	1.00	69.93	C
ATOM	3572	CG1	VAL	A	461	7.867	-17.521	-2.658	1.00	67.17	C
ATOM	3573	CG2	VAL	A	461	8.616	-15.183	-3.140	1.00	71.04	C
ATOM	3574	N	ALA	A	462	9.678	-18.500	-0.053	1.00	93.86	N
ATOM	3575	CA	ALA	A	462	9.713	-19.865	0.449	1.00	94.82	C
ATOM	3576	C	ALA	A	462	8.453	-20.004	1.277	1.00	90.45	C
ATOM	3577	O	ALA	A	462	7.648	-19.079	1.322	1.00	85.60	O
ATOM	3578	CB	ALA	A	462	10.946	-20.101	1.290	1.00	101.81	C
ATOM	3579	N	TRP	A	463	8.264	-21.153	1.906	1.00	128.54	N
ATOM	3580	CA	TRP	A	463	7.129	-21.330	2.795	1.00	121.67	C
ATOM	3581	C	TRP	A	463	7.473	-20.632	4.125	1.00	117.18	C
ATOM	3582	O	TRP	A	463	8.646	-20.314	4.353	1.00	119.50	O
ATOM	3583	CB	TRP	A	463	6.828	-22.826	2.962	1.00	97.46	C
ATOM	3584	CG	TRP	A	463	5.535	-23.115	3.657	1.00	92.12	C
ATOM	3585	CD1	TRP	A	463	5.343	-23.920	4.737	1.00	91.02	C
ATOM	3586	CD2	TRP	A	463	4.257	-22.579	3.326	1.00	88.32	C
ATOM	3587	CE2	TRP	A	463	3.338	-23.096	4.248	1.00	85.36	C
ATOM	3588	CE3	TRP	A	463	3.801	-21.706	2.336	1.00	87.81	C
ATOM	3589	NE1	TRP	A	463	4.027	-23.915	5.101	1.00	85.46	N
ATOM	3590	CZ2	TRP	A	463	1.983	-22.767	4.210	1.00	80.77	C
ATOM	3591	CZ3	TRP	A	463	2.456	-21.385	2.298	1.00	84.04	C
ATOM	3592	CH2	TRP	A	463	1.561	-21.912	3.229	1.00	81.39	C
ATOM	3593	N	TRP	A	464	6.473	-20.366	4.979	1.00	88.98	N
ATOM	3594	CA	TRP	A	464	6.698	-19.709	6.295	1.00	84.52	C

ATOM	3595	C	TRP	A	464	7.453	-20.516	7.401	1.00	84.80	C
ATOM	3596	O	TRP	A	464	8.136	-19.916	8.245	1.00	82.53	O
ATOM	3597	CB	TRP	A	464	5.384	-19.148	6.851	1.00	108.27	C
ATOM	3598	CG	TRP	A	464	4.437	-20.180	7.383	1.00	104.51	C
ATOM	3599	CD1	TRP	A	464	3.387	-20.755	6.726	1.00	104.85	C
ATOM	3600	CD2	TRP	A	464	4.449	-20.751	8.683	1.00	100.24	C
ATOM	3601	CE2	TRP	A	464	3.393	-21.668	8.751	1.00	98.69	C
ATOM	3602	CE3	TRP	A	464	5.256	-20.585	9.796	1.00	98.02	C
ATOM	3603	NE1	TRP	A	464	2.754	-21.653	7.540	1.00	101.40	N
ATOM	3604	CZ2	TRP	A	464	3.127	-22.408	9.893	1.00	95.47	C
ATOM	3605	CZ3	TRP	A	464	4.989	-21.321	10.922	1.00	94.45	C
ATOM	3606	CH2	TRP	A	464	3.939	-22.215	10.968	1.00	93.46	C
ATOM	3607	N	ASP	A	465	7.312	-21.849	7.392	1.00	82.05	N
ATOM	3608	CA	ASP	A	465	8.069	-22.744	8.258	1.00	83.41	C
ATOM	3609	C	ASP	A	465	9.539	-22.432	8.174	1.00	89.15	C
ATOM	3610	O	ASP	A	465	10.283	-22.593	9.138	1.00	87.32	O
ATOM	3611	CB	ASP	A	465	7.943	-24.180	7.792	1.00	117.95	C
ATOM	3612	CG	ASP	A	465	6.667	-24.818	8.211	1.00	113.93	C
ATOM	3613	OD1	ASP	A	465	6.716	-25.982	8.676	1.00	115.05	O
ATOM	3614	OD2	ASP	A	465	5.618	-24.165	8.050	1.00	111.77	O1-
ATOM	3615	N	TYR	A	466	9.964	-22.015	6.994	1.00	92.76	N
ATOM	3616	CA	TYR	A	466	11.372	-21.908	6.688	1.00	97.79	C
ATOM	3617	C	TYR	A	466	11.937	-20.511	6.911	1.00	94.36	C
ATOM	3618	O	TYR	A	466	13.126	-20.362	7.254	1.00	95.54	O
ATOM	3619	CB	TYR	A	466	11.556	-22.332	5.243	1.00	81.39	C
ATOM	3620	CG	TYR	A	466	11.045	-23.722	5.001	1.00	84.22	C
ATOM	3621	CD1	TYR	A	466	11.286	-24.725	5.927	1.00	84.84	C
ATOM	3622	CD2	TYR	A	466	10.326	-24.032	3.857	1.00	86.34	C
ATOM	3623	CE1	TYR	A	466	10.836	-25.993	5.725	1.00	87.42	C
ATOM	3624	CE2	TYR	A	466	9.870	-25.300	3.639	1.00	88.56	C
ATOM	3625	CZ	TYR	A	466	10.120	-26.283	4.583	1.00	89.33	C
ATOM	3626	OH	TYR	A	466	9.650	-27.571	4.391	1.00	92.35	O
ATOM	3627	N	GLY	A	467	11.078	-19.503	6.724	1.00	111.17	N
ATOM	3628	CA	GLY	A	467	11.445	-18.091	6.714	1.00	108.46	C
ATOM	3629	C	GLY	A	467	12.477	-17.598	7.713	1.00	106.72	C
ATOM	3630	O	GLY	A	467	13.433	-16.892	7.344	1.00	109.73	O
ATOM	3631	N	TYR	A	468	12.288	-17.942	8.984	1.00	112.81	N
ATOM	3632	CA	TYR	A	468	13.296	-17.635	9.995	1.00	110.46	C
ATOM	3633	C	TYR	A	468	14.674	-18.164	9.595	1.00	117.01	C
ATOM	3634	O	TYR	A	468	15.513	-17.351	9.253	1.00	119.17	O
ATOM	3635	CB	TYR	A	468	12.879	-18.127	11.370	1.00	114.96	C
ATOM	3636	CG	TYR	A	468	11.767	-17.319	11.963	1.00	109.18	C
ATOM	3637	CD1	TYR	A	468	10.730	-17.935	12.644	1.00	103.56	C
ATOM	3638	CD2	TYR	A	468	11.754	-15.943	11.852	1.00	106.20	C
ATOM	3639	CE1	TYR	A	468	9.713	-17.200	13.202	1.00	96.10	C
ATOM	3640	CE2	TYR	A	468	10.735	-15.202	12.397	1.00	98.66	C
ATOM	3641	CZ	TYR	A	468	9.717	-15.836	13.075	1.00	93.69	C
ATOM	3642	OH	TYR	A	468	8.688	-15.114	13.633	1.00	87.09	O
ATOM	3643	N	PRO	A	469	14.911	-19.509	9.623	1.00	71.08	N
ATOM	3644	CA	PRO	A	469	16.181	-20.069	9.145	1.00	78.67	C
ATOM	3645	C	PRO	A	469	16.664	-19.438	7.854	1.00	85.18	C
ATOM	3646	O	PRO	A	469	17.791	-18.959	7.844	1.00	87.58	O
ATOM	3647	CB	PRO	A	469	15.833	-21.534	8.907	1.00	95.87	C
ATOM	3648	CG	PRO	A	469	14.912	-21.836	9.956	1.00	88.87	C
ATOM	3649	CD	PRO	A	469	14.052	-20.593	10.138	1.00	82.59	C
ATOM	3650	N	ILE	A	470	15.841	-19.435	6.803	1.00	112.11	N
ATOM	3651	CA	ILE	A	470	16.239	-18.757	5.565	1.00	113.48	C
ATOM	3652	C	ILE	A	470	16.916	-17.430	5.905	1.00	109.28	C
ATOM	3653	O	ILE	A	470	17.997	-17.097	5.386	1.00	110.04	O
ATOM	3654	CB	ILE	A	470	15.027	-18.433	4.657	1.00	109.58	C
ATOM	3655	CG1	ILE	A	470	14.333	-19.703	4.166	1.00	111.95	C

ATOM	3656	CG2	ILE	A	470	15.457	-17.561	3.477	1.00111.25	C
ATOM	3657	CD1	ILE	A	470	15.171	-20.555	3.264	1.00133.99	C
ATOM	3658	N	ARG	A	471	16.277	-16.679	6.797	1.00110.83	N
ATOM	3659	CA	ARG	A	471	16.750	-15.344	7.143	1.00105.40	C
ATOM	3660	C	ARG	A	471	18.029	-15.283	8.011	1.00103.74	C
ATOM	3661	O	ARG	A	471	18.907	-14.464	7.782	1.00100.91	O
ATOM	3662	CB	ARG	A	471	15.612	-14.577	7.797	1.00104.40	C
ATOM	3663	CG	ARG	A	471	15.398	-13.244	7.171	1.00102.62	C
ATOM	3664	CD	ARG	A	471	14.027	-12.694	7.481	1.00100.94	C
ATOM	3665	NE	ARG	A	471	13.731	-12.718	8.906	1.00 94.88	N
ATOM	3666	CZ	ARG	A	471	12.555	-12.379	9.413	1.00 90.55	C
ATOM	3667	NH1	ARG	A	471	11.588	-11.987	8.599	1.00 91.30	N1+
ATOM	3668	NH2	ARG	A	471	12.351	-12.438	10.722	1.00 85.64	N
ATOM	3669	N	TYR	A	472	18.135	-16.141	9.010	1.00108.86	N
ATOM	3670	CA	TYR	A	472	19.274	-16.103	9.894	1.00107.94	C
ATOM	3671	C	TYR	A	472	20.476	-16.550	9.126	1.00112.78	C
ATOM	3672	O	TYR	A	472	21.582	-16.077	9.351	1.00111.17	O
ATOM	3673	CB	TYR	A	472	19.088	-17.067	11.052	1.00107.57	C
ATOM	3674	CG	TYR	A	472	20.372	-17.328	11.800	1.00109.12	C
ATOM	3675	CD1	TYR	A	472	20.768	-16.506	12.842	1.00103.06	C
ATOM	3676	CD2	TYR	A	472	21.195	-18.381	11.451	1.00117.27	C
ATOM	3677	CE1	TYR	A	472	21.937	-16.736	13.515	1.00104.86	C
ATOM	3678	CE2	TYR	A	472	22.366	-18.611	12.123	1.00119.62	C
ATOM	3679	CZ	TYR	A	472	22.728	-17.786	13.151	1.00113.31	C
ATOM	3680	OH	TYR	A	472	23.893	-18.018	13.821	1.00115.96	O
ATOM	3681	N	TYR	A	473	20.266	-17.503	8.235	1.00 98.40	N
ATOM	3682	CA	TYR	A	473	21.371	-18.055	7.462	1.00103.25	C
ATOM	3683	C	TYR	A	473	21.764	-17.217	6.233	1.00103.11	C
ATOM	3684	O	TYR	A	473	22.923	-17.253	5.809	1.00105.53	O
ATOM	3685	CB	TYR	A	473	21.066	-19.505	7.076	1.00 87.78	C
ATOM	3686	CG	TYR	A	473	21.215	-20.468	8.232	1.00 90.97	C
ATOM	3687	CD1	TYR	A	473	20.134	-21.168	8.737	1.00 91.62	C
ATOM	3688	CD2	TYR	A	473	22.449	-20.662	8.818	1.00 93.71	C
ATOM	3689	CE1	TYR	A	473	20.294	-22.042	9.787	1.00 92.97	C
ATOM	3690	CE2	TYR	A	473	22.620	-21.527	9.860	1.00 97.49	C
ATOM	3691	CZ	TYR	A	473	21.551	-22.215	10.351	1.00 96.31	C
ATOM	3692	OH	TYR	A	473	21.771	-23.063	11.418	1.00 96.03	O
ATOM	3693	N	SER	A	474	20.812	-16.451	5.689	1.00 96.20	N
ATOM	3694	CA	SER	A	474	21.064	-15.675	4.473	1.00 96.30	C
ATOM	3695	C	SER	A	474	21.044	-14.157	4.607	1.00 88.34	C
ATOM	3696	O	SER	A	474	21.488	-13.464	3.703	1.00 87.71	O
ATOM	3697	CB	SER	A	474	20.071	-16.076	3.401	1.00 90.21	C
ATOM	3698	OG	SER	A	474	20.139	-17.468	3.200	1.00 93.26	O
ATOM	3699	N	ASP	A	475	20.518	-13.642	5.710	1.00123.17	N
ATOM	3700	CA	ASP	A	475	20.432	-12.192	5.922	1.00115.87	C
ATOM	3701	C	ASP	A	475	19.523	-11.533	4.874	1.00115.62	C
ATOM	3702	O	ASP	A	475	19.400	-10.304	4.808	1.00112.95	O
ATOM	3703	CB	ASP	A	475	21.828	-11.549	5.919	1.00146.68	C
ATOM	3704	CG	ASP	A	475	21.967	-10.395	6.924	1.00139.83	C
ATOM	3705	OD1	ASP	A	475	20.960	-10.000	7.572	1.00137.43	O
ATOM	3706	OD2	ASP	A	475	23.102	-9.878	7.056	1.00137.99	O1-
ATOM	3707	N	VAL	A	476	18.878	-12.365	4.065	1.00111.48	N
ATOM	3708	CA	VAL	A	476	17.902	-11.893	3.090	1.00112.65	C
ATOM	3709	C	VAL	A	476	16.553	-11.476	3.722	1.00110.68	C
ATOM	3710	O	VAL	A	476	16.359	-11.615	4.919	1.00108.88	O
ATOM	3711	CB	VAL	A	476	17.663	-12.977	2.031	1.00120.26	C
ATOM	3712	CG1	VAL	A	476	18.980	-13.339	1.377	1.00123.31	C
ATOM	3713	CG2	VAL	A	476	17.003	-14.223	2.655	1.00124.33	C
ATOM	3714	N	LYS	A	477	15.631	-10.950	2.918	1.00111.54	N
ATOM	3715	CA	LYS	A	477	14.266	-10.681	3.375	1.00111.60	C
ATOM	3716	C	LYS	A	477	13.346	-11.792	2.874	1.00117.40	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	3717	O	LYS	A	477	13.549	-12.319	1.776	1.00121.40	O
ATOM	3718	CB	LYS	A	477	13.745	-9.356	2.812	1.00 99.88	C
ATOM	3719	CG	LYS	A	477	14.424	-8.092	3.277	1.00 95.38	C
ATOM	3720	CD	LYS	A	477	13.706	-6.879	2.693	1.00 97.08	C
ATOM	3721	CE	LYS	A	477	14.019	-5.623	3.500	1.00 94.50	C
ATOM	3722	NZ	LYS	A	477	13.397	-4.349	2.980	1.00 99.61	N1+
ATOM	3723	N	THR	A	478	12.320	-12.125	3.658	1.00127.58	N
ATOM	3724	CA	THR	A	478	11.355	-13.157	3.272	1.00129.12	C
ATOM	3725	C	THR	A	478	9.930	-12.621	3.243	1.00122.89	C
ATOM	3726	O	THR	A	478	9.629	-11.587	3.840	1.00117.76	O
ATOM	3727	CB	THR	A	478	11.384	-14.325	4.242	1.00112.24	C
ATOM	3728	CG2	THR	A	478	12.792	-14.870	4.364	1.00118.87	C
ATOM	3729	OG1	THR	A	478	10.942	-13.873	5.526	1.00104.99	O
ATOM	3730	N	LEU	A	479	9.045	-13.330	2.556	1.00110.93	N
ATOM	3731	CA	LEU	A	479	7.678	-12.856	2.420	1.00106.43	C
ATOM	3732	C	LEU	A	479	6.889	-13.170	3.678	1.00100.06	C
ATOM	3733	O	LEU	A	479	6.081	-12.356	4.138	1.00 95.39	O
ATOM	3734	CB	LEU	A	479	6.995	-13.506	1.216	1.00 80.68	C
ATOM	3735	CG	LEU	A	479	6.939	-12.796	-0.138	1.00 85.88	C
ATOM	3736	CD1	LEU	A	479	6.277	-13.691	-1.163	1.00 89.02	C
ATOM	3737	CD2	LEU	A	479	6.203	-11.476	-0.048	1.00 81.59	C
ATOM	3738	N	ILE	A	480	7.113	-14.365	4.224	1.00100.23	N
ATOM	3739	CA	ILE	A	480	6.354	-14.823	5.385	1.00 96.47	C
ATOM	3740	C	ILE	A	480	7.218	-15.665	6.310	1.00 98.06	C
ATOM	3741	O	ILE	A	480	8.003	-16.494	5.854	1.00103.35	O
ATOM	3742	CB	ILE	A	480	5.057	-15.620	4.986	1.00 79.36	C
ATOM	3743	CG1	ILE	A	480	5.416	-16.972	4.331	1.00 78.51	C
ATOM	3744	CG2	ILE	A	480	4.137	-14.754	4.115	1.00 81.57	C
ATOM	3745	CD1	ILE	A	480	4.248	-17.846	3.878	1.00 94.46	C
ATOM	3746	N	ASP	A	481	7.070	-15.436	7.611	1.00 97.63	N
ATOM	3747	CA	ASP	A	481	7.760	-16.230	8.624	1.00 98.10	C
ATOM	3748	C	ASP	A	481	6.793	-16.776	9.688	1.00 91.32	C
ATOM	3749	O	ASP	A	481	5.600	-16.451	9.692	1.00 87.66	O
ATOM	3750	CB	ASP	A	481	8.943	-15.455	9.261	1.00124.59	C
ATOM	3751	CG	ASP	A	481	8.523	-14.140	9.962	1.00118.15	C
ATOM	3752	OD1	ASP	A	481	8.304	-14.147	11.191	1.00111.44	O
ATOM	3753	OD2	ASP	A	481	8.455	-13.085	9.295	1.00120.78	O1-
ATOM	3754	N	GLY	A	482	7.319	-17.619	10.574	1.00102.26	N
ATOM	3755	CA	GLY	A	482	6.543	-18.209	11.654	1.00 97.22	C
ATOM	3756	C	GLY	A	482	5.822	-17.213	12.534	1.00 90.76	C
ATOM	3757	O	GLY	A	482	5.132	-17.602	13.469	1.00 87.07	O
ATOM	3758	N	GLY	A	483	5.997	-15.928	12.241	1.00 91.31	N
ATOM	3759	CA	GLY	A	483	5.317	-14.869	12.955	1.00 86.06	C
ATOM	3760	C	GLY	A	483	4.328	-14.196	12.025	1.00 86.75	C
ATOM	3761	O	GLY	A	483	3.170	-13.960	12.392	1.00 83.34	O
ATOM	3762	N	LYS	A	484	4.781	-13.902	10.809	1.00 97.85	N
ATOM	3763	CA	LYS	A	484	3.928	-13.350	9.754	1.00 99.54	C
ATOM	3764	C	LYS	A	484	3.425	-14.501	8.892	1.00103.57	C
ATOM	3765	O	LYS	A	484	4.025	-14.828	7.872	1.00109.74	O
ATOM	3766	CB	LYS	A	484	4.733	-12.362	8.897	1.00100.39	C
ATOM	3767	CG	LYS	A	484	3.959	-11.664	7.783	1.00102.86	C
ATOM	3768	CD	LYS	A	484	4.892	-10.895	6.858	1.00108.16	C
ATOM	3769	CE	LYS	A	484	4.158	-9.800	6.099	1.00110.08	C
ATOM	3770	NZ	LYS	A	484	5.084	-8.873	5.367	1.00114.34	N1+
ATOM	3771	N	HIS	A	485	2.340	-15.136	9.312	1.00102.78	N
ATOM	3772	CA	HIS	A	485	1.890	-16.330	8.611	1.00106.30	C
ATOM	3773	C	HIS	A	485	0.381	-16.528	8.675	1.00104.16	C
ATOM	3774	O	HIS	A	485	-0.089	-17.635	8.918	1.00104.78	O
ATOM	3775	CB	HIS	A	485	2.635	-17.593	9.088	1.00 99.81	C
ATOM	3776	CG	HIS	A	485	2.358	-17.975	10.497	1.00 95.13	C
ATOM	3777	CD2	HIS	A	485	3.007	-17.697	11.657	1.00 95.01	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	3778	ND1	HIS	A	485	1.269	-18.754	10.879	1.00	90.63	N
ATOM	3779	CE1	HIS	A	485	1.266	-18.925	12.175	1.00	88.10	C
ATOM	3780	NE2	HIS	A	485	2.323	-18.292	12.683	1.00	90.58	N
ATOM	3781	N	LEU	A	486	-0.374	-15.454	8.451	1.00	111.19	N
ATOM	3782	CA	LEU	A	486	-1.823	-15.566	8.295	1.00	110.58	C
ATOM	3783	C	LEU	A	486	-2.164	-16.116	6.910	1.00	115.35	C
ATOM	3784	O	LEU	A	486	-1.327	-16.074	5.997	1.00	119.03	O
ATOM	3785	CB	LEU	A	486	-2.515	-14.211	8.507	1.00	101.73	C
ATOM	3786	CG	LEU	A	486	-2.603	-13.649	9.932	1.00	97.50	C
ATOM	3787	CD1	LEU	A	486	-3.600	-12.496	10.013	1.00	96.90	C
ATOM	3788	CD2	LEU	A	486	-2.984	-14.736	10.928	1.00	96.56	C
ATOM	3789	N	GLY	A	487	-3.383	-16.635	6.754	1.00	87.43	N
ATOM	3790	CA	GLY	A	487	-3.838	-17.111	5.457	1.00	91.88	C
ATOM	3791	C	GLY	A	487	-3.541	-16.125	4.340	1.00	94.45	C
ATOM	3792	O	GLY	A	487	-3.045	-16.533	3.265	1.00	98.85	O
ATOM	3793	N	LYS	A	488	-3.846	-14.841	4.609	1.00	97.15	N
ATOM	3794	CA	LYS	A	488	-3.571	-13.735	3.701	1.00	99.35	C
ATOM	3795	C	LYS	A	488	-2.079	-13.626	3.342	1.00	101.27	C
ATOM	3796	O	LYS	A	488	-1.738	-13.298	2.207	1.00	102.25	O
ATOM	3797	CB	LYS	A	488	-4.132	-12.421	4.254	1.00	150.95	C
ATOM	3798	CG	LYS	A	488	-3.366	-11.119	3.877	1.00	148.04	C
ATOM	3799	CD	LYS	A	488	-2.670	-11.068	2.472	1.00	145.84	C
ATOM	3800	CE	LYS	A	488	-3.556	-10.626	1.302	1.00	150.26	C
ATOM	3801	NZ	LYS	A	488	-3.558	-9.144	1.129	1.00	148.69	N1+
ATOM	3802	N	ASP	A	489	-1.180	-13.916	4.278	1.00	94.38	N
ATOM	3803	CA	ASP	A	489	0.251	-13.790	3.990	1.00	95.73	C
ATOM	3804	C	ASP	A	489	0.784	-15.056	3.341	1.00	99.01	C
ATOM	3805	O	ASP	A	489	1.556	-14.993	2.380	1.00	102.57	O
ATOM	3806	CB	ASP	A	489	1.033	-13.482	5.261	1.00	115.25	C
ATOM	3807	CG	ASP	A	489	0.448	-12.320	6.042	1.00	110.36	C
ATOM	3808	OD1	ASP	A	489	0.229	-11.240	5.442	1.00	111.88	O
ATOM	3809	OD2	ASP	A	489	0.206	-12.499	7.259	1.00	105.39	O1-
ATOM	3810	N	ASN	A	490	0.368	-16.201	3.872	1.00	84.05	N
ATOM	3811	CA	ASN	A	490	0.691	-17.473	3.250	1.00	87.14	C
ATOM	3812	C	ASN	A	490	0.200	-17.613	1.800	1.00	89.79	C
ATOM	3813	O	ASN	A	490	0.738	-18.426	1.029	1.00	93.82	O
ATOM	3814	CB	ASN	A	490	0.130	-18.622	4.068	1.00	112.58	C
ATOM	3815	CG	ASN	A	490	0.520	-18.537	5.496	1.00	108.30	C
ATOM	3816	ND2	ASN	A	490	-0.452	-18.422	6.364	1.00	108.31	N
ATOM	3817	OD1	ASN	A	490	1.687	-18.577	5.824	1.00	105.77	O
ATOM	3818	N	PHE	A	491	-0.823	-16.846	1.422	1.00	83.75	N
ATOM	3819	CA	PHE	A	491	-1.384	-17.000	0.074	1.00	85.79	C
ATOM	3820	C	PHE	A	491	-0.363	-16.911	-1.049	1.00	89.64	C
ATOM	3821	O	PHE	A	491	-0.327	-17.773	-1.922	1.00	93.11	O
ATOM	3822	CB	PHE	A	491	-2.504	-16.014	-0.201	1.00	90.47	C
ATOM	3823	CG	PHE	A	491	-3.127	-16.201	-1.540	1.00	93.05	C
ATOM	3824	CD1	PHE	A	491	-4.077	-17.193	-1.743	1.00	93.41	C
ATOM	3825	CD2	PHE	A	491	-2.757	-15.404	-2.606	1.00	94.97	C
ATOM	3826	CE1	PHE	A	491	-4.649	-17.380	-2.983	1.00	95.57	C
ATOM	3827	CE2	PHE	A	491	-3.331	-15.583	-3.852	1.00	97.69	C
ATOM	3828	CZ	PHE	A	491	-4.273	-16.575	-4.040	1.00	97.54	C
ATOM	3829	N	PHE	A	492	0.452	-15.862	-1.024	1.00	88.15	N
ATOM	3830	CA	PHE	A	492	1.477	-15.662	-2.047	1.00	93.06	C
ATOM	3831	C	PHE	A	492	2.527	-16.781	-2.129	1.00	97.49	C
ATOM	3832	O	PHE	A	492	2.645	-17.465	-3.157	1.00	102.64	O
ATOM	3833	CB	PHE	A	492	2.143	-14.311	-1.854	1.00	123.56	C
ATOM	3834	CG	PHE	A	492	1.171	-13.198	-1.685	1.00	119.27	C
ATOM	3835	CD1	PHE	A	492	1.056	-12.537	-0.480	1.00	113.77	C
ATOM	3836	CD2	PHE	A	492	0.352	-12.833	-2.719	1.00	120.95	C
ATOM	3837	CE1	PHE	A	492	0.151	-11.509	-0.319	1.00	110.99	C
ATOM	3838	CE2	PHE	A	492	-0.555	-11.809	-2.568	1.00	117.85	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	3839	CZ	PHE	A	492	-0.659	-11.145	-1.366	1.00113.05	C
ATOM	3840	N	SER	A	493	3.298	-16.970	-1.066	1.00 86.22	N
ATOM	3841	CA	SER	A	493	4.256	-18.080	-1.061	1.00 90.75	C
ATOM	3842	C	SER	A	493	3.618	-19.447	-1.429	1.00 91.73	C
ATOM	3843	O	SER	A	493	4.261	-20.302	-2.040	1.00 97.28	O
ATOM	3844	CB	SER	A	493	5.014	-18.139	0.276	1.00115.55	C
ATOM	3845	OG	SER	A	493	5.912	-17.047	0.408	1.00129.09	O
ATOM	3846	N	SER	A	494	2.355	-19.640	-1.054	1.00100.08	N
ATOM	3847	CA	SER	A	494	1.615	-20.824	-1.472	1.00101.40	C
ATOM	3848	C	SER	A	494	1.534	-20.849	-2.985	1.00106.52	C
ATOM	3849	O	SER	A	494	1.908	-21.827	-3.630	1.00111.63	O
ATOM	3850	CB	SER	A	494	0.191	-20.794	-0.906	1.00 94.44	C
ATOM	3851	OG	SER	A	494	-0.558	-21.930	-1.306	1.00 96.27	O
ATOM	3852	N	PHE	A	495	1.039	-19.753	-3.542	1.00 96.81	N
ATOM	3853	CA	PHE	A	495	0.793	-19.633	-4.971	1.00101.33	C
ATOM	3854	C	PHE	A	495	2.049	-19.851	-5.814	1.00108.04	C
ATOM	3855	O	PHE	A	495	2.062	-20.699	-6.713	1.00110.76	O
ATOM	3856	CB	PHE	A	495	0.227	-18.252	-5.254	1.00112.31	C
ATOM	3857	CG	PHE	A	495	-0.262	-18.068	-6.652	1.00115.99	C
ATOM	3858	CD1	PHE	A	495	-1.621	-17.985	-6.912	1.00112.98	C
ATOM	3859	CD2	PHE	A	495	0.627	-17.963	-7.700	1.00121.76	C
ATOM	3860	CE1	PHE	A	495	-2.078	-17.798	-8.186	1.00116.60	C
ATOM	3861	CE2	PHE	A	495	0.177	-17.781	-8.974	1.00124.99	C
ATOM	3862	CZ	PHE	A	495	-1.176	-17.697	-9.221	1.00123.17	C
ATOM	3863	N	VAL	A	496	3.096	-19.078	-5.526	1.00 99.64	N
ATOM	3864	CA	VAL	A	496	4.370	-19.186	-6.250	1.00104.08	C
ATOM	3865	C	VAL	A	496	4.920	-20.602	-6.281	1.00105.22	C
ATOM	3866	O	VAL	A	496	5.645	-20.971	-7.180	1.00107.79	O
ATOM	3867	CB	VAL	A	496	5.439	-18.284	-5.628	1.00 88.70	C
ATOM	3868	CG1	VAL	A	496	6.822	-18.758	-6.023	1.00107.13	C
ATOM	3869	CG2	VAL	A	496	5.225	-16.852	-6.043	1.00104.21	C
ATOM	3870	N	LEU	A	497	4.556	-21.388	-5.285	1.00 84.24	N
ATOM	3871	CA	LEU	A	497	5.066	-22.730	-5.130	1.00 85.91	C
ATOM	3872	C	LEU	A	497	4.142	-23.838	-5.577	1.00 86.49	C
ATOM	3873	O	LEU	A	497	4.594	-24.969	-5.697	1.00 89.17	O
ATOM	3874	CB	LEU	A	497	5.299	-22.994	-3.672	1.00 70.93	C
ATOM	3875	CG	LEU	A	497	6.626	-22.661	-3.087	1.00 71.77	C
ATOM	3876	CD1	LEU	A	497	6.348	-22.570	-1.624	1.00 70.15	C
ATOM	3877	CD2	LEU	A	497	7.551	-23.787	-3.398	1.00 75.80	C
ATOM	3878	N	SER	A	498	2.852	-23.567	-5.751	1.00 91.20	N
ATOM	3879	CA	SER	A	498	1.944	-24.670	-6.092	1.00 91.67	C
ATOM	3880	C	SER	A	498	1.148	-24.473	-7.378	1.00 93.65	C
ATOM	3881	O	SER	A	498	0.596	-25.430	-7.933	1.00 95.86	O
ATOM	3882	CB	SER	A	498	1.012	-25.003	-4.931	1.00 94.40	C
ATOM	3883	OG	SER	A	498	0.173	-23.911	-4.625	1.00 91.46	O
ATOM	3884	N	LYS	A	499	1.091	-23.240	-7.857	1.00121.61	N
ATOM	3885	CA	LYS	A	499	0.423	-22.994	-9.114	1.00124.21	C
ATOM	3886	C	LYS	A	499	1.397	-23.336	-10.229	1.00129.05	C
ATOM	3887	O	LYS	A	499	2.513	-23.797	-9.965	1.00130.34	O
ATOM	3888	CB	LYS	A	499	-0.065	-21.549	-9.193	1.00131.05	C
ATOM	3889	CG	LYS	A	499	-1.046	-21.202	-8.080	1.00125.85	C
ATOM	3890	CD	LYS	A	499	-2.134	-22.283	-7.957	1.00125.02	C
ATOM	3891	CE	LYS	A	499	-3.251	-21.937	-6.963	1.00119.25	C
ATOM	3892	NZ	LYS	A	499	-4.501	-22.712	-7.257	1.00119.76	N1+
ATOM	3893	N	GLU	A	500	0.977	-23.128	-11.473	1.00118.18	N
ATOM	3894	CA	GLU	A	500	1.833	-23.427	-12.620	1.00123.78	C
ATOM	3895	C	GLU	A	500	3.080	-22.521	-12.704	1.00126.36	C
ATOM	3896	O	GLU	A	500	3.085	-21.389	-12.233	1.00124.81	O
ATOM	3897	CB	GLU	A	500	1.020	-23.390	-13.928	1.00147.06	C
ATOM	3898	CG	GLU	A	500	-0.207	-24.316	-13.957	1.00144.75	C
ATOM	3899	CD	GLU	A	500	-0.697	-24.599	-15.371	1.00159.28	C

ATOM	3900	OE1	GLU	A	500	-0.323	-23.844	-16.292	1.00164.81	O
ATOM	3901	OE2	GLU	A	500	-1.446	-25.582	-15.565	1.00157.33	O1-
ATOM	3902	N	GLN	A	501	4.138	-23.042	-13.309	1.00138.05	N
ATOM	3903	CA	GLN	A	501	5.411	-22.341	-13.384	1.00135.83	C
ATOM	3904	C	GLN	A	501	5.310	-20.860	-13.713	1.00129.23	C
ATOM	3905	O	GLN	A	501	5.793	-20.025	-12.960	1.00123.15	O
ATOM	3906	CB	GLN	A	501	6.296	-22.995	-14.424	1.00106.38	C
ATOM	3907	CG	GLN	A	501	7.253	-23.997	-13.881	1.00113.55	C
ATOM	3908	CD	GLN	A	501	8.370	-24.264	-14.863	1.00122.99	C
ATOM	3909	NE2	GLN	A	501	8.765	-25.524	-14.995	1.00143.62	N
ATOM	3910	OE1	GLN	A	501	8.858	-23.348	-15.518	1.00121.41	O
ATOM	3911	N	ILE	A	502	4.712	-20.536	-14.852	1.00143.02	N
ATOM	3912	CA	ILE	A	502	4.701	-19.155	-15.334	1.00139.54	C
ATOM	3913	C	ILE	A	502	4.032	-18.206	-14.320	1.00132.85	C
ATOM	3914	O	ILE	A	502	4.677	-17.255	-13.807	1.00128.79	O
ATOM	3915	CB	ILE	A	502	4.042	-19.028	-16.760	1.00118.22	C
ATOM	3916	CG1	ILE	A	502	4.686	-19.985	-17.785	1.00136.34	C
ATOM	3917	CG2	ILE	A	502	4.121	-17.592	-17.273	1.00126.53	C
ATOM	3918	CD1	ILE	A	502	4.095	-21.395	-17.836	1.00142.12	C
ATOM	3919	N	PRO	A	503	2.742	-18.464	-14.006	1.00131.50	N
ATOM	3920	CA	PRO	A	503	2.048	-17.585	-13.057	1.00127.12	C
ATOM	3921	C	PRO	A	503	2.787	-17.512	-11.726	1.00122.15	C
ATOM	3922	O	PRO	A	503	2.846	-16.448	-11.137	1.00118.68	O
ATOM	3923	CB	PRO	A	503	0.660	-18.234	-12.910	1.00 92.54	C
ATOM	3924	CG	PRO	A	503	0.825	-19.620	-13.380	1.00107.85	C
ATOM	3925	CD	PRO	A	503	1.876	-19.571	-14.449	1.00109.87	C
ATOM	3926	N	ALA	A	504	3.358	-18.621	-11.278	1.00116.43	N
ATOM	3927	CA	ALA	A	504	4.193	-18.618	-10.087	1.00112.91	C
ATOM	3928	C	ALA	A	504	5.239	-17.529	-10.225	1.00110.35	C
ATOM	3929	O	ALA	A	504	5.361	-16.613	-9.386	1.00106.01	O
ATOM	3930	CB	ALA	A	504	4.873	-19.983	-9.923	1.00 65.28	C
ATOM	3931	N	ALA	A	505	5.995	-17.652	-11.307	1.00138.11	N
ATOM	3932	CA	ALA	A	505	7.053	-16.722	-11.623	1.00138.10	C
ATOM	3933	C	ALA	A	505	6.522	-15.301	-11.605	1.00134.95	C
ATOM	3934	O	ALA	A	505	7.267	-14.377	-11.300	1.00133.32	O
ATOM	3935	CB	ALA	A	505	7.638	-17.047	-12.952	1.00 65.96	C
ATOM	3936	N	ASN	A	506	5.240	-15.117	-11.919	1.00138.16	N
ATOM	3937	CA	ASN	A	506	4.647	-13.763	-11.801	1.00137.34	C
ATOM	3938	C	ASN	A	506	4.293	-13.258	-10.377	1.00133.14	C
ATOM	3939	O	ASN	A	506	4.640	-12.113	-9.982	1.00131.87	O
ATOM	3940	CB	ASN	A	506	3.467	-13.600	-12.761	1.00124.62	C
ATOM	3941	CG	ASN	A	506	3.911	-13.193	-14.155	1.00129.73	C
ATOM	3942	ND2	ASN	A	506	3.001	-13.278	-15.121	1.00134.20	N
ATOM	3943	OD1	ASN	A	506	5.060	-12.792	-14.354	1.00130.76	O
ATOM	3944	N	MET	A	507	3.594	-14.098	-9.616	1.00132.66	N
ATOM	3945	CA	MET	A	507	3.422	-13.847	-8.193	1.00128.78	C
ATOM	3946	C	MET	A	507	4.782	-13.452	-7.679	1.00124.70	C
ATOM	3947	O	MET	A	507	5.000	-12.295	-7.445	1.00122.74	O
ATOM	3948	CB	MET	A	507	2.901	-15.061	-7.410	1.00107.35	C
ATOM	3949	CG	MET	A	507	1.399	-15.111	-7.183	1.00105.00	C
ATOM	3950	SD	MET	A	507	0.638	-13.518	-6.839	1.00108.13	S
ATOM	3951	CE	MET	A	507	1.711	-12.910	-5.560	1.00103.53	C
ATOM	3952	N	ALA	A	508	5.723	-14.382	-7.562	1.00141.27	N
ATOM	3953	CA	ALA	A	508	7.005	-14.005	-6.961	1.00139.02	C
ATOM	3954	C	ALA	A	508	7.277	-12.488	-7.086	1.00138.51	C
ATOM	3955	O	ALA	A	508	7.239	-11.750	-6.079	1.00136.63	O
ATOM	3956	CB	ALA	A	508	8.122	-14.818	-7.553	1.00111.47	C
ATOM	3957	N	ARG	A	509	7.503	-12.021	-8.315	1.00117.14	N
ATOM	3958	CA	ARG	A	509	7.648	-10.585	-8.607	1.00118.71	C
ATOM	3959	C	ARG	A	509	6.598	-9.682	-7.929	1.00117.85	C
ATOM	3960	O	ARG	A	509	6.928	-8.868	-7.040	1.00116.75	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	3961	CB	ARG	A	509	7.630	-10.345	-10.122	1.00120.33	C
ATOM	3962	CG	ARG	A	509	7.972	-8.923	-10.573	1.00123.83	C
ATOM	3963	CD	ARG	A	509	9.247	-8.359	-9.884	1.00121.75	C
ATOM	3964	NE	ARG	A	509	10.501	-9.086	-10.150	1.00122.55	N
ATOM	3965	CZ	ARG	A	509	11.624	-8.946	-9.437	1.00122.43	C
ATOM	3966	NH1	ARG	A	509	11.662	-8.110	-8.406	1.00120.06	N1+
ATOM	3967	NH2	ARG	A	509	12.709	-9.645	-9.748	1.00125.80	N
ATOM	3968	N	LEU	A	510	5.335	-9.821	-8.332	1.00109.65	N
ATOM	3969	CA	LEU	A	510	4.304	-8.939	-7.761	1.00111.25	C
ATOM	3970	C	LEU	A	510	4.074	-9.010	-6.229	1.00107.50	C
ATOM	3971	O	LEU	A	510	3.807	-8.002	-5.599	1.00109.05	O
ATOM	3972	CB	LEU	A	510	2.988	-9.119	-8.498	1.00108.12	C
ATOM	3973	CG	LEU	A	510	2.933	-8.446	-9.860	1.00114.74	C
ATOM	3974	CD1	LEU	A	510	1.574	-8.683	-10.492	1.00119.90	C
ATOM	3975	CD2	LEU	A	510	3.223	-6.951	-9.739	1.00118.77	C
ATOM	3976	N	SER	A	511	4.151	-10.196	-5.640	1.00108.92	N
ATOM	3977	CA	SER	A	511	4.037	-10.372	-4.202	1.00105.13	C
ATOM	3978	C	SER	A	511	5.211	-9.742	-3.469	1.00103.30	C
ATOM	3979	O	SER	A	511	5.042	-9.130	-2.415	1.00102.27	O
ATOM	3980	CB	SER	A	511	3.995	-11.855	-3.848	1.00108.42	C
ATOM	3981	OG	SER	A	511	5.301	-12.348	-3.613	1.00108.11	O
ATOM	3982	N	VAL	A	512	6.418	-9.904	-3.991	1.00102.41	N
ATOM	3983	CA	VAL	A	512	7.511	-9.258	-3.291	1.00101.55	C
ATOM	3984	C	VAL	A	512	7.410	-7.744	-3.419	1.00105.46	C
ATOM	3985	O	VAL	A	512	7.473	-7.010	-2.418	1.00105.73	O
ATOM	3986	CB	VAL	A	512	8.863	-9.757	-3.735	1.00 80.98	C
ATOM	3987	CG1	VAL	A	512	9.902	-8.717	-3.434	1.00 82.23	C
ATOM	3988	CG2	VAL	A	512	9.176	-11.050	-3.009	1.00 78.91	C
ATOM	3989	N	GLU	A	513	7.218	-7.265	-4.638	1.00109.22	N
ATOM	3990	CA	GLU	A	513	7.111	-5.827	-4.813	1.00115.09	C
ATOM	3991	C	GLU	A	513	6.006	-5.200	-3.960	1.00117.41	C
ATOM	3992	O	GLU	A	513	6.239	-4.208	-3.245	1.00119.63	O
ATOM	3993	CB	GLU	A	513	6.906	-5.494	-6.277	1.00147.58	C
ATOM	3994	CG	GLU	A	513	8.103	-5.846	-7.099	1.00147.63	C
ATOM	3995	CD	GLU	A	513	9.347	-5.147	-6.607	1.00147.67	C
ATOM	3996	OE1	GLU	A	513	9.216	-4.086	-5.957	1.00149.87	O
ATOM	3997	OE2	GLU	A	513	10.456	-5.657	-6.871	1.00146.64	O1-
ATOM	3998	N	TYR	A	514	4.808	-5.779	-4.032	1.00115.16	N
ATOM	3999	CA	TYR	A	514	3.653	-5.274	-3.291	1.00119.05	C
ATOM	4000	C	TYR	A	514	3.760	-5.479	-1.781	1.00114.73	C
ATOM	4001	O	TYR	A	514	3.148	-4.738	-1.000	1.00114.59	O
ATOM	4002	CB	TYR	A	514	2.349	-5.858	-3.824	1.00117.25	C
ATOM	4003	CG	TYR	A	514	1.740	-5.002	-4.893	1.00125.00	C
ATOM	4004	CD1	TYR	A	514	2.431	-4.742	-6.061	1.00133.21	C
ATOM	4005	CD2	TYR	A	514	0.484	-4.442	-4.739	1.00125.59	C
ATOM	4006	CE1	TYR	A	514	1.891	-3.951	-7.062	1.00142.62	C
ATOM	4007	CE2	TYR	A	514	-0.074	-3.648	-5.738	1.00134.74	C
ATOM	4008	CZ	TYR	A	514	0.640	-3.401	-6.901	1.00143.35	C
ATOM	4009	OH	TYR	A	514	0.122	-2.608	-7.909	1.00153.80	O
ATOM	4010	N	THR	A	515	4.537	-6.475	-1.363	1.00104.06	N
ATOM	4011	CA	THR	A	515	4.832	-6.630	0.062	1.00101.22	C
ATOM	4012	C	THR	A	515	5.772	-5.522	0.512	1.00102.86	C
ATOM	4013	O	THR	A	515	5.665	-5.039	1.633	1.00103.25	O
ATOM	4014	CB	THR	A	515	5.416	-8.023	0.436	1.00103.45	C
ATOM	4015	CG2	THR	A	515	6.896	-7.924	0.747	1.00100.16	C
ATOM	4016	OG1	THR	A	515	4.733	-8.526	1.592	1.00101.96	O
ATOM	4017	N	GLU	A	516	6.685	-5.112	-0.365	1.00 95.77	N
ATOM	4018	CA	GLU	A	516	7.530	-3.979	-0.027	1.00 99.84	C
ATOM	4019	C	GLU	A	516	6.745	-2.662	-0.095	1.00108.51	C
ATOM	4020	O	GLU	A	516	7.120	-1.676	0.544	1.00112.63	O
ATOM	4021	CB	GLU	A	516	8.763	-3.922	-0.919	1.00116.43	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4022	CG	GLU	A	516	9.910	-3.149	-0.301	1.00118.56	C
ATOM	4023	CD	GLU	A	516	10.569	-3.930	0.808	1.00113.08	C
ATOM	4024	OE1	GLU	A	516	11.461	-3.382	1.493	1.00113.52	O
ATOM	4025	OE2	GLU	A	516	10.193	-5.105	0.987	1.00109.02	O1-
ATOM	4026	N	LYS	A	517	5.668	-2.628	-0.876	1.00114.43	N
ATOM	4027	CA	LYS	A	517	4.823	-1.429	-0.905	1.00125.84	C
ATOM	4028	C	LYS	A	517	3.882	-1.339	0.310	1.00124.93	C
ATOM	4029	O	LYS	A	517	3.535	-0.234	0.779	1.00130.35	O
ATOM	4030	CB	LYS	A	517	4.035	-1.366	-2.221	1.00110.73	C
ATOM	4031	CG	LYS	A	517	4.886	-1.356	-3.483	1.00112.81	C
ATOM	4032	CD	LYS	A	517	4.540	-0.178	-4.392	1.00125.88	C
ATOM	4033	CE	LYS	A	517	3.144	-0.297	-5.000	1.00129.25	C
ATOM	4034	NZ	LYS	A	517	2.703	0.950	-5.709	1.00136.48	N1+
ATOM	4035	N	SER	A	518	3.454	-2.494	0.815	1.00154.41	N
ATOM	4036	CA	SER	A	518	2.615	-2.518	2.012	1.00152.45	C
ATOM	4037	C	SER	A	518	3.276	-1.747	3.133	1.00157.32	C
ATOM	4038	O	SER	A	518	2.605	-1.293	4.057	1.00158.78	O
ATOM	4039	CB	SER	A	518	2.354	-3.951	2.475	1.00144.47	C
ATOM	4040	OG	SER	A	518	1.798	-3.979	3.781	1.00144.56	O
ATOM	4041	N	PHE	A	519	4.592	-1.580	3.021	1.00113.81	N
ATOM	4042	CA	PHE	A	519	5.412	-1.042	4.097	1.00114.12	C
ATOM	4043	C	PHE	A	519	5.348	0.469	4.148	1.00125.83	C
ATOM	4044	O	PHE	A	519	5.693	1.073	5.151	1.00127.85	O
ATOM	4045	CB	PHE	A	519	6.855	-1.513	3.937	1.00161.76	C
ATOM	4046	CG	PHE	A	519	7.086	-2.918	4.403	1.00152.77	C
ATOM	4047	CD1	PHE	A	519	8.110	-3.678	3.868	1.00145.77	C
ATOM	4048	CD2	PHE	A	519	6.285	-3.476	5.384	1.00153.55	C
ATOM	4049	CE1	PHE	A	519	8.332	-4.965	4.297	1.00140.14	C
ATOM	4050	CE2	PHE	A	519	6.500	-4.769	5.819	1.00147.68	C
ATOM	4051	CZ	PHE	A	519	7.525	-5.512	5.274	1.00141.23	C
ATOM	4052	N	LYS	A	520	4.903	1.077	3.056	1.00147.12	N
ATOM	4053	CA	LYS	A	520	4.660	2.511	3.034	1.00161.34	C
ATOM	4054	C	LYS	A	520	3.177	2.808	2.924	1.00151.31	C
ATOM	4055	O	LYS	A	520	2.627	3.516	3.763	1.00149.99	O
ATOM	4056	CB	LYS	A	520	5.426	3.176	1.889	1.00168.70	C
ATOM	4057	CG	LYS	A	520	6.922	2.969	1.973	1.00171.69	C
ATOM	4058	CD	LYS	A	520	7.722	4.086	1.309	1.00189.45	C
ATOM	4059	CE	LYS	A	520	9.208	3.956	1.665	1.00186.14	C
ATOM	4060	NZ	LYS	A	520	10.065	5.005	1.047	1.00203.61	N1+
ATOM	4061	N	GLU	A	521	2.527	2.248	1.900	1.00165.27	N
ATOM	4062	CA	GLU	A	521	1.113	2.584	1.667	1.00158.60	C
ATOM	4063	C	GLU	A	521	0.121	1.835	2.577	1.00141.66	C
ATOM	4064	O	GLU	A	521	-1.076	2.101	2.554	1.00135.75	O
ATOM	4065	CB	GLU	A	521	0.776	2.488	0.175	1.00182.32	C
ATOM	4066	CG	GLU	A	521	1.531	3.536	-0.647	1.00201.21	C
ATOM	4067	CD	GLU	A	521	1.249	3.459	-2.135	1.00208.50	C
ATOM	4068	OE1	GLU	A	521	0.303	2.750	-2.530	1.00199.19	O
ATOM	4069	OE2	GLU	A	521	1.978	4.110	-2.909	1.00224.80	O1-
ATOM	4070	N	ASN	A	522	0.646	0.930	3.400	1.00171.10	N
ATOM	4071	CA	ASN	A	522	-0.133	0.263	4.441	1.00156.33	C
ATOM	4072	C	ASN	A	522	-1.376	-0.469	3.975	1.00143.84	C
ATOM	4073	O	ASN	A	522	-2.465	-0.248	4.509	1.00136.17	O
ATOM	4074	CB	ASN	A	522	-0.512	1.251	5.534	1.00155.64	C
ATOM	4075	CG	ASN	A	522	0.525	1.326	6.613	1.00161.45	C
ATOM	4076	ND2	ASN	A	522	0.952	2.536	6.936	1.00173.18	N
ATOM	4077	OD1	ASN	A	522	0.953	0.303	7.149	1.00156.75	O
ATOM	4078	N	TYR	A	523	-1.205	-1.349	2.992	1.00172.90	N
ATOM	4079	CA	TYR	A	523	-2.310	-2.143	2.470	1.00160.45	C
ATOM	4080	C	TYR	A	523	-2.838	-3.052	3.572	1.00141.59	C
ATOM	4081	O	TYR	A	523	-2.072	-3.785	4.193	1.00137.25	O
ATOM	4082	CB	TYR	A	523	-1.865	-2.980	1.262	1.00 81.14	C

ATOM	4083	CG	TYR	A	523	-1.296	-2.188	0.093	1.00	99.45	C
ATOM	4084	CD1	TYR	A	523	-0.026	-2.462	-0.407	1.00	109.35	C
ATOM	4085	CD2	TYR	A	523	-2.035	-1.177	-0.516	1.00	110.28	C
ATOM	4086	CE1	TYR	A	523	0.487	-1.750	-1.472	1.00	129.61	C
ATOM	4087	CE2	TYR	A	523	-1.524	-0.461	-1.576	1.00	131.10	C
ATOM	4088	CZ	TYR	A	523	-0.267	-0.751	-2.047	1.00	140.53	C
ATOM	4089	OH	TYR	A	523	0.233	-0.038	-3.107	1.00	162.59	O
ATOM	4090	N	PRO	A	524	-4.150	-2.992	3.832	1.00	160.87	N
ATOM	4091	CA	PRO	A	524	-4.750	-3.895	4.814	1.00	143.73	C
ATOM	4092	C	PRO	A	524	-4.887	-5.274	4.175	1.00	132.24	C
ATOM	4093	O	PRO	A	524	-4.915	-6.305	4.853	1.00	119.81	O
ATOM	4094	CB	PRO	A	524	-6.124	-3.271	5.048	1.00	109.06	C
ATOM	4095	CG	PRO	A	524	-6.459	-2.645	3.737	1.00	119.25	C
ATOM	4096	CD	PRO	A	524	-5.156	-2.157	3.155	1.00	134.50	C
ATOM	4097	N	ASP	A	525	-4.952	-5.273	2.847	1.00	140.49	N
ATOM	4098	CA	ASP	A	525	-5.085	-6.491	2.068	1.00	132.51	C
ATOM	4099	C	ASP	A	525	-4.256	-6.318	0.802	1.00	146.32	C
ATOM	4100	O	ASP	A	525	-4.666	-5.629	-0.127	1.00	155.66	O
ATOM	4101	CB	ASP	A	525	-6.559	-6.726	1.733	1.00	186.15	C
ATOM	4102	CG	ASP	A	525	-6.879	-8.183	1.502	1.00	176.43	C
ATOM	4103	OD1	ASP	A	525	-6.144	-8.818	0.724	1.00	182.24	O
ATOM	4104	OD2	ASP	A	525	-7.856	-8.693	2.098	1.00	164.25	O1-
ATOM	4105	N	VAL	A	526	-3.072	-6.924	0.796	1.00	125.00	N
ATOM	4106	CA	VAL	A	526	-2.108	-6.792	-0.296	1.00	139.87	C
ATOM	4107	C	VAL	A	526	-2.655	-7.271	-1.639	1.00	143.30	C
ATOM	4108	O	VAL	A	526	-2.626	-6.544	-2.647	1.00	159.97	O
ATOM	4109	CB	VAL	A	526	-0.841	-7.597	0.015	1.00	86.72	C
ATOM	4110	CG1	VAL	A	526	0.076	-7.625	-1.177	1.00	96.37	C
ATOM	4111	CG2	VAL	A	526	-0.135	-7.032	1.218	1.00	85.23	C
ATOM	4112	N	LEU	A	527	-3.135	-8.510	-1.654	1.00	104.88	N
ATOM	4113	CA	LEU	A	527	-3.789	-9.062	-2.834	1.00	108.99	C
ATOM	4114	C	LEU	A	527	-4.833	-8.099	-3.427	1.00	119.83	C
ATOM	4115	O	LEU	A	527	-4.766	-7.760	-4.615	1.00	137.11	O
ATOM	4116	CB	LEU	A	527	-4.440	-10.395	-2.491	1.00	95.87	C
ATOM	4117	CG	LEU	A	527	-4.794	-11.218	-3.719	1.00	100.51	C
ATOM	4118	CD1	LEU	A	527	-3.581	-11.985	-4.211	1.00	98.07	C
ATOM	4119	CD2	LEU	A	527	-5.884	-12.162	-3.351	1.00	86.05	C
ATOM	4120	N	LYS	A	528	-5.791	-7.670	-2.596	1.00	76.30	N
ATOM	4121	CA	LYS	A	528	-6.767	-6.644	-2.979	1.00	85.58	C
ATOM	4122	C	LYS	A	528	-6.072	-5.405	-3.568	1.00	105.85	C
ATOM	4123	O	LYS	A	528	-6.562	-4.806	-4.513	1.00	120.59	O
ATOM	4124	CB	LYS	A	528	-7.687	-6.265	-1.803	1.00	203.92	C
ATOM	4125	CG	LYS	A	528	-9.067	-5.754	-2.230	1.00	194.37	C
ATOM	4126	CD	LYS	A	528	-9.775	-4.988	-1.118	1.00	185.36	C
ATOM	4127	CE	LYS	A	528	-10.982	-4.193	-1.654	1.00	161.62	C
ATOM	4128	NZ	LYS	A	528	-11.516	-3.128	-0.716	1.00	152.76	N1+
ATOM	4129	N	ALA	A	529	-4.919	-5.034	-3.021	1.00	98.65	N
ATOM	4130	CA	ALA	A	529	-4.128	-3.922	-3.557	1.00	118.12	C
ATOM	4131	C	ALA	A	529	-3.758	-4.177	-5.003	1.00	136.06	C
ATOM	4132	O	ALA	A	529	-4.038	-3.364	-5.890	1.00	154.09	O
ATOM	4133	CB	ALA	A	529	-2.870	-3.728	-2.738	1.00	110.23	C
ATOM	4134	N	MET	A	530	-3.112	-5.312	-5.232	1.00	95.34	N
ATOM	4135	CA	MET	A	530	-2.732	-5.680	-6.586	1.00	113.66	C
ATOM	4136	C	MET	A	530	-3.941	-5.604	-7.492	1.00	119.20	C
ATOM	4137	O	MET	A	530	-3.893	-4.964	-8.537	1.00	139.26	O
ATOM	4138	CB	MET	A	530	-2.151	-7.080	-6.603	1.00	148.49	C
ATOM	4139	CG	MET	A	530	-1.064	-7.247	-5.589	1.00	128.14	C
ATOM	4140	SD	MET	A	530	-0.428	-8.916	-5.527	1.00	112.19	S
ATOM	4141	CE	MET	A	530	0.046	-9.114	-7.226	1.00	117.57	C
ATOM	4142	N	VAL	A	531	-5.030	-6.242	-7.072	1.00	97.90	N
ATOM	4143	CA	VAL	A	531	-6.271	-6.258	-7.855	1.00	104.22	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4144	C	VAL	A	531	-6.755	-4.858	-8.252	1.00122.46	C
ATOM	4145	O	VAL	A	531	-6.889	-4.564	-9.439	1.00143.52	O
ATOM	4146	CB	VAL	A	531	-7.411	-7.001	-7.117	1.00115.24	C
ATOM	4147	CG1	VAL	A	531	-8.754	-6.764	-7.813	1.00111.76	C
ATOM	4148	CG2	VAL	A	531	-7.101	-8.488	-7.001	1.00 88.46	C
ATOM	4149	N	LYS	A	532	-7.021	-4.004	-7.261	1.00141.42	N
ATOM	4150	CA	LYS	A	532	-7.457	-2.627	-7.513	1.00158.53	C
ATOM	4151	C	LYS	A	532	-6.422	-1.857	-8.327	1.00183.06	C
ATOM	4152	O	LYS	A	532	-6.731	-0.817	-8.912	1.00202.73	O
ATOM	4153	CB	LYS	A	532	-7.735	-1.880	-6.201	1.00232.12	C
ATOM	4154	CG	LYS	A	532	-9.149	-2.038	-5.655	1.00216.91	C
ATOM	4155	CD	LYS	A	532	-9.346	-1.228	-4.375	1.00210.02	C
ATOM	4156	CE	LYS	A	532	-10.719	-1.487	-3.754	1.00193.96	C
ATOM	4157	NZ	LYS	A	532	-10.892	-0.826	-2.424	1.00186.10	N1+
ATOM	4158	N	ASP	A	533	-5.192	-2.367	-8.359	1.00124.61	N
ATOM	4159	CA	ASP	A	533	-4.127	-1.723	-9.124	1.00148.50	C
ATOM	4160	C	ASP	A	533	-3.905	-2.357	-10.495	1.00165.43	C
ATOM	4161	O	ASP	A	533	-3.003	-1.951	-11.225	1.00188.84	O
ATOM	4162	CB	ASP	A	533	-2.824	-1.698	-8.324	1.00188.75	C
ATOM	4163	CG	ASP	A	533	-2.927	-0.845	-7.077	1.00174.73	C
ATOM	4164	OD1	ASP	A	533	-3.709	0.126	-7.078	1.00175.94	O
ATOM	4165	OD2	ASP	A	533	-2.230	-1.145	-6.090	1.00163.87	O1-
ATOM	4166	N	TYR	A	534	-4.723	-3.348	-10.842	1.00130.26	N
ATOM	4167	CA	TYR	A	534	-4.744	-3.890	-12.204	1.00141.51	C
ATOM	4168	C	TYR	A	534	-6.141	-3.910	-12.836	1.00146.74	C
ATOM	4169	O	TYR	A	534	-6.407	-4.676	-13.759	1.00149.73	O
ATOM	4170	CB	TYR	A	534	-4.101	-5.275	-12.266	1.00135.07	C
ATOM	4171	CG	TYR	A	534	-2.596	-5.223	-12.230	1.00136.35	C
ATOM	4172	CD1	TYR	A	534	-1.929	-5.126	-11.031	1.00127.85	C
ATOM	4173	CD2	TYR	A	534	-1.842	-5.252	-13.389	1.00143.36	C
ATOM	4174	CE1	TYR	A	534	-0.549	-5.072	-10.978	1.00126.72	C
ATOM	4175	CE2	TYR	A	534	-0.455	-5.196	-13.341	1.00133.99	C
ATOM	4176	CZ	TYR	A	534	0.183	-5.106	-12.125	1.00126.35	C
ATOM	4177	OH	TYR	A	534	1.554	-5.043	-12.029	1.00118.62	O
ATOM	4178	N	ASN	A	535	-7.023	-3.053	-12.339	1.00170.72	N
ATOM	4179	CA	ASN	A	535	-8.345	-2.898	-12.919	1.00178.60	C
ATOM	4180	C	ASN	A	535	-8.958	-4.227	-13.326	1.00166.49	C
ATOM	4181	O	ASN	A	535	-9.440	-4.371	-14.450	1.00180.99	O
ATOM	4182	CB	ASN	A	535	-8.284	-1.938	-14.107	1.00189.16	C
ATOM	4183	CG	ASN	A	535	-7.889	-0.530	-13.691	1.00200.80	C
ATOM	4184	ND2	ASN	A	535	-6.858	0.015	-14.329	1.00214.62	N
ATOM	4185	OD1	ASN	A	535	-8.493	0.051	-12.792	1.00196.27	O
ATOM	4186	N	GLN	A	536	-8.907	-5.195	-12.407	1.00185.02	N
ATOM	4187	CA	GLN	A	536	-9.624	-6.470	-12.528	1.00168.96	C
ATOM	4188	C	GLN	A	536	-10.828	-6.477	-11.563	1.00151.34	C
ATOM	4189	O	GLN	A	536	-10.709	-6.046	-10.417	1.00134.88	O
ATOM	4190	CB	GLN	A	536	-8.686	-7.653	-12.236	1.00143.08	C
ATOM	4191	CG	GLN	A	536	-7.572	-7.870	-13.251	1.00153.25	C
ATOM	4192	CD	GLN	A	536	-8.080	-8.447	-14.553	1.00158.00	C
ATOM	4193	NE2	GLN	A	536	-7.165	-8.748	-15.460	1.00162.59	N
ATOM	4194	OE1	GLN	A	536	-9.282	-8.623	-14.741	1.00159.14	O
ATOM	4195	N	THR	A	537	-11.979	-6.962	-12.029	1.00181.32	N
ATOM	4196	CA	THR	A	537	-13.229	-6.891	-11.256	1.00167.59	C
ATOM	4197	C	THR	A	537	-13.308	-7.896	-10.096	1.00138.99	C
ATOM	4198	O	THR	A	537	-13.999	-7.664	-9.106	1.00121.75	O
ATOM	4199	CB	THR	A	537	-14.475	-7.091	-12.159	1.00151.17	C
ATOM	4200	CG2	THR	A	537	-15.715	-6.463	-11.529	1.00136.62	C
ATOM	4201	OG1	THR	A	537	-14.245	-6.515	-13.450	1.00173.97	O
ATOM	4202	N	SER	A	538	-12.624	-9.026	-10.237	1.00186.41	N
ATOM	4203	CA	SER	A	538	-12.535	-10.010	-9.158	1.00160.73	C
ATOM	4204	C	SER	A	538	-11.095	-10.487	-8.954	1.00150.71	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4205	O	SER	A	538	-10.143	-9.845	-9.389	1.00160.76	O
ATOM	4206	CB	SER	A	538	-13.500	-11.192	-9.379	1.00209.89	C
ATOM	4207	OG	SER	A	538	-13.491	-11.661	-10.718	1.00216.86	O
ATOM	4208	N	ALA	A	539	-10.933	-11.611	-8.282	1.00134.00	N
ATOM	4209	CA	ALA	A	539	-9.599	-12.061	-7.958	1.00124.54	C
ATOM	4210	C	ALA	A	539	-9.205	-13.296	-8.767	1.00120.00	C
ATOM	4211	O	ALA	A	539	-8.018	-13.580	-8.930	1.00119.33	O
ATOM	4212	CB	ALA	A	539	-9.497	-12.315	-6.490	1.00 64.04	C
ATOM	4213	N	LYS	A	540	-10.201	-14.022	-9.275	1.00141.27	N
ATOM	4214	CA	LYS	A	540	-9.950	-15.141	-10.181	1.00139.09	C
ATOM	4215	C	LYS	A	540	-9.613	-14.621	-11.577	1.00159.12	C
ATOM	4216	O	LYS	A	540	-8.954	-15.306	-12.363	1.00160.16	O
ATOM	4217	CB	LYS	A	540	-11.149	-16.086	-10.241	1.00271.41	C
ATOM	4218	CG	LYS	A	540	-11.284	-16.974	-9.023	1.00251.04	C
ATOM	4219	CD	LYS	A	540	-12.245	-18.119	-9.284	1.00242.77	C
ATOM	4220	CE	LYS	A	540	-12.179	-19.161	-8.175	1.00223.91	C
ATOM	4221	NZ	LYS	A	540	-12.946	-20.397	-8.513	1.00221.67	N1+
ATOM	4222	N	ASP	A	541	-10.065	-13.405	-11.879	1.00123.48	N
ATOM	4223	CA	ASP	A	541	-9.761	-12.785	-13.163	1.00145.38	C
ATOM	4224	C	ASP	A	541	-8.343	-12.238	-13.107	1.00147.70	C
ATOM	4225	O	ASP	A	541	-7.638	-12.231	-14.113	1.00159.94	O
ATOM	4226	CB	ASP	A	541	-10.774	-11.683	-13.528	1.00189.44	C
ATOM	4227	CG	ASP	A	541	-11.755	-12.111	-14.632	1.00199.89	C
ATOM	4228	OD1	ASP	A	541	-11.484	-13.113	-15.335	1.00191.26	O
ATOM	4229	OD2	ASP	A	541	-12.794	-11.432	-14.804	1.00210.06	O1-
ATOM	4230	N	PHE	A	542	-7.923	-11.797	-11.925	1.00126.97	N
ATOM	4231	CA	PHE	A	542	-6.539	-11.365	-11.717	1.00129.43	C
ATOM	4232	C	PHE	A	542	-5.569	-12.546	-11.784	1.00113.70	C
ATOM	4233	O	PHE	A	542	-4.540	-12.501	-12.462	1.00121.14	O
ATOM	4234	CB	PHE	A	542	-6.389	-10.646	-10.368	1.00125.20	C
ATOM	4235	CG	PHE	A	542	-4.961	-10.266	-10.030	1.00125.20	C
ATOM	4236	CD1	PHE	A	542	-4.637	-8.961	-9.692	1.00133.28	C
ATOM	4237	CD2	PHE	A	542	-3.947	-11.214	-10.040	1.00116.64	C
ATOM	4238	CE1	PHE	A	542	-3.335	-8.612	-9.386	1.00132.79	C
ATOM	4239	CE2	PHE	A	542	-2.646	-10.865	-9.737	1.00116.26	C
ATOM	4240	CZ	PHE	A	542	-2.343	-9.566	-9.410	1.00124.26	C
ATOM	4241	N	LEU	A	543	-5.903	-13.599	-11.059	1.00140.19	N
ATOM	4242	CA	LEU	A	543	-5.018	-14.733	-10.936	1.00124.65	C
ATOM	4243	C	LEU	A	543	-5.008	-15.630	-12.177	1.00131.78	C
ATOM	4244	O	LEU	A	543	-3.979	-16.224	-12.497	1.00130.28	O
ATOM	4245	CB	LEU	A	543	-5.385	-15.527	-9.693	1.00104.87	C
ATOM	4246	CG	LEU	A	543	-5.224	-14.725	-8.408	1.00 98.80	C
ATOM	4247	CD1	LEU	A	543	-6.050	-15.323	-7.289	1.00 83.41	C
ATOM	4248	CD2	LEU	A	543	-3.755	-14.648	-8.029	1.00 95.04	C
ATOM	4249	N	GLU	A	544	-6.134	-15.747	-12.876	1.00137.89	N
ATOM	4250	CA	GLU	A	544	-6.135	-16.524	-14.111	1.00148.95	C
ATOM	4251	C	GLU	A	544	-5.395	-15.716	-15.161	1.00170.95	C
ATOM	4252	O	GLU	A	544	-5.381	-16.066	-16.337	1.00185.31	O
ATOM	4253	CB	GLU	A	544	-7.556	-16.848	-14.568	1.00194.79	C
ATOM	4254	CG	GLU	A	544	-8.070	-18.188	-14.071	1.00174.06	C
ATOM	4255	CD	GLU	A	544	-9.537	-18.405	-14.394	1.00179.80	C
ATOM	4256	OE1	GLU	A	544	-10.262	-17.399	-14.572	1.00194.93	O
ATOM	4257	OE2	GLU	A	544	-9.964	-19.578	-14.472	1.00170.53	O1-
ATOM	4258	N	SER	A	545	-4.764	-14.639	-14.699	1.00123.56	N
ATOM	4259	CA	SER	A	545	-4.138	-13.641	-15.561	1.00141.81	C
ATOM	4260	C	SER	A	545	-2.632	-13.488	-15.327	1.00130.56	C
ATOM	4261	O	SER	A	545	-1.981	-12.657	-15.953	1.00141.98	O
ATOM	4262	CB	SER	A	545	-4.819	-12.289	-15.357	1.00109.97	C
ATOM	4263	OG	SER	A	545	-4.422	-11.373	-16.350	1.00129.32	O
ATOM	4264	N	LEU	A	546	-2.088	-14.275	-14.405	1.00154.49	N
ATOM	4265	CA	LEU	A	546	-0.647	-14.335	-14.195	1.00145.19	C

ATOM	4266	C	LEU	A	546	-0.120	-15.480	-15.032	1.00139.58	C
ATOM	4267	O	LEU	A	546	1.029	-15.879	-14.894	1.00132.62	O
ATOM	4268	CB	LEU	A	546	-0.311	-14.585	-12.722	1.00101.75	C
ATOM	4269	CG	LEU	A	546	-0.952	-13.637	-11.709	1.00108.21	C
ATOM	4270	CD1	LEU	A	546	-0.434	-13.912	-10.320	1.00 88.36	C
ATOM	4271	CD2	LEU	A	546	-0.672	-12.214	-12.100	1.00125.32	C
ATOM	4272	N	ASN	A	547	-0.982	-16.011	-15.895	1.00191.80	N
ATOM	4273	CA	ASN	A	547	-0.622	-17.112	-16.773	1.00190.57	C
ATOM	4274	C	ASN	A	547	0.174	-16.639	-17.978	1.00202.30	C
ATOM	4275	O	ASN	A	547	1.264	-17.140	-18.249	1.00197.62	O
ATOM	4276	CB	ASN	A	547	-1.874	-17.850	-17.250	1.00200.54	C
ATOM	4277	CG	ASN	A	547	-2.038	-19.204	-16.594	1.00180.93	C
ATOM	4278	ND2	ASN	A	547	-2.833	-19.253	-15.531	1.00180.57	N
ATOM	4279	OD1	ASN	A	547	-1.462	-20.196	-17.039	1.00172.34	O
ATOM	4280	N	ASP	A	548	-0.372	-15.661	-18.692	1.00148.42	N
ATOM	4281	CA	ASP	A	548	0.179	-15.262	-19.988	1.00163.30	C
ATOM	4282	C	ASP	A	548	1.573	-14.616	-19.889	1.00161.71	C
ATOM	4283	O	ASP	A	548	1.694	-13.413	-19.674	1.00166.70	O
ATOM	4284	CB	ASP	A	548	-0.826	-14.389	-20.770	1.00191.00	C
ATOM	4285	CG	ASP	A	548	-2.097	-15.165	-21.190	1.00196.26	C
ATOM	4286	OD1	ASP	A	548	-1.987	-16.323	-21.650	1.00184.07	O
ATOM	4287	OD2	ASP	A	548	-3.216	-14.622	-21.061	1.00199.87	O1-
ATOM	4288	N	LYS	A	549	2.606	-15.450	-20.059	1.00156.10	N
ATOM	4289	CA	LYS	A	549	4.032	-15.087	-19.993	1.00154.23	C
ATOM	4290	C	LYS	A	549	4.406	-13.656	-20.414	1.00171.01	C
ATOM	4291	O	LYS	A	549	5.416	-13.113	-19.958	1.00170.04	O
ATOM	4292	CB	LYS	A	549	4.845	-16.087	-20.823	1.00170.45	C
ATOM	4293	CG	LYS	A	549	6.120	-16.588	-20.169	1.00155.39	C
ATOM	4294	CD	LYS	A	549	6.834	-17.577	-21.075	1.00161.79	C
ATOM	4295	CE	LYS	A	549	5.842	-18.568	-21.684	1.00150.42	C
ATOM	4296	NZ	LYS	A	549	6.412	-19.377	-22.816	1.00159.90	N1+
ATOM	4297	N	ASN	A	550	3.617	-13.069	-21.312	1.00181.89	N
ATOM	4298	CA	ASN	A	550	3.758	-11.656	-21.666	1.00201.55	C
ATOM	4299	C	ASN	A	550	2.860	-10.810	-20.768	1.00204.92	C
ATOM	4300	O	ASN	A	550	1.678	-10.603	-21.061	1.00218.07	O
ATOM	4301	CB	ASN	A	550	3.435	-11.410	-23.148	1.00169.05	C
ATOM	4302	CG	ASN	A	550	4.637	-11.642	-24.066	1.00173.32	C
ATOM	4303	ND2	ASN	A	550	4.375	-11.793	-25.367	1.00173.29	N
ATOM	4304	OD1	ASN	A	550	5.783	-11.671	-23.611	1.00169.72	O
ATOM	4305	N	PHE	A	551	3.437	-10.327	-19.670	1.00167.36	N
ATOM	4306	CA	PHE	A	551	2.668	-9.689	-18.609	1.00168.49	C
ATOM	4307	C	PHE	A	551	3.024	-8.212	-18.457	1.00187.10	C
ATOM	4308	O	PHE	A	551	4.200	-7.876	-18.286	1.00185.23	O
ATOM	4309	CB	PHE	A	551	2.918	-10.422	-17.287	1.00157.55	C
ATOM	4310	CG	PHE	A	551	1.988	-10.013	-16.179	1.00156.90	C
ATOM	4311	CD1	PHE	A	551	0.796	-10.681	-15.975	1.00153.53	C
ATOM	4312	CD2	PHE	A	551	2.309	-8.962	-15.338	1.00161.51	C
ATOM	4313	CE1	PHE	A	551	-0.059	-10.304	-14.962	1.00154.77	C
ATOM	4314	CE2	PHE	A	551	1.455	-8.578	-14.323	1.00162.97	C
ATOM	4315	CZ	PHE	A	551	0.271	-9.250	-14.137	1.00159.55	C
ATOM	4316	N	LYS	A	552	2.014	-7.337	-18.518	1.00165.53	N
ATOM	4317	CA	LYS	A	552	2.243	-5.901	-18.335	1.00187.03	C
ATOM	4318	C	LYS	A	552	2.899	-5.680	-16.984	1.00174.76	C
ATOM	4319	O	LYS	A	552	2.685	-6.446	-16.057	1.00155.90	O
ATOM	4320	CB	LYS	A	552	0.942	-5.086	-18.388	1.00155.23	C
ATOM	4321	CG	LYS	A	552	-0.302	-5.804	-18.903	1.00158.34	C
ATOM	4322	CD	LYS	A	552	-1.524	-4.885	-18.763	1.00186.48	C
ATOM	4323	CE	LYS	A	552	-2.773	-5.443	-19.436	1.00202.77	C
ATOM	4324	NZ	LYS	A	552	-3.906	-4.477	-19.366	1.00234.33	N1+
ATOM	4325	N	PHE	A	553	3.697	-4.634	-16.852	1.00211.03	N
ATOM	4326	CA	PHE	A	553	4.285	-4.369	-15.551	1.00203.11	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4327	C	PHE	A	553	4.276	-2.881	-15.192	1.00229.72	C
ATOM	4328	O	PHE	A	553	5.244	-2.154	-15.437	1.00244.00	O
ATOM	4329	CB	PHE	A	553	5.673	-5.012	-15.428	1.00201.10	C
ATOM	4330	CG	PHE	A	553	5.647	-6.416	-14.852	1.00164.03	C
ATOM	4331	CD1	PHE	A	553	6.071	-7.504	-15.599	1.00161.41	C
ATOM	4332	CD2	PHE	A	553	5.191	-6.642	-13.555	1.00150.65	C
ATOM	4333	CE1	PHE	A	553	6.049	-8.790	-15.054	1.00129.71	C
ATOM	4334	CE2	PHE	A	553	5.167	-7.922	-13.010	1.00126.86	C
ATOM	4335	CZ	PHE	A	553	5.595	-8.994	-13.758	1.00116.80	C
ATOM	4336	N	ASP	A	554	3.154	-2.451	-14.613	1.00176.91	N
ATOM	4337	CA	ASP	A	554	2.950	-1.071	-14.182	1.00204.05	C
ATOM	4338	C	ASP	A	554	3.697	-0.786	-12.878	1.00197.85	C
ATOM	4339	O	ASP	A	554	3.869	0.371	-12.497	1.00221.27	O
ATOM	4340	CB	ASP	A	554	1.455	-0.774	-13.997	1.00193.04	C
ATOM	4341	CG	ASP	A	554	0.612	-1.181	-15.205	1.00200.63	C
ATOM	4342	OD1	ASP	A	554	-0.623	-1.319	-15.056	1.00203.70	O
ATOM	4343	OD2	ASP	A	554	1.179	-1.369	-16.303	1.00204.85	O1-
ATOM	4344	N	THR	A	555	4.135	-1.846	-12.202	1.00192.97	N
ATOM	4345	CA	THR	A	555	4.867	-1.734	-10.934	1.00184.54	C
ATOM	4346	C	THR	A	555	6.351	-2.120	-11.079	1.00173.78	C
ATOM	4347	O	THR	A	555	6.682	-3.160	-11.636	1.00159.71	O
ATOM	4348	CB	THR	A	555	4.170	-2.555	-9.814	1.00177.83	C
ATOM	4349	CG2	THR	A	555	2.854	-1.895	-9.418	1.00189.88	C
ATOM	4350	OG1	THR	A	555	3.893	-3.886	-10.275	1.00154.67	O
ATOM	4351	N	ASN	A	556	7.244	-1.275	-10.579	1.00177.05	N
ATOM	4352	CA	ASN	A	556	8.664	-1.401	-10.911	1.00175.22	C
ATOM	4353	C	ASN	A	556	9.431	-2.497	-10.164	1.00147.73	C
ATOM	4354	O	ASN	A	556	9.005	-2.946	-9.090	1.00131.54	O
ATOM	4355	CB	ASN	A	556	9.380	-0.052	-10.750	1.00180.55	C
ATOM	4356	CG	ASN	A	556	9.027	0.937	-11.850	1.00209.48	C
ATOM	4357	ND2	ASN	A	556	9.036	2.224	-11.516	1.00227.96	N
ATOM	4358	OD1	ASN	A	556	8.755	0.549	-12.986	1.00206.28	O
ATOM	4359	N	LYS	A	557	10.565	-2.898	-10.756	1.00181.25	N
ATOM	4360	CA	LYS	A	557	11.493	-3.900	-10.209	1.00160.36	C
ATOM	4361	C	LYS	A	557	12.534	-3.244	-9.309	1.00167.49	C
ATOM	4362	O	LYS	A	557	13.347	-2.450	-9.783	1.00188.10	O
ATOM	4363	CB	LYS	A	557	12.205	-4.652	-11.345	1.00216.56	C
ATOM	4364	CG	LYS	A	557	11.302	-5.574	-12.166	1.00202.45	C
ATOM	4365	CD	LYS	A	557	11.608	-5.535	-13.676	1.00212.25	C
ATOM	4366	CE	LYS	A	557	12.867	-6.314	-14.052	1.00211.65	C
ATOM	4367	NZ	LYS	A	557	13.064	-6.389	-15.532	1.00221.46	N1+
ATOM	4368	N	THR	A	558	12.514	-3.591	-8.020	1.00139.28	N
ATOM	4369	CA	THR	A	558	13.317	-2.898	-6.998	1.00146.11	C
ATOM	4370	C	THR	A	558	14.477	-3.729	-6.402	1.00131.97	C
ATOM	4371	O	THR	A	558	15.450	-3.178	-5.869	1.00142.88	O
ATOM	4372	CB	THR	A	558	12.416	-2.384	-5.845	1.00137.67	C
ATOM	4373	CG2	THR	A	558	11.269	-1.549	-6.384	1.00153.28	C
ATOM	4374	OG1	THR	A	558	11.872	-3.498	-5.129	1.00112.70	O
ATOM	4375	N	ARG	A	559	14.363	-5.049	-6.509	1.00155.54	N
ATOM	4376	CA	ARG	A	559	15.319	-5.981	-5.920	1.00141.44	C
ATOM	4377	C	ARG	A	559	15.119	-7.358	-6.567	1.00123.52	C
ATOM	4378	O	ARG	A	559	14.045	-7.635	-7.103	1.00116.22	O
ATOM	4379	CB	ARG	A	559	15.080	-6.063	-4.411	1.00140.27	C
ATOM	4380	CG	ARG	A	559	13.586	-6.106	-4.025	1.00129.84	C
ATOM	4381	CD	ARG	A	559	13.355	-6.159	-2.520	1.00123.80	C
ATOM	4382	NE	ARG	A	559	13.837	-4.966	-1.824	1.00141.26	N
ATOM	4383	CZ	ARG	A	559	13.207	-3.793	-1.814	1.00156.16	C
ATOM	4384	NH1	ARG	A	559	12.070	-3.643	-2.476	1.00158.87	N1+
ATOM	4385	NH2	ARG	A	559	13.720	-2.764	-1.151	1.00168.14	N
ATOM	4386	N	ASP	A	560	16.134	-8.219	-6.529	1.00147.05	N
ATOM	4387	CA	ASP	A	560	16.006	-9.552	-7.128	1.00132.38	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4388	C	ASP	A	560	15.265	-10.545	-6.217	1.00112.06	C
ATOM	4389	O	ASP	A	560	15.437	-10.533	-5.000	1.00108.41	O
ATOM	4390	CB	ASP	A	560	17.373	-10.093	-7.554	1.00148.07	C
ATOM	4391	CG	ASP	A	560	17.740	-9.692	-8.977	1.00165.36	C
ATOM	4392	OD1	ASP	A	560	16.820	-9.384	-9.770	1.00168.86	O
ATOM	4393	OD2	ASP	A	560	18.945	-9.691	-9.309	1.00177.16	O1-
ATOM	4394	N	VAL	A	561	14.432	-11.399	-6.807	1.00144.91	N
ATOM	4395	CA	VAL	A	561	13.600	-12.325	-6.042	1.00126.15	C
ATOM	4396	C	VAL	A	561	14.075	-13.754	-6.228	1.00116.94	C
ATOM	4397	O	VAL	A	561	14.413	-14.141	-7.333	1.00121.60	O
ATOM	4398	CB	VAL	A	561	12.142	-12.266	-6.528	1.00 99.93	C
ATOM	4399	CG1	VAL	A	561	11.279	-13.223	-5.743	1.00 82.02	C
ATOM	4400	CG2	VAL	A	561	11.604	-10.858	-6.431	1.00107.04	C
ATOM	4401	N	TYR	A	562	14.087	-14.550	-5.166	1.00139.50	N
ATOM	4402	CA	TYR	A	562	14.454	-15.959	-5.302	1.00129.85	C
ATOM	4403	C	TYR	A	562	13.290	-16.900	-4.982	1.00116.39	C
ATOM	4404	O	TYR	A	562	12.181	-16.466	-4.692	1.00112.36	O
ATOM	4405	CB	TYR	A	562	15.647	-16.302	-4.410	1.00 98.70	C
ATOM	4406	CG	TYR	A	562	16.910	-15.512	-4.686	1.00111.93	C
ATOM	4407	CD1	TYR	A	562	16.868	-14.135	-4.868	1.00122.35	C
ATOM	4408	CD2	TYR	A	562	18.155	-16.138	-4.737	1.00114.75	C
ATOM	4409	CE1	TYR	A	562	18.029	-13.404	-5.113	1.00136.01	C
ATOM	4410	CE2	TYR	A	562	19.317	-15.410	-4.981	1.00127.99	C
ATOM	4411	CZ	TYR	A	562	19.241	-14.044	-5.167	1.00138.75	C
ATOM	4412	OH	TYR	A	562	20.370	-13.303	-5.404	1.00154.10	O
ATOM	4413	N	ILE	A	563	13.551	-18.198	-5.052	1.00115.19	N
ATOM	4414	CA	ILE	A	563	12.603	-19.209	-4.613	1.00102.76	C
ATOM	4415	C	ILE	A	563	13.374	-20.426	-4.150	1.00 96.97	C
ATOM	4416	O	ILE	A	563	14.123	-21.030	-4.934	1.00100.90	O
ATOM	4417	CB	ILE	A	563	11.679	-19.666	-5.728	1.00 72.84	C
ATOM	4418	CG1	ILE	A	563	10.848	-18.512	-6.256	1.00 88.48	C
ATOM	4419	CG2	ILE	A	563	10.730	-20.716	-5.215	1.00 71.20	C
ATOM	4420	CD1	ILE	A	563	9.900	-18.944	-7.336	1.00 76.54	C
ATOM	4421	N	TYR	A	564	13.186	-20.767	-2.878	1.00104.72	N
ATOM	4422	CA	TYR	A	564	13.860	-21.882	-2.229	1.00101.86	C
ATOM	4423	C	TYR	A	564	12.952	-23.098	-2.248	1.00 99.74	C
ATOM	4424	O	TYR	A	564	11.818	-23.033	-1.767	1.00 94.74	O
ATOM	4425	CB	TYR	A	564	14.181	-21.489	-0.792	1.00110.25	C
ATOM	4426	CG	TYR	A	564	14.811	-22.561	0.078	1.00110.92	C
ATOM	4427	CD1	TYR	A	564	16.146	-22.934	-0.071	1.00117.08	C
ATOM	4428	CD2	TYR	A	564	14.086	-23.156	1.094	1.00106.27	C
ATOM	4429	CE1	TYR	A	564	16.723	-23.899	0.755	1.00118.70	C
ATOM	4430	CE2	TYR	A	564	14.653	-24.113	1.920	1.00108.00	C
ATOM	4431	CZ	TYR	A	564	15.963	-24.481	1.748	1.00114.30	C
ATOM	4432	OH	TYR	A	564	16.484	-25.438	2.584	1.00116.87	O
ATOM	4433	N	MET	A	565	13.439	-24.198	-2.818	1.00107.85	N
ATOM	4434	CA	MET	A	565	12.628	-25.409	-2.949	1.00107.22	C
ATOM	4435	C	MET	A	565	13.403	-26.657	-2.566	1.00111.50	C
ATOM	4436	O	MET	A	565	14.018	-27.289	-3.418	1.00117.88	O
ATOM	4437	CB	MET	A	565	12.087	-25.534	-4.371	1.00 95.46	C
ATOM	4438	CG	MET	A	565	11.151	-24.404	-4.738	1.00 93.44	C
ATOM	4439	SD	MET	A	565	10.771	-24.333	-6.488	1.00102.70	S
ATOM	4440	CE	MET	A	565	12.192	-25.201	-7.108	1.00111.47	C
ATOM	4441	N	PRO	A	566	13.363	-27.010	-1.277	1.00 99.88	N
ATOM	4442	CA	PRO	A	566	14.103	-28.041	-0.544	1.00104.24	C
ATOM	4443	C	PRO	A	566	13.323	-29.324	-0.461	1.00104.16	C
ATOM	4444	O	PRO	A	566	12.102	-29.267	-0.516	1.00 98.96	O
ATOM	4445	CB	PRO	A	566	14.149	-27.460	0.841	1.00 77.95	C
ATOM	4446	CG	PRO	A	566	12.804	-26.795	0.952	1.00 71.27	C
ATOM	4447	CD	PRO	A	566	12.496	-26.234	-0.385	1.00 71.95	C
ATOM	4448	N	TYR	A	567	13.990	-30.458	-0.304	1.00 98.25	N

ES 2 587 302 T3

ATOM	4449	CA	TYR	A	567	13.267	-31.709	-0.375	1.00100.41	C
ATOM	4450	C	TYR	A	567	12.312	-31.737	0.771	1.00 93.58	C
ATOM	4451	O	TYR	A	567	11.182	-32.161	0.630	1.00 91.98	O
ATOM	4452	CB	TYR	A	567	14.210	-32.893	-0.309	1.00 80.82	C
ATOM	4453	CG	TYR	A	567	13.563	-34.249	-0.076	1.00 95.35	C
ATOM	4454	CD1	TYR	A	567	13.330	-35.127	-1.118	1.00101.35	C
ATOM	4455	CD2	TYR	A	567	13.230	-34.670	1.194	1.00 93.61	C
ATOM	4456	CE1	TYR	A	567	12.770	-36.369	-0.897	1.00106.88	C
ATOM	4457	CE2	TYR	A	567	12.669	-35.917	1.420	1.00 96.33	C
ATOM	4458	CZ	TYR	A	567	12.446	-36.756	0.373	1.00106.09	C
ATOM	4459	OH	TYR	A	567	11.889	-37.986	0.612	1.00110.03	O
ATOM	4460	N	ARG	A	568	12.756	-31.245	1.911	1.00125.75	N
ATOM	4461	CA	ARG	A	568	11.945	-31.318	3.115	1.00119.46	C
ATOM	4462	C	ARG	A	568	10.492	-30.868	2.940	1.00113.44	C
ATOM	4463	O	ARG	A	568	9.599	-31.442	3.548	1.00111.42	O
ATOM	4464	CB	ARG	A	568	12.596	-30.527	4.236	1.00126.34	C
ATOM	4465	CG	ARG	A	568	11.742	-30.388	5.462	1.00118.64	C
ATOM	4466	CD	ARG	A	568	12.381	-29.360	6.314	1.00114.15	C
ATOM	4467	NE	ARG	A	568	13.805	-29.589	6.252	1.00119.14	N
ATOM	4468	CZ	ARG	A	568	14.479	-30.183	7.219	1.00116.75	C
ATOM	4469	NH1	ARG	A	568	13.835	-30.556	8.317	1.00107.37	N1+
ATOM	4470	NH2	ARG	A	568	15.786	-30.382	7.099	1.00121.68	N
ATOM	4471	N	MET	A	569	10.242	-29.853	2.121	1.00107.77	N
ATOM	4472	CA	MET	A	569	8.884	-29.345	1.973	1.00102.19	C
ATOM	4473	C	MET	A	569	7.937	-30.314	1.287	1.00104.57	C
ATOM	4474	O	MET	A	569	6.806	-29.945	0.999	1.00102.14	O
ATOM	4475	CB	MET	A	569	8.870	-28.034	1.190	1.00112.08	C
ATOM	4476	CG	MET	A	569	7.510	-27.346	1.191	1.00108.13	C
ATOM	4477	SD	MET	A	569	7.365	-25.929	0.092	1.00109.37	S
ATOM	4478	CE	MET	A	569	6.425	-26.602	-1.267	1.00112.14	C
ATOM	4479	N	LEU	A	570	8.372	-31.540	0.996	1.00 94.55	N
ATOM	4480	CA	LEU	A	570	7.483	-32.458	0.272	1.00 98.60	C
ATOM	4481	C	LEU	A	570	6.331	-32.931	1.133	1.00 96.29	C
ATOM	4482	O	LEU	A	570	5.209	-32.897	0.678	1.00 96.25	O
ATOM	4483	CB	LEU	A	570	8.225	-33.646	-0.371	1.00 96.95	C
ATOM	4484	CG	LEU	A	570	8.419	-33.713	-1.904	1.00113.60	C
ATOM	4485	CD1	LEU	A	570	8.968	-35.076	-2.320	1.00124.15	C
ATOM	4486	CD2	LEU	A	570	7.149	-33.404	-2.686	1.00112.34	C
ATOM	4487	N	ARG	A	571	6.591	-33.346	2.372	1.00123.35	N
ATOM	4488	CA	ARG	A	571	5.525	-33.913	3.210	1.00122.04	C
ATOM	4489	C	ARG	A	571	4.352	-32.949	3.406	1.00115.43	C
ATOM	4490	O	ARG	A	571	3.217	-33.366	3.652	1.00115.91	O
ATOM	4491	CB	ARG	A	571	6.078	-34.406	4.552	1.00186.11	C
ATOM	4492	CG	ARG	A	571	6.630	-33.326	5.426	1.00182.40	C
ATOM	4493	CD	ARG	A	571	7.162	-33.882	6.725	1.00196.35	C
ATOM	4494	NE	ARG	A	571	7.598	-32.784	7.577	1.00193.68	N
ATOM	4495	CZ	ARG	A	571	8.339	-32.918	8.670	1.00186.31	C
ATOM	4496	NH1	ARG	A	571	8.739	-34.120	9.056	1.00181.79	N1+
ATOM	4497	NH2	ARG	A	571	8.684	-31.846	9.377	1.00183.82	N
ATOM	4498	N	ILE	A	572	4.661	-31.667	3.224	1.00 87.95	N
ATOM	4499	CA	ILE	A	572	3.777	-30.514	3.421	1.00 81.95	C
ATOM	4500	C	ILE	A	572	3.097	-29.977	2.132	1.00 82.68	C
ATOM	4501	O	ILE	A	572	2.185	-29.162	2.197	1.00 79.49	O
ATOM	4502	CB	ILE	A	572	4.617	-29.372	4.030	1.00 94.19	C
ATOM	4503	CG1	ILE	A	572	5.269	-29.830	5.306	1.00 94.14	C
ATOM	4504	CG2	ILE	A	572	3.819	-28.141	4.309	1.00 90.22	C
ATOM	4505	CD1	ILE	A	572	6.027	-28.704	5.955	1.00 90.92	C
ATOM	4506	N	MET	A	573	3.535	-30.421	0.963	1.00121.94	N
ATOM	4507	CA	MET	A	573	2.938	-29.946	-0.281	1.00123.47	C
ATOM	4508	C	MET	A	573	1.392	-29.860	-0.277	1.00123.14	C
ATOM	4509	O	MET	A	573	0.843	-28.868	-0.756	1.00121.13	O

ATOM	4510	CB	MET	A	573	3.489	-30.740	-1.478	1.00140.07	C
ATOM	4511	CG	MET	A	573	4.604	-30.044	-2.228	1.00140.62	C
ATOM	4512	SD	MET	A	573	3.990	-28.632	-3.142	1.00149.79	S
ATOM	4513	CE	MET	A	573	2.695	-29.442	-4.052	1.00156.42	C
ATOM	4514	N	PRO	A	574	0.688	-30.867	0.282	1.00131.84	N
ATOM	4515	CA	PRO	A	574	-0.770	-30.754	0.358	1.00132.52	C
ATOM	4516	C	PRO	A	574	-1.190	-29.515	1.156	1.00125.62	C
ATOM	4517	O	PRO	A	574	-1.890	-28.595	0.670	1.00124.13	O
ATOM	4518	CB	PRO	A	574	-1.162	-32.002	1.150	1.00112.90	C
ATOM	4519	CG	PRO	A	574	-0.037	-32.929	0.990	1.00126.03	C
ATOM	4520	CD	PRO	A	574	1.154	-32.061	0.996	1.00122.94	C
ATOM	4521	N	VAL	A	575	-0.744	-29.505	2.409	1.00103.06	N
ATOM	4522	CA	VAL	A	575	-1.010	-28.429	3.359	1.00 97.34	C
ATOM	4523	C	VAL	A	575	-0.626	-27.047	2.835	1.00 94.45	C
ATOM	4524	O	VAL	A	575	-1.344	-26.076	3.047	1.00 92.53	O
ATOM	4525	CB	VAL	A	575	-0.293	-28.693	4.666	1.00 66.38	C
ATOM	4526	CG1	VAL	A	575	-0.817	-27.801	5.744	1.00 72.66	C
ATOM	4527	CG2	VAL	A	575	-0.479	-30.141	5.079	1.00 70.68	C
ATOM	4528	N	VAL	A	576	0.506	-26.951	2.157	1.00 82.47	N
ATOM	4529	CA	VAL	A	576	0.913	-25.698	1.552	1.00 81.20	C
ATOM	4530	C	VAL	A	576	0.003	-25.279	0.401	1.00 83.93	C
ATOM	4531	O	VAL	A	576	-0.357	-24.120	0.256	1.00 82.62	O
ATOM	4532	CB	VAL	A	576	2.346	-25.821	1.051	1.00 74.58	C
ATOM	4533	CG1	VAL	A	576	2.651	-24.692	0.079	1.00 74.96	C
ATOM	4534	CG2	VAL	A	576	3.289	-25.806	2.214	1.00 73.01	C
ATOM	4535	N	ALA	A	577	-0.354	-26.244	-0.430	1.00112.44	N
ATOM	4536	CA	ALA	A	577	-1.185	-25.947	-1.586	1.00116.71	C
ATOM	4537	C	ALA	A	577	-2.578	-25.498	-1.194	1.00116.67	C
ATOM	4538	O	ALA	A	577	-3.182	-24.681	-1.886	1.00118.20	O
ATOM	4539	CB	ALA	A	577	-1.257	-27.135	-2.488	1.00164.91	C
ATOM	4540	N	GLN	A	578	-3.097	-26.067	-0.101	1.00131.54	N
ATOM	4541	CA	GLN	A	578	-4.468	-25.735	0.318	1.00133.09	C
ATOM	4542	C	GLN	A	578	-4.726	-24.237	0.279	1.00131.43	C
ATOM	4543	O	GLN	A	578	-5.778	-23.806	-0.165	1.00135.12	O
ATOM	4544	CB	GLN	A	578	-4.758	-26.269	1.714	1.00149.23	C
ATOM	4545	CG	GLN	A	578	-5.115	-27.728	1.773	1.00161.02	C
ATOM	4546	CD	GLN	A	578	-5.237	-28.206	3.197	1.00158.55	C
ATOM	4547	NE2	GLN	A	578	-5.517	-29.491	3.378	1.00163.07	N
ATOM	4548	OE1	GLN	A	578	-5.075	-27.426	4.129	1.00153.24	O
ATOM	4549	N	PHE	A	579	-3.751	-23.449	0.723	1.00109.73	N
ATOM	4550	CA	PHE	A	579	-3.928	-22.007	0.899	1.00109.19	C
ATOM	4551	C	PHE	A	579	-4.226	-21.244	-0.380	1.00113.68	C
ATOM	4552	O	PHE	A	579	-5.057	-20.345	-0.366	1.00116.10	O
ATOM	4553	CB	PHE	A	579	-2.707	-21.388	1.573	1.00 88.96	C
ATOM	4554	CG	PHE	A	579	-2.612	-21.685	3.023	1.00 85.36	C
ATOM	4555	CD1	PHE	A	579	-2.063	-22.860	3.455	1.00 83.63	C
ATOM	4556	CD2	PHE	A	579	-3.074	-20.788	3.957	1.00 84.39	C
ATOM	4557	CE1	PHE	A	579	-1.990	-23.144	4.793	1.00 81.15	C
ATOM	4558	CE2	PHE	A	579	-2.997	-21.071	5.304	1.00 79.37	C
ATOM	4559	CZ	PHE	A	579	-2.460	-22.249	5.719	1.00 80.03	C
ATOM	4560	N	ALA	A	580	-3.528	-21.571	-1.466	1.00 86.54	N
ATOM	4561	CA	ALA	A	580	-3.809	-20.961	-2.758	1.00 92.13	C
ATOM	4562	C	ALA	A	580	-5.012	-21.667	-3.365	1.00 97.75	C
ATOM	4563	O	ALA	A	580	-5.767	-21.102	-4.161	1.00105.63	O
ATOM	4564	CB	ALA	A	580	-2.617	-21.073	-3.670	1.00 87.56	C
ATOM	4565	N	ASN	A	581	-5.203	-22.920	-2.990	1.00151.21	N
ATOM	4566	CA	ASN	A	581	-6.414	-23.616	-3.398	1.00158.29	C
ATOM	4567	C	ASN	A	581	-7.668	-22.891	-2.925	1.00160.11	C
ATOM	4568	O	ASN	A	581	-8.742	-23.052	-3.485	1.00167.26	O
ATOM	4569	CB	ASN	A	581	-6.420	-25.046	-2.871	1.00123.14	C
ATOM	4570	CG	ASN	A	581	-6.997	-26.014	-3.856	1.00131.65	C

ATOM	4571	ND2	ASN	A	581	-7.491	-27.139	-3.361	1.00137.39	N
ATOM	4572	OD1	ASN	A	581	-6.996	-25.761	-5.052	1.00134.62	O
ATOM	4573	N	THR	A	582	-7.522	-22.097	-1.878	1.00120.76	N
ATOM	4574	CA	THR	A	582	-8.650	-21.400	-1.290	1.00123.14	C
ATOM	4575	C	THR	A	582	-8.860	-20.049	-1.933	1.00127.93	C
ATOM	4576	O	THR	A	582	-8.157	-19.082	-1.607	1.00124.93	O
ATOM	4577	CB	THR	A	582	-8.420	-21.172	0.179	1.00121.51	C
ATOM	4578	CG2	THR	A	582	-9.283	-20.047	0.668	1.00121.57	C
ATOM	4579	OG1	THR	A	582	-8.762	-22.364	0.887	1.00120.32	O
ATOM	4580	N	ASN	A	583	-9.841	-19.979	-2.831	1.00113.37	N
ATOM	4581	CA	ASN	A	583	-10.043	-18.793	-3.670	1.00121.60	C
ATOM	4582	C	ASN	A	583	-10.352	-17.505	-2.901	1.00124.43	C
ATOM	4583	O	ASN	A	583	-11.435	-17.356	-2.329	1.00126.78	O
ATOM	4584	CB	ASN	A	583	-11.104	-19.066	-4.737	1.00171.59	C
ATOM	4585	CG	ASN	A	583	-11.952	-17.851	-5.041	1.00179.36	C
ATOM	4586	ND2	ASN	A	583	-11.366	-16.878	-5.728	1.00184.07	N
ATOM	4587	OD1	ASN	A	583	-13.124	-17.785	-4.656	1.00183.14	O
ATOM	4588	N	PRO	A	584	-9.391	-16.567	-2.893	1.00151.78	N
ATOM	4589	CA	PRO	A	584	-9.477	-15.339	-2.103	1.00149.55	C
ATOM	4590	C	PRO	A	584	-10.812	-14.624	-2.241	1.00153.83	C
ATOM	4591	O	PRO	A	584	-11.156	-13.816	-1.388	1.00149.06	O
ATOM	4592	CB	PRO	A	584	-8.351	-14.474	-2.679	1.00154.56	C
ATOM	4593	CG	PRO	A	584	-7.919	-15.154	-3.933	1.00158.23	C
ATOM	4594	CD	PRO	A	584	-8.170	-16.592	-3.708	1.00150.50	C
ATOM	4595	N	ASP	A	585	-11.554	-14.924	-3.297	1.00137.05	N
ATOM	4596	CA	ASP	A	585	-12.824	-14.252	-3.547	1.00144.32	C
ATOM	4597	C	ASP	A	585	-13.949	-14.790	-2.680	1.00141.98	C
ATOM	4598	O	ASP	A	585	-14.882	-14.062	-2.353	1.00143.39	O
ATOM	4599	CB	ASP	A	585	-13.225	-14.398	-5.018	1.00144.04	C
ATOM	4600	CG	ASP	A	585	-12.941	-13.156	-5.834	1.00149.48	C
ATOM	4601	OD1	ASP	A	585	-13.089	-12.038	-5.292	1.00146.40	O
ATOM	4602	OD2	ASP	A	585	-12.579	-13.303	-7.022	1.00153.81	O1-
ATOM	4603	N	ASN	A	586	-13.867	-16.067	-2.317	1.00156.37	N
ATOM	4604	CA	ASN	A	586	-15.017	-16.723	-1.714	1.00162.88	C
ATOM	4605	C	ASN	A	586	-14.789	-17.882	-0.748	1.00156.09	C
ATOM	4606	O	ASN	A	586	-15.677	-18.708	-0.581	1.00158.58	O
ATOM	4607	CB	ASN	A	586	-15.963	-17.180	-2.808	1.00180.06	C
ATOM	4608	CG	ASN	A	586	-17.370	-16.755	-2.536	1.00191.46	C
ATOM	4609	ND2	ASN	A	586	-18.293	-17.174	-3.394	1.00198.65	N
ATOM	4610	OD1	ASN	A	586	-17.632	-16.045	-1.561	1.00193.73	O
ATOM	4611	N	GLY	A	587	-13.625	-17.938	-0.107	1.00135.35	N
ATOM	4612	CA	GLY	A	587	-13.322	-18.990	0.856	1.00129.15	C
ATOM	4613	C	GLY	A	587	-13.200	-20.407	0.298	1.00127.45	C
ATOM	4614	O	GLY	A	587	-12.442	-21.232	0.831	1.00124.70	O
ATOM	4615	N	GLU	A	588	-13.942	-20.685	-0.777	1.00170.62	N
ATOM	4616	CA	GLU	A	588	-14.080	-22.038	-1.318	1.00171.44	C
ATOM	4617	C	GLU	A	588	-12.756	-22.630	-1.776	1.00163.98	C
ATOM	4618	O	GLU	A	588	-11.867	-21.909	-2.221	1.00160.30	O
ATOM	4619	CB	GLU	A	588	-15.104	-22.061	-2.458	1.00176.22	C
ATOM	4620	CG	GLU	A	588	-16.511	-21.598	-2.059	1.00184.25	C
ATOM	4621	CD	GLU	A	588	-17.194	-22.511	-1.028	1.00190.03	C
ATOM	4622	OE1	GLU	A	588	-16.550	-23.468	-0.552	1.00188.40	O
ATOM	4623	OE2	GLU	A	588	-18.381	-22.281	-0.699	1.00196.94	O1-
ATOM	4624	N	GLN	A	589	-12.619	-23.944	-1.642	1.00129.49	N
ATOM	4625	CA	GLN	A	589	-11.433	-24.612	-2.141	1.00124.47	C
ATOM	4626	C	GLN	A	589	-11.640	-24.880	-3.603	1.00132.89	C
ATOM	4627	O	GLN	A	589	-12.628	-25.494	-3.982	1.00143.72	O
ATOM	4628	CB	GLN	A	589	-11.168	-25.916	-1.406	1.00184.99	C
ATOM	4629	CG	GLN	A	589	-10.425	-25.714	-0.116	1.00175.57	C
ATOM	4630	CD	GLN	A	589	-9.617	-26.922	0.285	1.00172.63	C
ATOM	4631	NE2	GLN	A	589	-10.103	-27.649	1.284	1.00173.30	N

ATOM	4632	OE1	GLN	A	589	-8.560	-27.198	-0.288	1.00170.48	O
ATOM	4633	N	GLU	A	590	-10.725	-24.385	-4.425	1.00141.38	N
ATOM	4634	CA	GLU	A	590	-10.779	-24.602	-5.863	1.00147.37	C
ATOM	4635	C	GLU	A	590	-10.835	-26.104	-6.169	1.00151.32	C
ATOM	4636	O	GLU	A	590	-11.921	-26.674	-6.241	1.00161.96	O
ATOM	4637	CB	GLU	A	590	-9.583	-23.925	-6.566	1.00201.75	C
ATOM	4638	CG	GLU	A	590	-9.645	-22.381	-6.628	1.00201.16	C
ATOM	4639	CD	GLU	A	590	-8.307	-21.720	-7.001	1.00193.07	C
ATOM	4640	OE1	GLU	A	590	-7.297	-22.434	-7.179	1.00187.17	O
ATOM	4641	OE2	GLU	A	590	-8.267	-20.476	-7.111	1.00193.26	O1-
ATOM	4642	N	LYS	A	591	-9.673	-26.745	-6.311	1.00155.14	N
ATOM	4643	CA	LYS	A	591	-9.593	-28.125	-6.811	1.00159.30	C
ATOM	4644	C	LYS	A	591	-9.748	-29.225	-5.759	1.00161.89	C
ATOM	4645	O	LYS	A	591	-10.159	-28.971	-4.637	1.00158.59	O
ATOM	4646	CB	LYS	A	591	-8.297	-28.327	-7.600	1.00169.00	C
ATOM	4647	CG	LYS	A	591	-8.050	-27.248	-8.635	1.00166.92	C
ATOM	4648	CD	LYS	A	591	-6.966	-27.644	-9.608	1.00159.38	C
ATOM	4649	CE	LYS	A	591	-6.884	-26.653	-10.750	1.00159.27	C
ATOM	4650	NZ	LYS	A	591	-6.418	-27.302	-12.002	1.00156.30	N1+
ATOM	4651	N	SER	A	592	-9.419	-30.452	-6.140	1.00155.36	N
ATOM	4652	CA	SER	A	592	-9.621	-31.607	-5.271	1.00158.00	C
ATOM	4653	C	SER	A	592	-8.450	-31.837	-4.329	1.00147.43	C
ATOM	4654	O	SER	A	592	-8.642	-32.089	-3.141	1.00147.44	O
ATOM	4655	CB	SER	A	592	-9.860	-32.872	-6.101	1.00162.97	C
ATOM	4656	OG	SER	A	592	-8.800	-33.122	-7.016	1.00139.85	O
ATOM	4657	N	LEU	A	593	-7.240	-31.763	-4.879	1.00164.73	N
ATOM	4658	CA	LEU	A	593	-6.001	-32.014	-4.138	1.00151.58	C
ATOM	4659	C	LEU	A	593	-5.880	-33.425	-3.552	1.00151.38	C
ATOM	4660	O	LEU	A	593	-6.288	-33.689	-2.417	1.00154.36	O
ATOM	4661	CB	LEU	A	593	-5.767	-30.941	-3.069	1.00136.25	C
ATOM	4662	CG	LEU	A	593	-5.117	-29.673	-3.620	1.00129.32	C
ATOM	4663	CD1	LEU	A	593	-3.925	-29.301	-2.775	1.00118.27	C
ATOM	4664	CD2	LEU	A	593	-4.703	-29.884	-5.078	1.00125.97	C
ATOM	4665	N	PHE	A	594	-5.315	-34.323	-4.353	1.00144.79	N
ATOM	4666	CA	PHE	A	594	-4.996	-35.671	-3.924	1.00143.95	C
ATOM	4667	C	PHE	A	594	-3.496	-35.751	-3.983	1.00128.84	C
ATOM	4668	O	PHE	A	594	-2.926	-35.576	-5.044	1.00124.04	O
ATOM	4669	CB	PHE	A	594	-5.593	-36.691	-4.891	1.00169.24	C
ATOM	4670	CG	PHE	A	594	-5.437	-38.121	-4.446	1.00157.89	C
ATOM	4671	CD1	PHE	A	594	-6.317	-39.095	-4.886	1.00172.89	C
ATOM	4672	CD2	PHE	A	594	-4.419	-38.493	-3.589	1.00145.21	C
ATOM	4673	CE1	PHE	A	594	-6.183	-40.412	-4.475	1.00175.18	C
ATOM	4674	CE2	PHE	A	594	-4.278	-39.808	-3.176	1.00147.28	C
ATOM	4675	CZ	PHE	A	594	-5.160	-40.765	-3.618	1.00162.28	C
ATOM	4676	N	PHE	A	595	-2.857	-36.006	-2.847	1.00159.56	N
ATOM	4677	CA	PHE	A	595	-1.399	-36.059	-2.774	1.00145.80	C
ATOM	4678	C	PHE	A	595	-0.953	-36.962	-1.636	1.00142.75	C
ATOM	4679	O	PHE	A	595	-1.658	-37.085	-0.649	1.00148.22	O
ATOM	4680	CB	PHE	A	595	-0.837	-34.663	-2.538	1.00149.56	C
ATOM	4681	CG	PHE	A	595	0.633	-34.645	-2.268	1.00135.61	C
ATOM	4682	CD1	PHE	A	595	1.499	-34.025	-3.142	1.00129.01	C
ATOM	4683	CD2	PHE	A	595	1.147	-35.247	-1.142	1.00129.18	C
ATOM	4684	CE1	PHE	A	595	2.843	-34.013	-2.898	1.00117.74	C
ATOM	4685	CE2	PHE	A	595	2.483	-35.248	-0.900	1.00117.84	C
ATOM	4686	CZ	PHE	A	595	3.337	-34.627	-1.778	1.00112.24	C
ATOM	4687	N	SER	A	596	0.213	-37.594	-1.754	1.00148.06	N
ATOM	4688	CA	SER	A	596	0.730	-38.361	-0.618	1.00144.60	C
ATOM	4689	C	SER	A	596	2.119	-38.930	-0.815	1.00136.68	C
ATOM	4690	O	SER	A	596	2.371	-39.606	-1.800	1.00138.80	O
ATOM	4691	CB	SER	A	596	-0.205	-39.513	-0.292	1.00148.72	C
ATOM	4692	OG	SER	A	596	0.511	-40.727	-0.317	1.00149.04	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	4693	N	GLN	A	597	3.010	-38.687	0.143	1.00145.42	N
ATOM	4694	CA	GLN	A	597	4.360	-39.251	0.103	1.00138.69	C
ATOM	4695	C	GLN	A	597	4.560	-40.332	1.150	1.00141.00	C
ATOM	4696	O	GLN	A	597	4.321	-40.112	2.328	1.00139.53	O
ATOM	4697	CB	GLN	A	597	5.423	-38.170	0.302	1.00195.95	C
ATOM	4698	CG	GLN	A	597	6.827	-38.735	0.440	1.00176.37	C
ATOM	4699	CD	GLN	A	597	7.866	-37.676	0.725	1.00166.77	C
ATOM	4700	NE2	GLN	A	597	9.010	-38.098	1.240	1.00160.30	N
ATOM	4701	OE1	GLN	A	597	7.643	-36.493	0.492	1.00164.47	O
ATOM	4702	N	ALA	A	598	5.024	-41.497	0.721	1.00144.43	N
ATOM	4703	CA	ALA	A	598	5.174	-42.602	1.658	1.00140.60	C
ATOM	4704	C	ALA	A	598	6.256	-43.562	1.201	1.00137.19	C
ATOM	4705	O	ALA	A	598	6.820	-43.408	0.120	1.00138.38	O
ATOM	4706	CB	ALA	A	598	3.850	-43.329	1.850	1.00382.09	C
ATOM	4707	N	ASN	A	599	6.552	-44.552	2.033	1.00184.69	N
ATOM	4708	CA	ASN	A	599	7.613	-45.502	1.728	1.00181.92	C
ATOM	4709	C	ASN	A	599	7.110	-46.922	1.475	1.00191.73	C
ATOM	4710	O	ASN	A	599	5.943	-47.248	1.706	1.00201.22	O
ATOM	4711	CB	ASN	A	599	8.673	-45.510	2.840	1.00181.33	C
ATOM	4712	CG	ASN	A	599	9.580	-44.282	2.803	1.00173.31	C
ATOM	4713	ND2	ASN	A	599	10.554	-44.230	3.710	1.00145.42	N
ATOM	4714	OD1	ASN	A	599	9.401	-43.394	1.973	1.00161.20	O
ATOM	4715	N	ALA	A	600	8.016	-47.766	1.004	1.00127.57	N
ATOM	4716	CA	ALA	A	600	7.677	-49.133	0.665	1.00136.50	C
ATOM	4717	C	ALA	A	600	7.899	-50.062	1.846	1.00136.24	C
ATOM	4718	O	ALA	A	600	8.850	-49.888	2.597	1.00135.95	O
ATOM	4719	CB	ALA	A	600	8.525	-49.574	-0.503	1.00139.82	C
ATOM	4720	N	ILE	A	601	7.054	-51.075	2.002	1.00194.09	N
ATOM	4721	CA	ILE	A	601	7.250	-52.043	3.083	1.00193.17	C
ATOM	4722	C	ILE	A	601	7.341	-53.507	2.629	1.00194.41	C
ATOM	4723	O	ILE	A	601	8.037	-54.318	3.247	1.00195.01	O
ATOM	4724	CB	ILE	A	601	6.140	-51.923	4.118	1.00146.35	C
ATOM	4725	CG1	ILE	A	601	6.108	-50.511	4.668	1.00124.13	C
ATOM	4726	CG2	ILE	A	601	6.355	-52.910	5.237	1.00132.67	C
ATOM	4727	CD1	ILE	A	601	5.050	-50.308	5.710	1.00140.90	C
ATOM	4728	N	ALA	A	602	6.640	-53.836	1.547	1.00283.43	N
ATOM	4729	CA	ALA	A	602	6.540	-55.220	1.093	1.00284.68	C
ATOM	4730	C	ALA	A	602	6.403	-55.336	-0.427	1.00288.43	C
ATOM	4731	O	ALA	A	602	5.882	-54.437	-1.082	1.00288.63	O
ATOM	4732	CB	ALA	A	602	5.372	-55.905	1.781	1.00143.80	C
ATOM	4733	N	GLN	A	603	6.875	-56.450	-0.979	1.00185.78	N
ATOM	4734	CA	GLN	A	603	6.719	-56.730	-2.407	1.00190.10	C
ATOM	4735	C	GLN	A	603	6.704	-58.237	-2.671	1.00193.01	C
ATOM	4736	O	GLN	A	603	7.397	-58.994	-1.994	1.00193.75	O
ATOM	4737	CB	GLN	A	603	7.826	-56.053	-3.236	1.00184.09	C
ATOM	4738	CG	GLN	A	603	7.587	-56.061	-4.756	1.00185.51	C
ATOM	4739	CD	GLN	A	603	8.658	-55.299	-5.542	1.00174.88	C
ATOM	4740	NE2	GLN	A	603	8.881	-55.706	-6.790	1.00173.51	N
ATOM	4741	OE1	GLN	A	603	9.276	-54.362	-5.030	1.00168.15	O
ATOM	4742	N	ASP	A	604	5.906	-58.663	-3.650	1.00384.25	N
ATOM	4743	CA	ASP	A	604	5.820	-60.076	-4.029	1.00386.59	C
ATOM	4744	C	ASP	A	604	6.552	-60.349	-5.339	1.00394.96	C
ATOM	4745	O	ASP	A	604	6.064	-60.000	-6.415	1.00396.22	O
ATOM	4746	CB	ASP	A	604	4.360	-60.521	-4.164	1.00221.56	C
ATOM	4747	CG	ASP	A	604	3.669	-60.682	-2.826	1.00216.72	C
ATOM	4748	OD1	ASP	A	604	4.242	-61.336	-1.930	1.00214.72	O
ATOM	4749	OD2	ASP	A	604	2.550	-60.148	-2.673	1.00216.32	O1-
TER	4750		ASP	A	604					
ATOM	4751	N	GLY	A	608	3.241	-58.570	-7.745	1.00165.09	N
ATOM	4752	CA	GLY	A	608	4.087	-57.456	-7.351	1.00162.87	C
ATOM	4753	C	GLY	A	608	3.376	-56.444	-6.473	1.00152.22	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4754	O	GLY	A	608	3.493	-55.240	-6.688	1.00148.65	O
ATOM	4755	N	SER	A	609	2.649	-56.945	-5.476	1.00270.65	N
ATOM	4756	CA	SER	A	609	1.831	-56.116	-4.590	1.00259.93	C
ATOM	4757	C	SER	A	609	2.689	-55.366	-3.558	1.00257.95	C
ATOM	4758	O	SER	A	609	3.264	-55.983	-2.662	1.00257.44	O
ATOM	4759	CB	SER	A	609	-0.787	-56.992	-3.881	1.00173.55	C
ATOM	4760	OG	SER	A	609	-0.497	-56.384	-3.860	1.00145.66	O
ATOM	4761	N	VAL	A	610	2.771	-54.040	-3.684	1.00214.83	N
ATOM	4762	CA	VAL	A	610	3.585	-53.239	-2.763	1.00212.97	C
ATOM	4763	C	VAL	A	610	2.766	-52.451	-1.755	1.00203.48	C
ATOM	4764	O	VAL	A	610	1.942	-51.631	-2.127	1.00200.67	O
ATOM	4765	CB	VAL	A	610	4.450	-52.219	-3.508	1.00100.51	C
ATOM	4766	CG1	VAL	A	610	5.249	-51.401	-2.504	1.00 96.66	C
ATOM	4767	CG2	VAL	A	610	5.367	-52.913	-4.492	1.00105.56	C
ATOM	4768	N	MET	A	611	3.018	-52.670	-0.473	1.00163.92	N
ATOM	4769	CA	MET	A	611	2.251	-51.967	0.550	1.00155.09	C
ATOM	4770	C	MET	A	611	2.857	-50.600	0.906	1.00154.07	C
ATOM	4771	O	MET	A	611	4.072	-50.461	1.038	1.00156.55	O
ATOM	4772	CB	MET	A	611	2.119	-52.830	1.808	1.00214.83	C
ATOM	4773	CG	MET	A	611	1.189	-52.241	2.851	1.00206.81	C
ATOM	4774	SD	MET	A	611	-0.538	-52.494	2.418	1.00182.22	S
ATOM	4775	CE	MET	A	611	-0.698	-54.256	2.734	1.00182.21	C
ATOM	4776	N	LEU	A	612	2.007	-49.589	1.064	1.00246.97	N
ATOM	4777	CA	LEU	A	612	2.478	-48.271	1.469	1.00242.99	C
ATOM	4778	C	LEU	A	612	1.845	-47.861	2.799	1.00237.42	C
ATOM	4779	O	LEU	A	612	0.662	-48.081	3.029	1.00235.94	O
ATOM	4780	CB	LEU	A	612	2.190	-47.224	0.385	1.00114.42	C
ATOM	4781	CG	LEU	A	612	2.949	-47.366	-0.938	1.00113.88	C
ATOM	4782	CD1	LEU	A	612	2.967	-46.076	-1.744	1.00100.74	C
ATOM	4783	CD2	LEU	A	612	4.360	-47.794	-0.640	1.00117.00	C
ATOM	4784	N	ASP	A	613	2.659	-47.285	3.679	1.00175.52	N
ATOM	4785	CA	ASP	A	613	2.227	-46.802	4.997	1.00171.14	C
ATOM	4786	C	ASP	A	613	0.757	-46.475	5.079	1.00169.03	C
ATOM	4787	O	ASP	A	613	-0.002	-47.053	5.853	1.00168.10	O
ATOM	4788	CB	ASP	A	613	2.992	-45.531	5.365	1.00184.44	C
ATOM	4789	CG	ASP	A	613	4.477	-45.666	5.125	1.00168.76	C
ATOM	4790	OD1	ASP	A	613	4.947	-46.823	5.136	1.00173.64	O
ATOM	4791	OD2	ASP	A	613	5.166	-44.633	4.954	1.00168.36	O1-
ATOM	4792	N	ASN	A	614	0.353	-45.511	4.275	1.00228.55	N
ATOM	4793	CA	ASN	A	614	-1.024	-44.986	4.304	1.00227.78	C
ATOM	4794	C	ASN	A	614	-2.136	-45.930	3.901	1.00228.64	C
ATOM	4795	O	ASN	A	614	-3.259	-45.466	3.689	1.00228.41	O
ATOM	4796	CB	ASN	A	614	-1.077	-43.683	3.481	1.00154.82	C
ATOM	4797	CG	ASN	A	614	-0.179	-43.759	2.268	1.00157.63	C
ATOM	4798	ND2	ASN	A	614	-0.116	-42.680	1.512	1.00152.71	N
ATOM	4799	OD1	ASN	A	614	0.464	-44.809	2.016	1.00160.44	O
ATOM	4800	N	GLY	A	615	-1.771	-47.190	3.647	1.00183.87	N
ATOM	4801	CA	GLY	A	615	-2.727	-48.241	3.351	1.00183.26	C
ATOM	4802	C	GLY	A	615	-3.014	-48.370	1.872	1.00187.85	C
ATOM	4803	O	GLY	A	615	-3.983	-49.006	1.453	1.00189.71	O
ATOM	4804	N	VAL	A	616	-2.152	-47.741	1.085	1.00127.19	N
ATOM	4805	CA	VAL	A	616	-2.284	-47.683	-0.360	1.00131.58	C
ATOM	4806	C	VAL	A	616	-1.388	-48.746	-0.907	1.00136.14	C
ATOM	4807	O	VAL	A	616	-0.254	-48.855	-0.475	1.00135.54	O
ATOM	4808	CB	VAL	A	616	-1.691	-46.379	-0.916	1.00 97.97	C
ATOM	4809	CG1	VAL	A	616	-2.259	-46.066	-2.283	1.00 99.91	C
ATOM	4810	CG2	VAL	A	616	-1.966	-45.250	0.025	1.00 94.37	C
ATOM	4811	N	GLU	A	617	-1.869	-49.530	-1.860	1.00158.77	N
ATOM	4812	CA	GLU	A	617	-0.958	-50.469	-2.488	1.00164.61	C
ATOM	4813	C	GLU	A	617	-0.657	-50.133	-3.939	1.00167.44	C
ATOM	4814	O	GLU	A	617	-1.391	-49.408	-4.599	1.00164.89	O

ATOM	4815	CB	GLU	A	617	-1.524	-51.873	-2.384	1.00231.02	C
ATOM	4816	CG	GLU	A	617	-1.926	-52.297	-1.016	1.00201.15	C
ATOM	4817	CD	GLU	A	617	-2.489	-53.700	-1.005	1.00201.47	C
ATOM	4818	OE1	GLU	A	617	-2.224	-54.476	-1.951	1.00207.31	O
ATOM	4819	OE2	GLU	A	617	-3.212	-54.019	-0.041	1.00196.65	O1-
ATOM	4820	N	ILE	A	618	0.439	-50.697	-4.422	1.00169.37	N
ATOM	4821	CA	ILE	A	618	0.795	-50.640	-5.827	1.00170.41	C
ATOM	4822	C	ILE	A	618	0.615	-52.046	-6.382	1.00178.26	C
ATOM	4823	O	ILE	A	618	1.313	-52.969	-5.951	1.00182.81	O
ATOM	4824	CB	ILE	A	618	2.264	-50.222	-5.990	1.00161.06	C
ATOM	4825	CG1	ILE	A	618	2.587	-49.055	-5.053	1.00128.62	C
ATOM	4826	CG2	ILE	A	618	2.577	-49.813	-7.429	1.00133.12	C
ATOM	4827	CD1	ILE	A	618	3.734	-48.189	-5.537	1.00145.45	C
ATOM	4828	N	ILE	A	619	-0.303	-52.218	-7.332	1.00176.71	N
ATOM	4829	CA	ILE	A	619	-0.528	-53.535	-7.914	1.00184.12	C
ATOM	4830	C	ILE	A	619	-0.459	-53.564	-9.447	1.00188.01	C
ATOM	4831	O	ILE	A	619	-0.205	-52.541	-10.094	1.00187.20	O
ATOM	4832	CB	ILE	A	619	-1.838	-54.184	-7.392	1.00183.52	C
ATOM	4833	CG1	ILE	A	619	-3.056	-53.442	-7.920	1.00146.66	C
ATOM	4834	CG2	ILE	A	619	-1.849	-54.221	-5.870	1.00158.66	C
ATOM	4835	CD1	ILE	A	619	-4.299	-54.310	-7.963	1.00146.13	C
ATOM	4836	N	ASN	A	620	-0.716	-54.749	-10.006	1.00194.74	N
ATOM	4837	CA	ASN	A	620	-0.353	-55.099	-11.392	1.00202.02	C
ATOM	4838	C	ASN	A	620	0.706	-54.215	-12.044	1.00201.62	C
ATOM	4839	O	ASN	A	620	0.374	-53.290	-12.769	1.00199.78	O
ATOM	4840	CB	ASN	A	620	-1.586	-55.322	-12.309	1.00221.47	C
ATOM	4841	CG	ASN	A	620	-2.643	-54.228	-12.184	1.00214.77	C
ATOM	4842	ND2	ASN	A	620	-3.885	-54.560	-12.528	1.00188.66	N
ATOM	4843	OD1	ASN	A	620	-2.348	-53.103	-11.796	1.00208.42	O
ATOM	4844	N	ASP	A	621	1.973	-54.537	-11.790	1.00218.75	N
ATOM	4845	CA	ASP	A	621	3.117	-53.859	-12.408	1.00216.23	C
ATOM	4846	C	ASP	A	621	2.977	-52.348	-12.457	1.00207.86	C
ATOM	4847	O	ASP	A	621	2.881	-51.778	-13.543	1.00209.08	O
ATOM	4848	CB	ASP	A	621	3.337	-54.359	-13.837	1.00211.45	C
ATOM	4849	CG	ASP	A	621	3.337	-55.865	-13.932	1.00219.79	C
ATOM	4850	OD1	ASP	A	621	3.738	-56.526	-12.953	1.00223.05	O
ATOM	4851	OD2	ASP	A	621	2.922	-56.389	-14.983	1.00224.30	O1-
ATOM	4852	N	PHE	A	622	2.990	-51.704	-11.293	1.00155.84	N
ATOM	4853	CA	PHE	A	622	2.954	-50.243	-11.205	1.00148.20	C
ATOM	4854	C	PHE	A	622	1.937	-49.586	-12.174	1.00150.82	C
ATOM	4855	O	PHE	A	622	2.274	-48.664	-12.921	1.00150.78	O
ATOM	4856	CB	PHE	A	622	4.364	-49.649	-11.382	1.00221.75	C
ATOM	4857	CG	PHE	A	622	4.905	-49.757	-12.791	1.00225.97	C
ATOM	4858	CD1	PHE	A	622	4.703	-48.732	-13.708	1.00224.71	C
ATOM	4859	CD2	PHE	A	622	5.621	-50.876	-13.198	1.00233.16	C
ATOM	4860	CE1	PHE	A	622	5.191	-48.824	-15.006	1.00231.61	C
ATOM	4861	CE2	PHE	A	622	6.116	-50.974	-14.496	1.00238.44	C
ATOM	4862	CZ	PHE	A	622	5.901	-49.945	-15.398	1.00238.13	C
ATOM	4863	N	ARG	A	623	0.689	-50.055	-12.150	1.00118.77	N
ATOM	4864	CA	ARG	A	623	-0.359	-49.452	-12.972	1.00122.75	C
ATOM	4865	C	ARG	A	623	-1.532	-48.927	-12.145	1.00119.03	C
ATOM	4866	O	ARG	A	623	-2.185	-47.956	-12.528	1.00120.17	O
ATOM	4867	CB	ARG	A	623	-0.877	-50.441	-14.023	1.00185.06	C
ATOM	4868	CG	ARG	A	623	-0.198	-50.343	-15.383	1.00191.48	C
ATOM	4869	CD	ARG	A	623	-0.866	-51.250	-16.413	1.00202.57	C
ATOM	4870	NE	ARG	A	623	-0.154	-51.230	-17.686	1.00211.12	N
ATOM	4871	CZ	ARG	A	623	-0.383	-52.075	-18.683	1.00221.67	C
ATOM	4872	NH1	ARG	A	623	-1.310	-53.014	-18.556	1.00224.25	N1+
ATOM	4873	NH2	ARG	A	623	0.317	-51.985	-19.805	1.00230.63	N
ATOM	4874	N	ALA	A	624	-1.806	-49.566	-11.017	1.00147.10	N
ATOM	4875	CA	ALA	A	624	-2.997	-49.220	-10.255	1.00141.76	C

ATOM	4876	C	ALA	A	624	-2.765	-49.300	-8.754	1.00136.77	C
ATOM	4877	O	ALA	A	624	-2.040	-50.175	-8.268	1.00139.27	O
ATOM	4878	CB	ALA	A	624	-4.158	-50.119	-10.657	1.00447.66	C
ATOM	4879	N	LEU	A	625	-3.416	-48.397	-8.026	1.00159.43	N
ATOM	4880	CA	LEU	A	625	-3.256	-48.305	-6.580	1.00156.54	C
ATOM	4881	C	LEU	A	625	-4.483	-48.824	-5.830	1.00157.52	C
ATOM	4882	O	LEU	A	625	-5.604	-48.521	-6.220	1.00156.36	O
ATOM	4883	CB	LEU	A	625	-3.031	-46.847	-6.198	1.00118.24	C
ATOM	4884	CG	LEU	A	625	-2.270	-45.971	-7.192	1.00116.58	C
ATOM	4885	CD1	LEU	A	625	-1.918	-44.643	-6.544	1.00109.09	C
ATOM	4886	CD2	LEU	A	625	-1.019	-46.672	-7.677	1.00118.00	C
ATOM	4887	N	LYS	A	626	-4.279	-49.602	-4.764	1.00171.72	N
ATOM	4888	CA	LYS	A	626	-5.374	-50.004	-3.872	1.00169.48	C
ATOM	4889	C	LYS	A	626	-5.448	-49.037	-2.694	1.00164.48	C
ATOM	4890	O	LYS	A	626	-4.745	-49.212	-1.679	1.00163.20	O
ATOM	4891	CB	LYS	A	626	-5.208	-51.445	-3.377	1.00163.97	C
ATOM	4892	CG	LYS	A	626	-6.512	-52.112	-2.909	1.00164.09	C
ATOM	4893	CD	LYS	A	626	-6.335	-53.624	-2.818	1.00166.07	C
ATOM	4894	CE	LYS	A	626	-7.654	-54.382	-2.801	1.00167.03	C
ATOM	4895	NZ	LYS	A	626	-7.428	-55.846	-3.026	1.00169.04	N1+
ATOM	4896	N	VAL	A	627	-6.302	-48.024	-2.862	1.00169.44	N
ATOM	4897	CA	VAL	A	627	-6.453	-46.889	-1.948	1.00165.38	C
ATOM	4898	C	VAL	A	627	-7.716	-47.036	-1.087	1.00161.87	C
ATOM	4899	O	VAL	A	627	-8.716	-46.335	-1.295	1.00156.49	O
ATOM	4900	CB	VAL	A	627	-6.547	-45.553	-2.744	1.00108.23	C
ATOM	4901	CG1	VAL	A	627	-6.528	-44.348	-1.828	1.00105.28	C
ATOM	4902	CG2	VAL	A	627	-5.442	-45.434	-3.784	1.00110.67	C
ATOM	4903	N	GLU	A	628	-7.665	-47.960	-0.129	1.00222.33	N
ATOM	4904	CA	GLU	A	628	-8.804	-48.260	0.747	1.00221.16	C
ATOM	4905	C	GLU	A	628	-9.857	-49.182	0.108	1.00223.09	C
ATOM	4906	O	GLU	A	628	-11.059	-49.034	0.348	1.00220.06	O
ATOM	4907	CB	GLU	A	628	-9.454	-46.975	1.271	1.00226.13	C
ATOM	4908	CG	GLU	A	628	-10.381	-47.201	2.455	1.00227.34	C
ATOM	4909	CD	GLU	A	628	-10.936	-45.911	3.025	1.00224.90	C
ATOM	4910	OE1	GLU	A	628	-10.524	-44.825	2.561	1.00221.08	O
ATOM	4911	OE2	GLU	A	628	-11.786	-45.986	3.936	1.00228.55	O1-
ATOM	4912	N	GLY	A	629	-9.386	-50.148	-0.678	1.00224.78	N
ATOM	4913	CA	GLY	A	629	-10.254	-51.091	-1.358	1.00227.85	C
ATOM	4914	C	GLY	A	629	-10.439	-50.714	-2.813	1.00228.83	C
ATOM	4915	O	GLY	A	629	-10.730	-51.564	-3.655	1.00234.14	O
ATOM	4916	N	ALA	A	630	-10.254	-49.429	-3.100	1.00228.01	N
ATOM	4917	CA	ALA	A	630	-10.447	-48.874	-4.435	1.00230.23	C
ATOM	4918	C	ALA	A	630	-9.217	-49.054	-5.310	1.00232.30	C
ATOM	4919	O	ALA	A	630	-8.152	-48.535	-4.991	1.00229.89	O
ATOM	4920	CB	ALA	A	630	-10.775	-47.397	-4.331	1.00 94.97	C
ATOM	4921	N	SER	A	631	-9.360	-49.776	-6.418	1.00166.32	N
ATOM	4922	CA	SER	A	631	-8.279	-49.863	-7.392	1.00170.05	C
ATOM	4923	C	SER	A	631	-8.342	-48.623	-8.275	1.00167.36	C
ATOM	4924	O	SER	A	631	-9.429	-48.154	-8.618	1.00167.59	O
ATOM	4925	CB	SER	A	631	-8.370	-51.142	-8.229	1.00191.13	C
ATOM	4926	OG	SER	A	631	-9.349	-51.034	-9.244	1.00157.11	O
ATOM	4927	N	ILE	A	632	-7.178	-48.077	-8.614	1.00150.60	N
ATOM	4928	CA	ILE	A	632	-7.116	-46.866	-9.425	1.00151.01	C
ATOM	4929	C	ILE	A	632	-6.050	-46.899	-10.501	1.00156.40	C
ATOM	4930	O	ILE	A	632	-4.920	-47.332	-10.267	1.00155.89	O
ATOM	4931	CB	ILE	A	632	-6.871	-45.630	-8.573	1.00118.21	C
ATOM	4932	CG1	ILE	A	632	-7.937	-45.518	-7.498	1.00114.04	C
ATOM	4933	CG2	ILE	A	632	-6.870	-44.375	-9.432	1.00122.14	C
ATOM	4934	CD1	ILE	A	632	-7.720	-44.338	-6.630	1.00 72.28	C
ATOM	4935	N	PRO	A	633	-6.423	-46.421	-11.688	1.00139.21	N
ATOM	4936	CA	PRO	A	633	-5.575	-46.304	-12.871	1.00147.80	C

ATOM	4937	C	PRO	A	633	-4.567	-45.177	-12.718	1.00145.31	C
ATOM	4938	O	PRO	A	633	-4.953	-44.067	-12.352	1.00142.28	O
ATOM	4939	CB	PRO	A	633	-6.576	-45.938	-13.968	1.00187.01	C
ATOM	4940	CG	PRO	A	633	-7.691	-45.255	-13.239	1.00145.85	C
ATOM	4941	CD	PRO	A	633	-7.807	-45.994	-11.957	1.00134.71	C
ATOM	4942	N	LEU	A	634	-3.297	-45.459	-12.998	1.00 96.24	N
ATOM	4943	CA	LEU	A	634	-2.270	-44.433	-12.950	1.00 91.20	C
ATOM	4944	C	LEU	A	634	-2.165	-43.750	-14.289	1.00101.66	C
ATOM	4945	O	LEU	A	634	-1.825	-44.379	-15.271	1.00109.10	O
ATOM	4946	CB	LEU	A	634	-0.920	-45.030	-12.578	1.00152.45	C
ATOM	4947	CG	LEU	A	634	-0.860	-45.524	-11.137	1.00108.38	C
ATOM	4948	CD1	LEU	A	634	0.561	-45.795	-10.751	1.00104.80	C
ATOM	4949	CD2	LEU	A	634	-1.445	-44.484	-10.214	1.00101.33	C
ATOM	4950	N	LYS	A	635	-2.450	-42.458	-14.334	1.00127.43	N
ATOM	4951	CA	LYS	A	635	-2.304	-41.714	-15.571	1.00129.74	C
ATOM	4952	C	LYS	A	635	-0.910	-41.915	-16.085	1.00131.25	C
ATOM	4953	O	LYS	A	635	-0.645	-41.708	-17.258	1.00134.57	O
ATOM	4954	CB	LYS	A	635	-2.528	-40.221	-15.361	1.00149.32	C
ATOM	4955	CG	LYS	A	635	-2.192	-39.407	-16.598	1.00152.01	C
ATOM	4956	CD	LYS	A	635	-2.442	-37.932	-16.408	1.00120.85	C
ATOM	4957	CE	LYS	A	635	-2.777	-37.259	-17.730	1.00124.35	C
ATOM	4958	NZ	LYS	A	635	-4.254	-37.203	-17.975	1.00126.57	N1+
ATOM	4959	N	ALA	A	636	-0.012	-42.303	-15.193	1.00136.60	N
ATOM	4960	CA	ALA	A	636	1.364	-42.563	-15.566	1.00137.84	C
ATOM	4961	C	ALA	A	636	2.117	-42.944	-14.332	1.00134.72	C
ATOM	4962	O	ALA	A	636	1.549	-42.987	-13.251	1.00131.62	O
ATOM	4963	CB	ALA	A	636	1.998	-41.344	-16.190	1.00127.24	C
ATOM	4964	N	PHE	A	637	3.397	-43.232	-14.519	1.00123.29	N
ATOM	4965	CA	PHE	A	637	4.323	-43.504	-13.438	1.00120.31	C
ATOM	4966	C	PHE	A	637	5.613	-42.850	-13.836	1.00120.93	C
ATOM	4967	O	PHE	A	637	6.184	-43.199	-14.860	1.00124.46	O
ATOM	4968	CB	PHE	A	637	4.566	-44.998	-13.279	1.00168.48	C
ATOM	4969	CG	PHE	A	637	5.767	-45.332	-12.434	1.00137.26	C
ATOM	4970	CD1	PHE	A	637	5.618	-45.916	-11.195	1.00163.80	C
ATOM	4971	CD2	PHE	A	637	7.049	-45.074	-12.887	1.00139.00	C
ATOM	4972	CE1	PHE	A	637	6.721	-46.231	-10.433	1.00132.92	C
ATOM	4973	CE2	PHE	A	637	8.151	-45.383	-12.123	1.00137.71	C
ATOM	4974	CZ	PHE	A	637	7.985	-45.960	-10.899	1.00134.65	C
ATOM	4975	N	VAL	A	638	6.072	-41.902	-13.034	1.00129.92	N
ATOM	4976	CA	VAL	A	638	7.342	-41.242	-13.286	1.00130.49	C
ATOM	4977	C	VAL	A	638	8.421	-41.818	-12.378	1.00128.63	C
ATOM	4978	O	VAL	A	638	8.193	-42.060	-11.199	1.00125.62	O
ATOM	4979	CB	VAL	A	638	7.215	-39.728	-13.112	1.00102.94	C
ATOM	4980	CG1	VAL	A	638	8.571	-39.055	-13.160	1.00104.57	C
ATOM	4981	CG2	VAL	A	638	6.293	-39.167	-14.174	1.00104.69	C
ATOM	4982	N	ASP	A	639	9.593	-42.050	-12.950	1.00132.95	N
ATOM	4983	CA	ASP	A	639	10.676	-42.743	-12.278	1.00132.14	C
ATOM	4984	C	ASP	A	639	11.859	-41.795	-12.282	1.00132.32	C
ATOM	4985	O	ASP	A	639	12.568	-41.718	-13.275	1.00135.30	O
ATOM	4986	CB	ASP	A	639	10.999	-44.011	-13.076	1.00166.50	C
ATOM	4987	CG	ASP	A	639	11.989	-44.916	-12.384	1.00166.29	C
ATOM	4988	OD1	ASP	A	639	13.119	-44.479	-12.104	1.00138.40	O
ATOM	4989	OD2	ASP	A	639	11.643	-46.083	-12.133	1.00139.45	O1-
ATOM	4990	N	ILE	A	640	12.063	-41.051	-11.200	1.00144.57	N
ATOM	4991	CA	ILE	A	640	13.122	-40.039	-11.191	1.00145.37	C
ATOM	4992	C	ILE	A	640	14.428	-40.544	-10.585	1.00144.68	C
ATOM	4993	O	ILE	A	640	14.465	-40.979	-9.435	1.00141.93	O
ATOM	4994	CB	ILE	A	640	12.682	-38.743	-10.500	1.00123.47	C
ATOM	4995	CG1	ILE	A	640	11.372	-38.260	-11.110	1.00124.12	C
ATOM	4996	CG2	ILE	A	640	13.775	-37.666	-10.611	1.00125.82	C
ATOM	4997	CD1	ILE	A	640	10.918	-36.966	-10.563	1.00124.34	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	4998	N	GLU	A	641	15.498	-40.471	-11.371	1.00142.75	N
ATOM	4999	CA	GLU	A	641	16.762	-41.068	-10.985	1.00142.58	C
ATOM	5000	C	GLU	A	641	17.845	-40.026	-10.720	1.00143.61	C
ATOM	5001	O	GLU	A	641	18.848	-40.329	-10.082	1.00143.28	O
ATOM	5002	CB	GLU	A	641	17.210	-42.082	-12.039	1.00235.36	C
ATOM	5003	CG	GLU	A	641	18.225	-43.085	-11.538	1.00235.24	C
ATOM	5004	CD	GLU	A	641	18.307	-44.315	-12.414	1.00213.45	C
ATOM	5005	OE1	GLU	A	641	17.246	-44.788	-12.881	1.00215.33	O
ATOM	5006	OE2	GLU	A	641	19.433	-44.809	-12.632	1.00215.19	O1-
ATOM	5007	N	SER	A	642	17.647	-38.800	-11.191	1.00154.68	N
ATOM	5008	CA	SER	A	642	18.609	-37.734	-10.897	1.00156.28	C
ATOM	5009	C	SER	A	642	17.946	-36.361	-10.791	1.00157.45	C
ATOM	5010	O	SER	A	642	17.750	-35.690	-11.801	1.00160.21	O
ATOM	5011	CB	SER	A	642	19.725	-37.707	-11.943	1.00371.97	C
ATOM	5012	OG	SER	A	642	20.534	-38.865	-11.843	1.00371.32	O
ATOM	5013	N	ILE	A	643	17.606	-35.957	-9.563	1.00125.44	N
ATOM	5014	CA	ILE	A	643	16.943	-34.676	-9.297	1.00127.37	C
ATOM	5015	C	ILE	A	643	17.833	-33.519	-9.722	1.00131.93	C
ATOM	5016	O	ILE	A	643	17.372	-32.479	-10.200	1.00134.64	O
ATOM	5017	CB	ILE	A	643	16.630	-34.498	-7.795	1.00112.20	C
ATOM	5018	CG1	ILE	A	643	15.719	-35.612	-7.288	1.00107.67	C
ATOM	5019	CG2	ILE	A	643	16.001	-33.152	-7.552	1.00115.58	C
ATOM	5020	CD1	ILE	A	643	15.296	-35.433	-5.863	1.00106.12	C
ATOM	5021	N	THR	A	644	19.125	-33.724	-9.530	1.00128.88	N
ATOM	5022	CA	THR	A	644	20.109	-32.710	-9.812	1.00132.66	C
ATOM	5023	C	THR	A	644	20.151	-32.454	-11.308	1.00135.14	C
ATOM	5024	O	THR	A	644	20.192	-31.298	-11.728	1.00137.03	O
ATOM	5025	CB	THR	A	644	21.483	-33.161	-9.311	1.00165.24	C
ATOM	5026	CG2	THR	A	644	22.027	-32.168	-8.296	1.00141.81	C
ATOM	5027	OG1	THR	A	644	21.359	-34.453	-8.696	1.00134.53	O
ATOM	5028	N	ASN	A	645	20.106	-33.536	-12.101	1.00137.58	N
ATOM	5029	CA	ASN	A	645	20.348	-33.486	-13.557	1.00140.35	C
ATOM	5030	C	ASN	A	645	19.088	-33.463	-14.431	1.00140.61	C
ATOM	5031	O	ASN	A	645	19.095	-32.931	-15.542	1.00143.80	O
ATOM	5032	CB	ASN	A	645	21.267	-34.632	-13.993	1.00183.84	C
ATOM	5033	CG	ASN	A	645	22.479	-34.792	-13.087	1.00183.61	C
ATOM	5034	ND2	ASN	A	645	22.365	-35.688	-12.114	1.00154.95	N
ATOM	5035	OD1	ASN	A	645	23.504	-34.125	-13.262	1.00160.91	O
ATOM	5036	N	GLY	A	646	18.011	-34.044	-13.922	1.00136.03	N
ATOM	5037	CA	GLY	A	646	16.717	-33.971	-14.575	1.00136.26	C
ATOM	5038	C	GLY	A	646	16.346	-35.276	-15.236	1.00134.83	C
ATOM	5039	O	GLY	A	646	15.454	-35.324	-16.081	1.00135.69	O
ATOM	5040	N	LYS	A	647	17.032	-36.341	-14.833	1.00147.23	N
ATOM	5041	CA	LYS	A	647	16.957	-37.631	-15.510	1.00147.46	C
ATOM	5042	C	LYS	A	647	15.866	-38.508	-14.921	1.00144.35	C
ATOM	5043	O	LYS	A	647	16.016	-39.049	-13.819	1.00141.49	O
ATOM	5044	CB	LYS	A	647	18.308	-38.342	-15.425	1.00199.83	C
ATOM	5045	CG	LYS	A	647	18.439	-39.605	-16.251	1.00202.07	C
ATOM	5046	CD	LYS	A	647	19.799	-40.233	-15.989	1.00203.68	C
ATOM	5047	CE	LYS	A	647	20.096	-41.393	-16.918	1.00180.78	C
ATOM	5048	NZ	LYS	A	647	21.540	-41.791	-16.855	1.00183.33	N1+
ATOM	5049	N	PHE	A	648	14.770	-38.632	-15.676	1.00118.40	N
ATOM	5050	CA	PHE	A	648	13.633	-39.498	-15.343	1.00116.32	C
ATOM	5051	C	PHE	A	648	13.023	-40.204	-16.574	1.00119.25	C
ATOM	5052	O	PHE	A	648	13.263	-39.830	-17.728	1.00122.57	O
ATOM	5053	CB	PHE	A	648	12.545	-38.718	-14.580	1.00129.73	C
ATOM	5054	CG	PHE	A	648	12.067	-37.480	-15.291	1.00131.69	C
ATOM	5055	CD1	PHE	A	648	11.170	-37.567	-16.347	1.00132.92	C
ATOM	5056	CD2	PHE	A	648	12.514	-36.231	-14.905	1.00132.84	C
ATOM	5057	CE1	PHE	A	648	10.734	-36.433	-17.003	1.00135.03	C
ATOM	5058	CE2	PHE	A	648	12.087	-35.098	-15.557	1.00135.42	C

ATOM	5059	CZ	PHE	A	648	11.194	-35.199	-16.607	1.00136.32	C
ATOM	5060	N	TYR	A	649	12.226	-41.231	-16.308	1.00144.11	N
ATOM	5061	CA	TYR	A	649	11.569	-41.962	-17.367	1.00147.48	C
ATOM	5062	C	TYR	A	649	10.062	-41.897	-17.174	1.00145.64	C
ATOM	5063	O	TYR	A	649	9.509	-42.593	-16.331	1.00143.07	O
ATOM	5064	CB	TYR	A	649	12.041	-43.411	-17.371	1.00196.41	C
ATOM	5065	CG	TYR	A	649	13.532	-43.573	-17.153	1.00197.04	C
ATOM	5066	CD1	TYR	A	649	14.018	-44.272	-16.057	1.00168.17	C
ATOM	5067	CD2	TYR	A	649	14.456	-43.026	-18.038	1.00173.45	C
ATOM	5068	CE1	TYR	A	649	15.384	-44.430	-15.852	1.00168.87	C
ATOM	5069	CE2	TYR	A	649	15.826	-43.179	-17.837	1.00174.17	C
ATOM	5070	CZ	TYR	A	649	16.276	-43.882	-16.743	1.00171.89	C
ATOM	5071	OH	TYR	A	649	17.620	-44.039	-16.531	1.00172.68	O
ATOM	5072	N	TYR	A	650	9.404	-41.057	-17.964	1.00162.52	N
ATOM	5073	CA	TYR	A	650	7.957	-40.892	-17.898	1.00161.22	C
ATOM	5074	C	TYR	A	650	7.223	-42.073	-18.552	1.00163.59	C
ATOM	5075	O	TYR	A	650	7.062	-42.108	-19.769	1.00167.29	O
ATOM	5076	CB	TYR	A	650	7.568	-39.550	-18.546	1.00152.65	C
ATOM	5077	CG	TYR	A	650	6.089	-39.227	-18.556	1.00124.93	C
ATOM	5078	CD1	TYR	A	650	5.411	-38.893	-17.391	1.00148.47	C
ATOM	5079	CD2	TYR	A	650	5.375	-39.234	-19.741	1.00127.62	C
ATOM	5080	CE1	TYR	A	650	4.054	-38.597	-17.408	1.00121.05	C
ATOM	5081	CE2	TYR	A	650	4.015	-38.940	-19.770	1.00126.85	C
ATOM	5082	CZ	TYR	A	650	3.357	-38.621	-18.604	1.00123.54	C
ATOM	5083	OH	TYR	A	650	2.006	-38.332	-18.665	1.00123.15	O
ATOM	5084	N	ASN	A	651	6.800	-43.046	-17.741	1.00130.34	N
ATOM	5085	CA	ASN	A	651	5.992	-44.182	-18.213	1.00133.05	C
ATOM	5086	C	ASN	A	651	4.512	-43.844	-18.410	1.00132.39	C
ATOM	5087	O	ASN	A	651	3.841	-43.458	-17.464	1.00128.46	O
ATOM	5088	CB	ASN	A	651	6.074	-45.348	-17.227	1.00193.47	C
ATOM	5089	CG	ASN	A	651	7.362	-46.116	-17.337	1.00169.61	C
ATOM	5090	ND2	ASN	A	651	7.295	-47.422	-17.101	1.00171.89	N
ATOM	5091	OD1	ASN	A	651	8.410	-45.547	-17.635	1.00170.16	O
ATOM	5092	N	GLU	A	652	3.983	-44.014	-19.613	1.00129.28	N
ATOM	5093	CA	GLU	A	652	2.601	-43.625	-19.853	1.00128.89	C
ATOM	5094	C	GLU	A	652	1.629	-44.778	-19.615	1.00129.74	C
ATOM	5095	O	GLU	A	652	1.799	-45.842	-20.189	1.00134.33	O
ATOM	5096	CB	GLU	A	652	2.457	-43.094	-21.276	1.00246.75	C
ATOM	5097	CG	GLU	A	652	1.228	-42.242	-21.486	1.00245.87	C
ATOM	5098	CD	GLU	A	652	1.181	-41.649	-22.872	1.00250.05	C
ATOM	5099	OE1	GLU	A	652	2.146	-41.865	-23.638	1.00227.16	O
ATOM	5100	OE2	GLU	A	652	0.181	-40.971	-23.194	1.00223.70	O1-
ATOM	5101	N	ILE	A	653	0.625	-44.570	-18.762	1.00211.16	N
ATOM	5102	CA	ILE	A	653	-0.465	-45.537	-18.574	1.00211.63	C
ATOM	5103	C	ILE	A	653	-1.799	-44.812	-18.621	1.00209.25	C
ATOM	5104	O	ILE	A	653	-1.854	-43.613	-18.376	1.00204.85	O
ATOM	5105	CB	ILE	A	653	-0.439	-46.223	-17.197	1.00124.02	C
ATOM	5106	CG1	ILE	A	653	0.950	-46.731	-16.838	1.00125.08	C
ATOM	5107	CG2	ILE	A	653	-1.443	-47.358	-17.157	1.00125.59	C
ATOM	5108	CD1	ILE	A	653	1.862	-45.689	-16.314	1.00122.04	C
ATOM	5109	N	ASP	A	654	-2.878	-45.542	-18.891	1.00138.15	N
ATOM	5110	CA	ASP	A	654	-4.227	-44.952	-18.940	1.00136.19	C
ATOM	5111	C	ASP	A	654	-4.214	-43.448	-19.216	1.00133.68	C
ATOM	5112	O	ASP	A	654	-4.310	-42.633	-18.306	1.00129.24	O
ATOM	5113	CB	ASP	A	654	-5.020	-45.257	-17.664	1.00151.52	C
ATOM	5114	CG	ASP	A	654	-6.345	-45.948	-17.952	1.00153.64	C
ATOM	5115	OD1	ASP	A	654	-6.997	-45.609	-18.961	1.00156.10	O
ATOM	5116	OD2	ASP	A	654	-6.729	-46.842	-17.173	1.00153.15	O1-
ATOM	5117	N	SER	A	655	-4.090	-43.100	-20.491	1.00148.87	N
ATOM	5118	CA	SER	A	655	-3.983	-41.716	-20.914	1.00147.56	C
ATOM	5119	C	SER	A	655	-5.149	-40.932	-20.377	1.00144.78	C

ES 2 587 302 T3

ATOM	5120	O	SER	A	655	-5.094	-39.710	-20.293	1.00143.57	O
ATOM	5121	CB	SER	A	655	-3.972	-41.632	-22.443	1.00172.89	C
ATOM	5122	OG	SER	A	655	-5.185	-42.116	-22.993	1.00152.42	O
ATOM	5123	N	LYS	A	656	-6.203	-41.649	-20.008	1.00145.94	N
ATOM	5124	CA	LYS	A	656	-7.432	-41.018	-19.555	1.00143.58	C
ATOM	5125	C	LYS	A	656	-7.674	-41.084	-18.038	1.00138.66	C
ATOM	5126	O	LYS	A	656	-8.812	-41.205	-17.598	1.00137.71	O
ATOM	5127	CB	LYS	A	656	-8.632	-41.563	-20.337	1.00131.32	C
ATOM	5128	CG	LYS	A	656	-8.774	-43.073	-20.381	1.00133.74	C
ATOM	5129	CD	LYS	A	656	-9.749	-43.463	-21.504	1.00117.44	C
ATOM	5130	CE	LYS	A	656	-10.435	-44.823	-21.276	1.00120.86	C
ATOM	5131	NZ	LYS	A	656	-9.902	-46.028	-22.000	1.00127.56	N1+
ATOM	5132	N	ALA	A	657	-6.608	-40.975	-17.245	1.00151.62	N
ATOM	5133	CA	ALA	A	657	-6.721	-40.975	-15.782	1.00146.95	C
ATOM	5134	C	ALA	A	657	-6.220	-39.676	-15.180	1.00144.88	C
ATOM	5135	O	ALA	A	657	-5.880	-38.743	-15.902	1.00146.88	O
ATOM	5136	CB	ALA	A	657	-5.953	-42.126	-15.192	1.00 77.86	C
ATOM	5137	N	GLN	A	658	-6.143	-39.621	-13.856	1.00142.81	N
ATOM	5138	CA	GLN	A	658	-5.709	-38.387	-13.215	1.00141.25	C
ATOM	5139	C	GLN	A	658	-4.591	-38.507	-12.163	1.00138.26	C
ATOM	5140	O	GLN	A	658	-4.069	-37.491	-11.703	1.00138.85	O
ATOM	5141	CB	GLN	A	658	-6.909	-37.635	-12.625	1.00277.94	C
ATOM	5142	CG	GLN	A	658	-6.617	-36.168	-12.323	1.00278.80	C
ATOM	5143	CD	GLN	A	658	-7.687	-35.502	-11.476	1.00279.33	C
ATOM	5144	NE2	GLN	A	658	-7.382	-34.314	-10.970	1.00279.91	N
ATOM	5145	OE1	GLN	A	658	-8.770	-36.050	-11.277	1.00279.43	O
ATOM	5146	N	ILE	A	659	-4.202	-39.720	-11.791	1.00126.24	N
ATOM	5147	CA	ILE	A	659	-3.272	-39.882	-10.667	1.00123.12	C
ATOM	5148	C	ILE	A	659	-1.838	-40.294	-11.045	1.00123.23	C
ATOM	5149	O	ILE	A	659	-1.625	-41.359	-11.600	1.00124.18	O
ATOM	5150	CB	ILE	A	659	-3.858	-40.854	-9.633	1.00142.77	C
ATOM	5151	CG1	ILE	A	659	-5.079	-40.214	-8.977	1.00125.59	C
ATOM	5152	CG2	ILE	A	659	-2.824	-41.215	-8.589	1.00124.35	C
ATOM	5153	CD1	ILE	A	659	-6.040	-41.200	-8.367	1.00140.84	C
ATOM	5154	N	TYR	A	660	-0.853	-39.458	-10.735	1.00120.62	N
ATOM	5155	CA	TYR	A	660	0.526	-39.788	-11.099	1.00120.52	C
ATOM	5156	C	TYR	A	660	1.263	-40.480	-9.961	1.00117.42	C
ATOM	5157	O	TYR	A	660	1.204	-40.025	-8.829	1.00115.29	O
ATOM	5158	CB	TYR	A	660	1.313	-38.525	-11.433	1.00122.54	C
ATOM	5159	CG	TYR	A	660	0.922	-37.805	-12.692	1.00125.19	C
ATOM	5160	CD1	TYR	A	660	-0.197	-37.005	-12.728	1.00125.86	C
ATOM	5161	CD2	TYR	A	660	1.702	-37.884	-13.827	1.00127.14	C
ATOM	5162	CE1	TYR	A	660	-0.548	-36.326	-13.870	1.00128.83	C
ATOM	5163	CE2	TYR	A	660	1.358	-37.209	-14.973	1.00129.98	C
ATOM	5164	CZ	TYR	A	660	0.230	-36.434	-14.992	1.00130.75	C
ATOM	5165	OH	TYR	A	660	-0.128	-35.754	-16.133	1.00133.62	O
ATOM	5166	N	LEU	A	661	1.993	-41.549	-10.250	1.00129.05	N
ATOM	5167	CA	LEU	A	661	2.852	-42.150	-9.230	1.00126.40	C
ATOM	5168	C	LEU	A	661	4.308	-41.790	-9.510	1.00127.06	C
ATOM	5169	O	LEU	A	661	4.766	-41.928	-10.631	1.00129.70	O
ATOM	5170	CB	LEU	A	661	2.641	-43.672	-9.148	1.00111.94	C
ATOM	5171	CG	LEU	A	661	3.638	-44.622	-8.462	1.00 98.27	C
ATOM	5172	CD1	LEU	A	661	4.411	-43.963	-7.352	1.00107.05	C
ATOM	5173	CD2	LEU	A	661	2.948	-45.859	-7.919	1.00 98.35	C
ATOM	5174	N	LEU	A	662	5.022	-41.302	-8.496	1.00132.88	N
ATOM	5175	CA	LEU	A	662	6.439	-40.988	-8.654	1.00133.36	C
ATOM	5176	C	LEU	A	662	7.272	-41.832	-7.729	1.00131.07	C
ATOM	5177	O	LEU	A	662	6.815	-42.236	-6.661	1.00128.40	O
ATOM	5178	CB	LEU	A	662	6.742	-39.541	-8.302	1.00102.03	C
ATOM	5179	CG	LEU	A	662	5.905	-38.406	-8.868	1.00103.64	C
ATOM	5180	CD1	LEU	A	662	6.330	-37.062	-8.258	1.00 94.78	C

ATOM	5181	CD2	LEU	A	662	5.999	-38.389	-10.369	1.00	96.04	C
ATOM	5182	N	PHE	A	663	8.514	-42.065	-8.141	1.00	136.15	N
ATOM	5183	CA	PHE	A	663	9.510	-42.697	-7.292	1.00	134.58	C
ATOM	5184	C	PHE	A	663	10.793	-41.908	-7.353	1.00	135.72	C
ATOM	5185	O	PHE	A	663	11.332	-41.661	-8.424	1.00	138.39	O
ATOM	5186	CB	PHE	A	663	9.777	-44.137	-7.713	1.00	155.61	C
ATOM	5187	CG	PHE	A	663	10.684	-44.880	-6.775	1.00	154.41	C
ATOM	5188	CD1	PHE	A	663	10.229	-45.292	-5.544	1.00	151.53	C
ATOM	5189	CD2	PHE	A	663	11.984	-45.168	-7.122	1.00	156.42	C
ATOM	5190	CE1	PHE	A	663	11.038	-45.978	-4.682	1.00	150.85	C
ATOM	5191	CE2	PHE	A	663	12.806	-45.854	-6.256	1.00	155.80	C
ATOM	5192	CZ	PHE	A	663	12.328	-46.256	-5.034	1.00	152.97	C
ATOM	5193	N	LEU	A	664	11.250	-41.505	-6.181	1.00	126.12	N
ATOM	5194	CA	LEU	A	664	12.521	-40.849	-5.983	1.00	127.35	C
ATOM	5195	C	LEU	A	664	13.489	-41.910	-5.525	1.00	126.74	C
ATOM	5196	O	LEU	A	664	13.373	-42.364	-4.379	1.00	124.43	O
ATOM	5197	CB	LEU	A	664	12.372	-39.849	-4.861	1.00	117.36	C
ATOM	5198	CG	LEU	A	664	11.352	-38.760	-5.121	1.00	118.13	C
ATOM	5199	CD1	LEU	A	664	10.684	-38.375	-3.831	1.00	118.04	C
ATOM	5200	CD2	LEU	A	664	12.050	-37.581	-5.748	1.00	121.58	C
ATOM	5201	N	ARG	A	665	14.423	-42.312	-6.398	1.00	130.75	N
ATOM	5202	CA	ARG	A	665	15.289	-43.468	-6.124	1.00	130.85	C
ATOM	5203	C	ARG	A	665	16.420	-43.045	-5.213	1.00	129.99	C
ATOM	5204	O	ARG	A	665	16.992	-43.859	-4.492	1.00	128.90	O
ATOM	5205	CB	ARG	A	665	15.836	-44.115	-7.412	1.00	223.43	C
ATOM	5206	CG	ARG	A	665	16.411	-45.526	-7.194	1.00	224.53	C
ATOM	5207	CD	ARG	A	665	17.288	-46.019	-8.358	1.00	229.18	C
ATOM	5208	NE	ARG	A	665	18.145	-47.144	-7.957	1.00	221.52	N
ATOM	5209	CZ	ARG	A	665	19.144	-47.651	-8.685	1.00	225.90	C
ATOM	5210	NH1	ARG	A	665	19.439	-47.145	-9.875	1.00	228.82	N1+
ATOM	5211	NH2	ARG	A	665	19.858	-48.670	-8.220	1.00	227.75	N
ATOM	5212	N	GLU	A	666	16.716	-41.753	-5.240	1.00	130.86	N
ATOM	5213	CA	GLU	A	666	17.752	-41.197	-4.401	1.00	130.66	C
ATOM	5214	C	GLU	A	666	17.287	-41.112	-2.949	1.00	127.87	C
ATOM	5215	O	GLU	A	666	18.102	-41.038	-2.043	1.00	127.65	O
ATOM	5216	CB	GLU	A	666	18.143	-39.816	-4.908	1.00	151.70	C
ATOM	5217	CG	GLU	A	666	18.056	-39.667	-6.406	1.00	154.71	C
ATOM	5218	CD	GLU	A	666	18.625	-38.348	-6.894	1.00	148.21	C
ATOM	5219	OE1	GLU	A	666	19.691	-37.923	-6.395	1.00	148.32	O
ATOM	5220	OE2	GLU	A	666	18.003	-37.731	-7.779	1.00	150.78	O1-
ATOM	5221	N	TYR	A	667	15.977	-41.116	-2.727	1.00	108.50	N
ATOM	5222	CA	TYR	A	667	15.424	-41.103	-1.372	1.00	105.93	C
ATOM	5223	C	TYR	A	667	14.588	-42.344	-1.082	1.00	103.20	C
ATOM	5224	O	TYR	A	667	13.880	-42.391	-0.086	1.00	101.36	O
ATOM	5225	CB	TYR	A	667	14.537	-39.879	-1.161	1.00	97.86	C
ATOM	5226	CG	TYR	A	667	15.257	-38.556	-1.126	1.00	101.19	C
ATOM	5227	CD1	TYR	A	667	15.366	-37.769	-2.260	1.00	104.34	C
ATOM	5228	CD2	TYR	A	667	15.807	-38.085	0.052	1.00	102.20	C
ATOM	5229	CE1	TYR	A	667	16.022	-36.551	-2.219	1.00	108.08	C
ATOM	5230	CE2	TYR	A	667	16.468	-36.877	0.107	1.00	106.38	C
ATOM	5231	CZ	TYR	A	667	16.575	-36.109	-1.026	1.00	109.30	C
ATOM	5232	OH	TYR	A	667	17.230	-34.899	-0.954	1.00	114.06	O
ATOM	5233	N	LYS	A	668	14.672	-43.339	-1.962	1.00	127.00	N
ATOM	5234	CA	LYS	A	668	13.816	-44.525	-1.904	1.00	125.38	C
ATOM	5235	C	LYS	A	668	12.423	-44.165	-1.441	1.00	123.33	C
ATOM	5236	O	LYS	A	668	11.871	-44.836	-0.581	1.00	121.76	O
ATOM	5237	CB	LYS	A	668	14.417	-45.605	-1.004	1.00	202.12	C
ATOM	5238	CG	LYS	A	668	15.455	-46.470	-1.702	1.00	196.80	C
ATOM	5239	CD	LYS	A	668	16.313	-47.219	-0.699	1.00	197.02	C
ATOM	5240	CE	LYS	A	668	17.405	-48.020	-1.386	1.00	200.16	C
ATOM	5241	NZ	LYS	A	668	18.410	-48.504	-0.403	1.00	200.66	N1+

ES 2 587 302 T3

ATOM	5242	N	SER	A	669	11.852	-43.110	-2.020	1.00134.85	N
ATOM	5243	CA	SER	A	669	10.554	-42.628	-1.549	1.00133.43	C
ATOM	5244	C	SER	A	669	9.504	-42.488	-2.647	1.00134.44	C
ATOM	5245	O	SER	A	669	9.793	-42.012	-3.731	1.00136.57	O
ATOM	5246	CB	SER	A	669	10.712	-41.303	-0.797	1.00122.06	C
ATOM	5247	OG	SER	A	669	9.554	-41.002	-0.026	1.00111.33	O
ATOM	5248	N	PHE	A	670	8.277	-42.897	-2.335	1.00127.10	N
ATOM	5249	CA	PHE	A	670	7.175	-42.853	-3.281	1.00128.06	C
ATOM	5250	C	PHE	A	670	6.335	-41.616	-3.079	1.00128.46	C
ATOM	5251	O	PHE	A	670	6.132	-41.168	-1.945	1.00127.73	O
ATOM	5252	CB	PHE	A	670	6.276	-44.067	-3.093	1.00138.56	C
ATOM	5253	CG	PHE	A	670	6.773	-45.299	-3.767	1.00139.27	C
ATOM	5254	CD1	PHE	A	670	6.688	-46.527	-3.139	1.00138.09	C
ATOM	5255	CD2	PHE	A	670	7.308	-45.241	-5.039	1.00141.59	C
ATOM	5256	CE1	PHE	A	670	7.147	-47.667	-3.763	1.00139.80	C
ATOM	5257	CE2	PHE	A	670	7.763	-46.380	-5.666	1.00143.29	C
ATOM	5258	CZ	PHE	A	670	7.691	-47.589	-5.027	1.00142.75	C
ATOM	5259	N	VAL	A	671	5.821	-41.098	-4.186	1.00118.80	N
ATOM	5260	CA	VAL	A	671	4.921	-39.958	-4.182	1.00119.87	C
ATOM	5261	C	VAL	A	671	3.670	-40.274	-5.006	1.00120.16	C
ATOM	5262	O	VAL	A	671	3.709	-41.100	-5.915	1.00120.49	O
ATOM	5263	CB	VAL	A	671	5.614	-38.730	-4.766	1.00 89.23	C
ATOM	5264	CG1	VAL	A	671	4.664	-37.562	-4.836	1.00 91.37	C
ATOM	5265	CG2	VAL	A	671	6.807	-38.386	-3.944	1.00 89.15	C
ATOM	5266	N	ILE	A	672	2.569	-39.604	-4.693	1.00106.34	N
ATOM	5267	CA	ILE	A	672	1.296	-39.825	-5.361	1.00106.69	C
ATOM	5268	C	ILE	A	672	0.615	-38.475	-5.592	1.00109.16	C
ATOM	5269	O	ILE	A	672	0.157	-37.854	-4.647	1.00109.15	O
ATOM	5270	CB	ILE	A	672	0.402	-40.697	-4.483	1.00 98.90	C
ATOM	5271	CG1	ILE	A	672	0.891	-42.144	-4.498	1.00 91.16	C
ATOM	5272	CG2	ILE	A	672	-1.011	-40.622	-4.938	1.00 93.76	C
ATOM	5273	CD1	ILE	A	672	0.118	-43.058	-3.572	1.00 95.28	C
ATOM	5274	N	LEU	A	673	0.556	-38.017	-6.837	1.00126.38	N
ATOM	5275	CA	LEU	A	673	0.017	-36.692	-7.144	1.00129.65	C
ATOM	5276	C	LEU	A	673	-1.244	-36.703	-7.990	1.00130.36	C
ATOM	5277	O	LEU	A	673	-1.648	-37.728	-8.542	1.00128.55	O
ATOM	5278	CB	LEU	A	673	1.040	-35.894	-7.937	1.00239.73	C
ATOM	5279	CG	LEU	A	673	2.349	-35.606	-7.243	1.00 81.21	C
ATOM	5280	CD1	LEU	A	673	3.361	-35.066	-8.233	1.00236.43	C
ATOM	5281	CD2	LEU	A	673	2.099	-34.620	-6.142	1.00235.87	C
ATOM	5282	N	ASP	A	674	-1.837	-35.526	-8.127	1.00115.66	N
ATOM	5283	CA	ASP	A	674	-2.838	-35.292	-9.156	1.00117.50	C
ATOM	5284	C	ASP	A	674	-2.275	-34.288	-10.164	1.00121.40	C
ATOM	5285	O	ASP	A	674	-1.367	-33.531	-9.840	1.00123.56	O
ATOM	5286	CB	ASP	A	674	-4.156	-34.805	-8.546	1.00151.48	C
ATOM	5287	CG	ASP	A	674	-4.028	-33.455	-7.865	1.00155.51	C
ATOM	5288	OD1	ASP	A	674	-3.473	-32.524	-8.486	1.00159.00	O
ATOM	5289	OD2	ASP	A	674	-4.490	-33.324	-6.709	1.00156.23	O1-
ATOM	5290	N	GLU	A	675	-2.808	-34.285	-11.380	1.00124.33	N
ATOM	5291	CA	GLU	A	675	-2.251	-33.476	-12.461	1.00127.78	C
ATOM	5292	C	GLU	A	675	-1.698	-32.124	-12.030	1.00131.04	C
ATOM	5293	O	GLU	A	675	-0.594	-31.744	-12.424	1.00133.03	O
ATOM	5294	CB	GLU	A	675	-3.291	-33.258	-13.553	1.00142.59	C
ATOM	5295	CG	GLU	A	675	-3.603	-34.491	-14.353	1.00141.41	C
ATOM	5296	CD	GLU	A	675	-3.649	-34.213	-15.838	1.00145.11	C
ATOM	5297	OE1	GLU	A	675	-2.668	-33.633	-16.367	1.00140.19	O
ATOM	5298	OE2	GLU	A	675	-4.673	-34.575	-16.466	1.00138.97	O1-
ATOM	5299	N	SER	A	676	-2.466	-31.396	-11.225	1.00146.26	N
ATOM	5300	CA	SER	A	676	-2.132	-30.007	-10.902	1.00150.88	C
ATOM	5301	C	SER	A	676	-1.003	-29.871	-9.882	1.00150.51	C
ATOM	5302	O	SER	A	676	-0.329	-28.838	-9.821	1.00152.79	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	5303	CB	SER	A	676	-3.373	-29.228	-10.442	1.00118.98	C
ATOM	5304	OG	SER	A	676	-3.778	-29.584	-9.131	1.00111.66	O
ATOM	5305	N	LEU	A	677	-0.806	-30.909	-9.078	1.00111.41	N
ATOM	5306	CA	LEU	A	677	0.349	-30.955	-8.188	1.00110.36	C
ATOM	5307	C	LEU	A	677	1.573	-31.460	-8.969	1.00108.46	C
ATOM	5308	O	LEU	A	677	2.696	-30.968	-8.792	1.00110.22	O
ATOM	5309	CB	LEU	A	677	0.070	-31.816	-6.952	1.00 89.31	C
ATOM	5310	CG	LEU	A	677	-0.916	-31.306	-5.894	1.00 91.70	C
ATOM	5311	CD1	LEU	A	677	-0.842	-32.218	-4.702	1.00 79.75	C
ATOM	5312	CD2	LEU	A	677	-0.656	-29.845	-5.487	1.00 91.50	C
ATOM	5313	N	TYR	A	678	1.347	-32.431	-9.851	1.00105.28	N
ATOM	5314	CA	TYR	A	678	2.361	-32.786	-10.827	1.00104.57	C
ATOM	5315	C	TYR	A	678	2.856	-31.548	-11.582	1.00109.03	C
ATOM	5316	O	TYR	A	678	4.022	-31.483	-11.947	1.00109.50	O
ATOM	5317	CB	TYR	A	678	1.867	-33.850	-11.817	1.00126.14	C
ATOM	5318	CG	TYR	A	678	2.996	-34.385	-12.670	1.00125.97	C
ATOM	5319	CD1	TYR	A	678	3.659	-35.557	-12.329	1.00122.87	C
ATOM	5320	CD2	TYR	A	678	3.437	-33.688	-13.786	1.00129.04	C
ATOM	5321	CE1	TYR	A	678	4.712	-36.032	-13.093	1.00123.24	C
ATOM	5322	CE2	TYR	A	678	4.493	-34.155	-14.552	1.00129.41	C
ATOM	5323	CZ	TYR	A	678	5.126	-35.324	-14.203	1.00126.63	C
ATOM	5324	OH	TYR	A	678	6.173	-35.780	-14.968	1.00126.26	O
ATOM	5325	N	ASN	A	679	1.987	-30.566	-11.811	1.00100.36	N
ATOM	5326	CA	ASN	A	679	2.388	-29.395	-12.598	1.00103.18	C
ATOM	5327	C	ASN	A	679	2.755	-28.141	-11.789	1.00104.30	C
ATOM	5328	O	ASN	A	679	3.188	-27.124	-12.339	1.00107.07	O
ATOM	5329	CB	ASN	A	679	1.366	-29.095	-13.705	1.00132.53	C
ATOM	5330	CG	ASN	A	679	1.445	-30.092	-14.864	1.00132.40	C
ATOM	5331	ND2	ASN	A	679	0.335	-30.754	-15.136	1.00131.08	N
ATOM	5332	OD1	ASN	A	679	2.492	-30.269	-15.497	1.00132.99	O
ATOM	5333	N	SER	A	680	2.609	-28.239	-10.476	1.00113.88	N
ATOM	5334	CA	SER	A	680	2.984	-27.168	-9.567	1.00115.24	C
ATOM	5335	C	SER	A	680	4.469	-26.856	-9.677	1.00115.39	C
ATOM	5336	O	SER	A	680	5.300	-27.760	-9.679	1.00112.56	O
ATOM	5337	CB	SER	A	680	2.681	-27.611	-8.143	1.00161.77	C
ATOM	5338	OG	SER	A	680	3.416	-28.785	-7.840	1.00157.87	O
ATOM	5339	N	ALA	A	681	4.805	-25.574	-9.729	1.00126.38	N
ATOM	5340	CA	ALA	A	681	6.189	-25.148	-9.916	1.00127.27	C
ATOM	5341	C	ALA	A	681	7.206	-25.895	-9.058	1.00123.95	C
ATOM	5342	O	ALA	A	681	8.372	-25.992	-9.410	1.00123.81	O
ATOM	5343	CB	ALA	A	681	6.313	-23.654	-9.708	1.00 84.44	C
ATOM	5344	N	TYR	A	682	6.772	-26.424	-7.930	1.00133.95	N
ATOM	5345	CA	TYR	A	682	7.693	-27.122	-7.056	1.00131.09	C
ATOM	5346	C	TYR	A	682	7.999	-28.500	-7.612	1.00127.53	C
ATOM	5347	O	TYR	A	682	9.148	-28.798	-7.896	1.00127.43	O
ATOM	5348	CB	TYR	A	682	7.133	-27.195	-5.641	1.00122.18	C
ATOM	5349	CG	TYR	A	682	7.917	-28.054	-4.688	1.00118.60	C
ATOM	5350	CD1	TYR	A	682	9.000	-27.549	-3.997	1.00115.88	C
ATOM	5351	CD2	TYR	A	682	7.552	-29.366	-4.457	1.00114.40	C
ATOM	5352	CE1	TYR	A	682	9.705	-28.333	-3.114	1.00111.49	C
ATOM	5353	CE2	TYR	A	682	8.247	-30.155	-3.575	1.00111.64	C
ATOM	5354	CZ	TYR	A	682	9.322	-29.634	-2.908	1.00109.29	C
ATOM	5355	OH	TYR	A	682	10.012	-30.425	-2.030	1.00104.77	O
ATOM	5356	N	ILE	A	683	6.981	-29.334	-7.795	1.00120.22	N
ATOM	5357	CA	ILE	A	683	7.224	-30.680	-8.317	1.00117.68	C
ATOM	5358	C	ILE	A	683	7.895	-30.595	-9.675	1.00119.41	C
ATOM	5359	O	ILE	A	683	8.718	-31.437	-10.025	1.00118.63	O
ATOM	5360	CB	ILE	A	683	5.941	-31.541	-8.440	1.00 83.84	C
ATOM	5361	CG1	ILE	A	683	5.277	-31.728	-7.089	1.00 82.12	C
ATOM	5362	CG2	ILE	A	683	6.295	-32.942	-8.972	1.00 79.18	C
ATOM	5363	CD1	ILE	A	683	5.761	-32.960	-6.377	1.00 80.92	C

ATOM	5364	N	GLN	A	684	7.540	-29.566	-10.432	1.00	95.48	N
ATOM	5365	CA	GLN	A	684	8.089	-29.385	-11.763	1.00	97.39	C
ATOM	5366	C	GLN	A	684	9.556	-28.998	-11.699	1.00	98.26	C
ATOM	5367	O	GLN	A	684	10.389	-29.658	-12.302	1.00	97.69	O
ATOM	5368	CB	GLN	A	684	7.297	-28.335	-12.543	1.00	131.41	C
ATOM	5369	CG	GLN	A	684	6.057	-28.874	-13.211	1.00	130.97	C
ATOM	5370	CD	GLN	A	684	6.369	-30.047	-14.111	1.00	129.88	C
ATOM	5371	NE2	GLN	A	684	5.974	-31.241	-13.694	1.00	126.61	N
ATOM	5372	OE1	GLN	A	684	6.974	-29.882	-15.166	1.00	131.77	O
ATOM	5373	N	MET	A	685	9.865	-27.944	-10.948	1.00	114.98	N
ATOM	5374	CA	MET	A	685	11.202	-27.367	-10.913	1.00	116.94	C
ATOM	5375	C	MET	A	685	12.170	-28.032	-9.950	1.00	114.51	C
ATOM	5376	O	MET	A	685	13.368	-27.811	-10.026	1.00	115.25	O
ATOM	5377	CB	MET	A	685	11.115	-25.894	-10.574	1.00	106.98	C
ATOM	5378	CG	MET	A	685	10.477	-25.081	-11.632	1.00	111.53	C
ATOM	5379	SD	MET	A	685	10.270	-23.415	-11.040	1.00	114.40	S
ATOM	5380	CE	MET	A	685	11.951	-22.900	-10.764	1.00	110.17	C
ATOM	5381	N	PHE	A	686	11.668	-28.834	-9.030	1.00	129.08	N
ATOM	5382	CA	PHE	A	686	12.558	-29.493	-8.088	1.00	126.79	C
ATOM	5383	C	PHE	A	686	12.749	-30.959	-8.461	1.00	124.23	C
ATOM	5384	O	PHE	A	686	13.830	-31.372	-8.874	1.00	124.98	O
ATOM	5385	CB	PHE	A	686	12.028	-29.350	-6.659	1.00	127.26	C
ATOM	5386	CG	PHE	A	686	12.858	-30.049	-5.635	1.00	124.69	C
ATOM	5387	CD1	PHE	A	686	14.122	-29.606	-5.335	1.00	123.29	C
ATOM	5388	CD2	PHE	A	686	12.370	-31.149	-4.971	1.00	121.04	C
ATOM	5389	CE1	PHE	A	686	14.875	-30.250	-4.404	1.00	121.00	C
ATOM	5390	CE2	PHE	A	686	13.120	-31.792	-4.037	1.00	118.84	C
ATOM	5391	CZ	PHE	A	686	14.370	-31.347	-3.752	1.00	119.42	C
ATOM	5392	N	LEU	A	687	11.684	-31.736	-8.327	1.00	144.98	N
ATOM	5393	CA	LEU	A	687	11.727	-33.163	-8.609	1.00	142.14	C
ATOM	5394	C	LEU	A	687	12.121	-33.522	-10.054	1.00	143.09	C
ATOM	5395	O	LEU	A	687	12.782	-34.536	-10.294	1.00	141.15	O
ATOM	5396	CB	LEU	A	687	10.372	-33.786	-8.273	1.00	117.59	C
ATOM	5397	CG	LEU	A	687	10.084	-34.057	-6.808	1.00	114.52	C
ATOM	5398	CD1	LEU	A	687	8.934	-35.030	-6.681	1.00	110.84	C
ATOM	5399	CD2	LEU	A	687	11.322	-34.619	-6.179	1.00	112.59	C
ATOM	5400	N	LEU	A	688	11.703	-32.700	-11.013	1.00	103.01	N
ATOM	5401	CA	LEU	A	688	11.904	-32.994	-12.428	1.00	104.36	C
ATOM	5402	C	LEU	A	688	12.951	-32.067	-13.051	1.00	108.42	C
ATOM	5403	O	LEU	A	688	13.342	-32.223	-14.199	1.00	110.26	O
ATOM	5404	CB	LEU	A	688	10.574	-32.871	-13.175	1.00	95.69	C
ATOM	5405	CG	LEU	A	688	9.403	-33.771	-12.754	1.00	92.26	C
ATOM	5406	CD1	LEU	A	688	8.162	-33.504	-13.621	1.00	93.64	C
ATOM	5407	CD2	LEU	A	688	9.752	-35.256	-12.783	1.00	89.40	C
ATOM	5408	N	ASN	A	689	13.393	-31.093	-12.272	1.00	169.75	N
ATOM	5409	CA	ASN	A	689	14.397	-30.132	-12.708	1.00	172.52	C
ATOM	5410	C	ASN	A	689	14.130	-29.455	-14.049	1.00	175.24	C
ATOM	5411	O	ASN	A	689	15.062	-29.156	-14.780	1.00	177.25	O
ATOM	5412	CB	ASN	A	689	15.779	-30.770	-12.731	1.00	137.96	C
ATOM	5413	CG	ASN	A	689	16.872	-29.755	-12.964	1.00	140.46	C
ATOM	5414	ND2	ASN	A	689	18.044	-30.228	-13.353	1.00	141.05	N
ATOM	5415	OD1	ASN	A	689	16.664	-28.553	-12.804	1.00	142.35	O
ATOM	5416	N	GLN	A	690	12.867	-29.192	-14.365	1.00	122.83	N
ATOM	5417	CA	GLN	A	690	12.526	-28.467	-15.587	1.00	125.68	C
ATOM	5418	C	GLN	A	690	11.929	-27.086	-15.344	1.00	127.79	C
ATOM	5419	O	GLN	A	690	10.906	-26.951	-14.694	1.00	126.84	O
ATOM	5420	CB	GLN	A	690	11.564	-29.289	-16.417	1.00	189.36	C
ATOM	5421	CG	GLN	A	690	12.133	-30.603	-16.813	1.00	189.65	C
ATOM	5422	CD	GLN	A	690	11.058	-31.543	-17.216	1.00	190.85	C
ATOM	5423	NE2	GLN	A	690	11.388	-32.486	-18.087	1.00	190.82	N
ATOM	5424	OE1	GLN	A	690	9.920	-31.418	-16.763	1.00	189.60	O

ATOM	5425	N	TYR	A	691	12.552	-26.062	-15.907	1.00146.61	N
ATOM	5426	CA	TYR	A	691	12.131	-24.709	-15.620	1.00149.64	C
ATOM	5427	C	TYR	A	691	12.343	-23.729	-16.774	1.00153.86	C
ATOM	5428	O	TYR	A	691	13.408	-23.682	-17.385	1.00153.86	O
ATOM	5429	CB	TYR	A	691	12.864	-24.232	-14.383	1.00144.43	C
ATOM	5430	CG	TYR	A	691	14.332	-24.024	-14.608	1.00142.09	C
ATOM	5431	CD1	TYR	A	691	15.209	-25.096	-14.665	1.00141.37	C
ATOM	5432	CD2	TYR	A	691	14.845	-22.745	-14.757	1.00140.98	C
ATOM	5433	CE1	TYR	A	691	16.571	-24.895	-14.874	1.00139.69	C
ATOM	5434	CE2	TYR	A	691	16.194	-22.528	-14.962	1.00139.22	C
ATOM	5435	CZ	TYR	A	691	17.057	-23.602	-15.024	1.00138.43	C
ATOM	5436	OH	TYR	A	691	18.401	-23.359	-15.232	1.00137.18	O
ATOM	5437	N	ASP	A	692	11.311	-22.943	-17.059	1.00145.09	N
ATOM	5438	CA	ASP	A	692	11.336	-21.964	-18.144	1.00148.97	C
ATOM	5439	C	ASP	A	692	12.502	-20.985	-17.990	1.00146.90	C
ATOM	5440	O	ASP	A	692	12.478	-20.102	-17.137	1.00145.19	O
ATOM	5441	CB	ASP	A	692	9.998	-21.217	-18.205	1.00164.78	C
ATOM	5442	CG	ASP	A	692	9.812	-20.447	-19.496	1.00169.19	C
ATOM	5443	OD1	ASP	A	692	8.734	-20.559	-20.113	1.00169.04	O
ATOM	5444	OD2	ASP	A	692	10.742	-19.720	-19.894	1.00170.64	O1-
ATOM	5445	N	GLN	A	693	13.508	-21.143	-18.847	1.00135.45	N
ATOM	5446	CA	GLN	A	693	14.794	-20.459	-18.699	1.00133.36	C
ATOM	5447	C	GLN	A	693	14.794	-18.952	-18.982	1.00135.63	C
ATOM	5448	O	GLN	A	693	15.779	-18.262	-18.698	1.00133.94	O
ATOM	5449	CB	GLN	A	693	15.857	-21.163	-19.544	1.00148.28	C
ATOM	5450	CG	GLN	A	693	15.715	-22.672	-19.531	1.00148.65	C
ATOM	5451	CD	GLN	A	693	16.996	-23.371	-19.140	1.00147.93	C
ATOM	5452	NE2	GLN	A	693	16.909	-24.681	-18.907	1.00149.43	N
ATOM	5453	OE1	GLN	A	693	18.053	-22.744	-19.045	1.00147.61	O
ATOM	5454	N	ASP	A	694	13.694	-18.445	-19.536	1.00157.78	N
ATOM	5455	CA	ASP	A	694	13.537	-17.011	-19.772	1.00161.26	C
ATOM	5456	C	ASP	A	694	12.800	-16.353	-18.605	1.00160.91	C
ATOM	5457	O	ASP	A	694	12.463	-15.173	-18.665	1.00165.02	O
ATOM	5458	CB	ASP	A	694	12.784	-16.751	-21.085	1.00204.27	C
ATOM	5459	CG	ASP	A	694	13.541	-17.245	-22.308	1.00205.22	C
ATOM	5460	OD1	ASP	A	694	14.735	-16.904	-22.461	1.00203.96	O
ATOM	5461	OD2	ASP	A	694	12.934	-17.977	-23.120	1.00210.48	O1-
ATOM	5462	N	LEU	A	695	12.545	-17.131	-17.552	1.00148.02	N
ATOM	5463	CA	LEU	A	695	11.863	-16.652	-16.347	1.00147.26	C
ATOM	5464	C	LEU	A	695	12.757	-16.794	-15.124	1.00141.60	C
ATOM	5465	O	LEU	A	695	12.872	-15.885	-14.303	1.00141.43	O
ATOM	5466	CB	LEU	A	695	10.574	-17.445	-16.108	1.00100.16	C
ATOM	5467	CG	LEU	A	695	9.366	-17.070	-16.959	1.00106.09	C
ATOM	5468	CD1	LEU	A	695	8.061	-17.528	-16.336	1.00106.81	C
ATOM	5469	CD2	LEU	A	695	9.372	-15.578	-17.121	1.00109.81	C
ATOM	5470	N	PHE	A	696	13.392	-17.955	-15.019	1.00132.51	N
ATOM	5471	CA	PHE	A	696	14.202	-18.294	-13.866	1.00127.26	C
ATOM	5472	C	PHE	A	696	15.698	-18.422	-14.205	1.00124.97	C
ATOM	5473	O	PHE	A	696	16.136	-18.179	-15.324	1.00127.43	O
ATOM	5474	CB	PHE	A	696	13.701	-19.614	-13.267	1.00102.80	C
ATOM	5475	CG	PHE	A	696	12.242	-19.604	-12.859	1.00104.59	C
ATOM	5476	CD1	PHE	A	696	11.433	-20.691	-13.130	1.00106.40	C
ATOM	5477	CD2	PHE	A	696	11.693	-18.532	-12.182	1.00105.47	C
ATOM	5478	CE1	PHE	A	696	10.113	-20.703	-12.763	1.00108.69	C
ATOM	5479	CE2	PHE	A	696	10.356	-18.546	-11.803	1.00107.79	C
ATOM	5480	CZ	PHE	A	696	9.569	-19.635	-12.102	1.00109.32	C
ATOM	5481	N	GLU	A	697	16.473	-18.789	-13.198	1.00137.89	N
ATOM	5482	CA	GLU	A	697	17.856	-19.188	-13.347	1.00135.20	C
ATOM	5483	C	GLU	A	697	18.038	-20.089	-12.136	1.00130.83	C
ATOM	5484	O	GLU	A	697	17.628	-19.739	-11.032	1.00129.24	O
ATOM	5485	CB	GLU	A	697	18.791	-17.966	-13.327	1.00193.74	C

ATOM	5486	CG	GLU	A	697	19.785	-17.872	-12.158	1.00190.87	C
ATOM	5487	CD	GLU	A	697	21.050	-18.694	-12.366	1.00192.11	C
ATOM	5488	OE1	GLU	A	697	21.024	-19.620	-13.205	1.00193.95	O
ATOM	5489	OE2	GLU	A	697	22.068	-18.415	-11.689	1.00189.46	O1-
ATOM	5490	N	GLN	A	698	18.578	-21.281	-12.334	1.00143.23	N
ATOM	5491	CA	GLN	A	698	18.733	-22.188	-11.212	1.00139.83	C
ATOM	5492	C	GLN	A	698	19.983	-21.822	-10.452	1.00136.48	C
ATOM	5493	O	GLN	A	698	21.054	-22.354	-10.718	1.00136.45	O
ATOM	5494	CB	GLN	A	698	18.819	-23.626	-11.682	1.00116.99	C
ATOM	5495	CG	GLN	A	698	19.268	-24.578	-10.619	1.00114.29	C
ATOM	5496	CD	GLN	A	698	19.377	-25.995	-11.133	1.00121.80	C
ATOM	5497	NE2	GLN	A	698	20.606	-26.457	-11.347	1.00121.91	N
ATOM	5498	OE1	GLN	A	698	18.370	-26.667	-11.346	1.00124.53	O
ATOM	5499	N	VAL	A	699	19.842	-20.893	-9.514	1.00140.67	N
ATOM	5500	CA	VAL	A	699	20.963	-20.439	-8.708	1.00137.65	C
ATOM	5501	C	VAL	A	699	21.600	-21.595	-7.964	1.00134.91	C
ATOM	5502	O	VAL	A	699	22.807	-21.764	-8.000	1.00134.01	O
ATOM	5503	CB	VAL	A	699	20.541	-19.398	-7.681	1.00104.62	C
ATOM	5504	CG1	VAL	A	699	21.656	-19.175	-6.718	1.00101.44	C
ATOM	5505	CG2	VAL	A	699	20.166	-18.114	-8.353	1.00108.25	C
ATOM	5506	N	THR	A	700	20.810	-22.404	-7.276	1.00130.38	N
ATOM	5507	CA	THR	A	700	21.457	-23.509	-6.561	1.00128.68	C
ATOM	5508	C	THR	A	700	20.776	-24.836	-6.889	1.00131.17	C
ATOM	5509	O	THR	A	700	19.561	-24.876	-7.085	1.00132.73	O
ATOM	5510	CB	THR	A	700	21.511	-23.270	-5.021	1.00148.75	C
ATOM	5511	CG2	THR	A	700	22.692	-23.984	-4.400	1.00146.47	C
ATOM	5512	OG1	THR	A	700	21.644	-21.873	-4.749	1.00152.43	O
ATOM	5513	N	ASN	A	701	21.558	-25.913	-6.947	1.00131.16	N
ATOM	5514	CA	ASN	A	701	21.035	-27.236	-7.283	1.00134.57	C
ATOM	5515	C	ASN	A	701	21.634	-28.333	-6.407	1.00134.17	C
ATOM	5516	O	ASN	A	701	22.819	-28.627	-6.496	1.00134.54	O
ATOM	5517	CB	ASN	A	701	21.308	-27.538	-8.761	1.00159.13	C
ATOM	5518	CG	ASN	A	701	20.648	-28.823	-9.240	1.00163.79	C
ATOM	5519	ND2	ASN	A	701	20.605	-29.008	-10.556	1.00168.21	N
ATOM	5520	OD1	ASN	A	701	20.196	-29.641	-8.442	1.00163.74	O
ATOM	5521	N	ASP	A	702	20.816	-28.941	-5.561	1.00113.11	N
ATOM	5522	CA	ASP	A	702	21.276	-30.032	-4.710	1.00113.78	C
ATOM	5523	C	ASP	A	702	20.121	-31.008	-4.552	1.00116.92	C
ATOM	5524	O	ASP	A	702	18.962	-30.603	-4.552	1.00117.02	O
ATOM	5525	CB	ASP	A	702	21.740	-29.487	-3.342	1.00164.66	C
ATOM	5526	CG	ASP	A	702	22.486	-30.527	-2.483	1.00169.07	C
ATOM	5527	OD1	ASP	A	702	22.147	-31.727	-2.537	1.00173.89	O
ATOM	5528	OD2	ASP	A	702	23.408	-30.133	-1.729	1.00165.60	O1-
ATOM	5529	N	THR	A	703	20.432	-32.290	-4.433	1.00128.82	N
ATOM	5530	CA	THR	A	703	19.425	-33.294	-4.117	1.00129.00	C
ATOM	5531	C	THR	A	703	18.577	-32.896	-2.904	1.00126.23	C
ATOM	5532	O	THR	A	703	17.472	-33.407	-2.701	1.00125.70	O
ATOM	5533	CB	THR	A	703	20.110	-34.624	-3.826	1.00121.07	C
ATOM	5534	CG2	THR	A	703	19.152	-35.606	-3.169	1.00118.95	C
ATOM	5535	OG1	THR	A	703	20.595	-35.169	-5.054	1.00123.71	O
ATOM	5536	N	ARG	A	704	19.111	-31.969	-2.112	1.00128.07	N
ATOM	5537	CA	ARG	A	704	18.514	-31.562	-0.856	1.00125.28	C
ATOM	5538	C	ARG	A	704	17.628	-30.342	-1.034	1.00122.91	C
ATOM	5539	O	ARG	A	704	16.695	-30.128	-0.256	1.00121.39	O
ATOM	5540	CB	ARG	A	704	19.615	-31.254	0.149	1.00154.65	C
ATOM	5541	CG	ARG	A	704	20.574	-32.396	0.361	1.00157.97	C
ATOM	5542	CD	ARG	A	704	20.836	-32.583	1.830	1.00157.37	C
ATOM	5543	NE	ARG	A	704	21.125	-33.969	2.165	1.00159.72	N
ATOM	5544	CZ	ARG	A	704	20.510	-34.643	3.132	1.00155.83	C
ATOM	5545	NH1	ARG	A	704	19.575	-34.052	3.867	1.00147.73	N1+
ATOM	5546	NH2	ARG	A	704	20.832	-35.909	3.365	1.00156.66	N

ES 2 587 302 T3

ATOM	5547	N	ALA	A	705	17.907	-29.548	-2.063	1.00113.35	N
ATOM	5548	CA	ALA	A	705	17.169	-28.308	-2.275	1.00111.79	C
ATOM	5549	C	ALA	A	705	17.655	-27.557	-3.493	1.00112.62	C
ATOM	5550	O	ALA	A	705	18.796	-27.697	-3.891	1.00112.54	O
ATOM	5551	CB	ALA	A	705	17.295	-27.426	-1.064	1.00110.53	C
ATOM	5552	N	LYS	A	706	16.789	-26.742	-4.074	1.00 89.83	N
ATOM	5553	CA	LYS	A	706	17.180	-25.894	-5.193	1.00 90.66	C
ATOM	5554	C	LYS	A	706	16.858	-24.458	-4.889	1.00 88.91	C
ATOM	5555	O	LYS	A	706	16.099	-24.165	-3.981	1.00 87.51	O
ATOM	5556	CB	LYS	A	706	16.444	-26.302	-6.470	1.00 78.89	C
ATOM	5557	CG	LYS	A	706	16.612	-27.773	-6.827	1.00 81.76	C
ATOM	5558	CD	LYS	A	706	16.343	-28.073	-8.283	1.00 86.85	C
ATOM	5559	CE	LYS	A	706	16.696	-29.500	-8.543	1.00 89.61	C
ATOM	5560	NZ	LYS	A	706	16.373	-29.886	-9.917	1.00 92.42	N1+
ATOM	5561	N	ILE	A	707	17.415	-23.546	-5.657	1.00 90.71	N
ATOM	5562	CA	ILE	A	707	17.054	-22.150	-5.486	1.00 90.43	C
ATOM	5563	C	ILE	A	707	17.032	-21.536	-6.857	1.00 93.58	C
ATOM	5564	O	ILE	A	707	18.013	-21.667	-7.595	1.00 93.81	O
ATOM	5565	CB	ILE	A	707	18.086	-21.375	-4.625	1.00 99.37	C
ATOM	5566	CG1	ILE	A	707	18.254	-21.999	-3.244	1.00 95.76	C
ATOM	5567	CG2	ILE	A	707	17.712	-19.898	-4.497	1.00100.52	C
ATOM	5568	CD1	ILE	A	707	19.167	-21.197	-2.352	1.00 99.86	C
ATOM	5569	N	TYR	A	708	15.931	-20.882	-7.205	1.00105.65	N
ATOM	5570	CA	TYR	A	708	15.865	-20.214	-8.498	1.00109.28	C
ATOM	5571	C	TYR	A	708	15.763	-18.727	-8.269	1.00110.93	C
ATOM	5572	O	TYR	A	708	15.553	-18.295	-7.148	1.00109.47	O
ATOM	5573	CB	TYR	A	708	14.674	-20.713	-9.319	1.00 95.75	C
ATOM	5574	CG	TYR	A	708	14.775	-22.172	-9.705	1.00 95.15	C
ATOM	5575	CD1	TYR	A	708	14.605	-23.166	-8.756	1.00 92.69	C
ATOM	5576	CD2	TYR	A	708	15.055	-22.558	-11.000	1.00 97.22	C
ATOM	5577	CE1	TYR	A	708	14.710	-24.495	-9.080	1.00 93.02	C
ATOM	5578	CE2	TYR	A	708	15.159	-23.889	-11.328	1.00 97.58	C
ATOM	5579	CZ	TYR	A	708	14.981	-24.851	-10.363	1.00 95.84	C
ATOM	5580	OH	TYR	A	708	15.084	-26.183	-10.675	1.00105.45	O
ATOM	5581	N	ARG	A	709	15.924	-17.941	-9.326	1.00109.46	N
ATOM	5582	CA	ARG	A	709	15.848	-16.482	-9.226	1.00112.72	C
ATOM	5583	C	ARG	A	709	15.067	-15.898	-10.412	1.00118.53	C
ATOM	5584	O	ARG	A	709	15.100	-16.434	-11.513	1.00119.72	O
ATOM	5585	CB	ARG	A	709	17.254	-15.881	-9.119	1.00121.23	C
ATOM	5586	CG	ARG	A	709	17.353	-14.434	-9.510	1.00126.00	C
ATOM	5587	CD	ARG	A	709	18.767	-14.086	-9.955	1.00126.21	C
ATOM	5588	NE	ARG	A	709	18.764	-12.981	-10.912	1.00137.13	N
ATOM	5589	CZ	ARG	A	709	19.377	-12.998	-12.094	1.00137.42	C
ATOM	5590	NH1	ARG	A	709	20.068	-14.067	-12.472	1.00133.08	N1+
ATOM	5591	NH2	ARG	A	709	19.299	-11.941	-12.897	1.00142.64	N
ATOM	5592	N	LEU	A	710	14.324	-14.825	-10.190	1.00147.24	N
ATOM	5593	CA	LEU	A	710	13.546	-14.262	-11.282	1.00153.54	C
ATOM	5594	C	LEU	A	710	14.485	-13.422	-12.130	1.00156.48	C
ATOM	5595	O	LEU	A	710	15.427	-12.845	-11.592	1.00155.40	O
ATOM	5596	CB	LEU	A	710	12.397	-13.398	-10.757	1.00106.46	C
ATOM	5597	CG	LEU	A	710	11.263	-14.028	-9.950	1.00105.58	C
ATOM	5598	CD1	LEU	A	710	10.240	-12.964	-9.559	1.00111.57	C
ATOM	5599	CD2	LEU	A	710	10.605	-15.153	-10.725	1.00105.63	C
ATOM	5600	N	LYS	A	711	14.241	-13.356	-13.441	1.00117.67	N
ATOM	5601	CA	LYS	A	711	15.037	-12.497	-14.331	1.00121.40	C
ATOM	5602	C	LYS	A	711	14.321	-11.202	-14.759	1.00129.26	C
ATOM	5603	O	LYS	A	711	13.754	-11.103	-15.845	1.00133.81	O
ATOM	5604	CB	LYS	A	711	15.528	-13.289	-15.543	1.00144.85	C
ATOM	5605	CG	LYS	A	711	16.386	-14.506	-15.184	1.00140.44	C
ATOM	5606	CD	LYS	A	711	16.914	-15.231	-16.428	1.00141.02	C
ATOM	5607	CE	LYS	A	711	17.942	-14.386	-17.186	1.00144.33	C

ATOM	5608	NZ	LYS	A	711	18.459	-15.054	-18.416	1.00145.28	N1+
TER	5609		LYS	A	711					
HETATM	5610	MG	MG	A	725	7.238	-20.902	20.363	1.00 78.14	MG
HETATM	5611	MG	MG	A	726	18.551	-8.728	7.448	1.00 65.51	MG
HETATM	5612	O	HOH	A	901	8.245	-15.698	17.364	1.00 38.74	O
ATOM	5613	N	GLY	B	10	6.225	-32.247	17.123	0.00137.40	N
ATOM	5614	CA	GLY	B	10	4.949	-31.771	17.625	0.00136.00	C
ATOM	5615	C	GLY	B	10	5.004	-30.350	18.175	1.00139.91	C
ATOM	5616	O	GLY	B	10	4.295	-29.457	17.713	1.00139.47	O
ATOM	5617	N	ASP	B	11	5.843	-30.143	19.180	1.00 95.22	N
ATOM	5618	CA	ASP	B	11	5.984	-28.830	19.814	1.00 99.36	C
ATOM	5619	C	ASP	B	11	6.595	-27.678	19.029	1.00101.34	C
ATOM	5620	O	ASP	B	11	7.072	-26.739	19.652	1.00102.01	O
ATOM	5621	CB	ASP	B	11	6.863	-28.969	21.035	1.00100.55	C
ATOM	5622	CG	ASP	B	11	6.089	-29.278	22.244	1.00100.15	C
ATOM	5623	OD1	ASP	B	11	5.562	-28.326	22.849	1.00103.83	O
ATOM	5624	OD2	ASP	B	11	6.004	-30.474	22.581	1.00 96.33	O1-
ATOM	5625	N	GLN	B	12	6.619	-27.720	17.703	1.00 89.48	N
ATOM	5626	CA	GLN	B	12	7.335	-26.673	16.991	1.00 91.72	C
ATOM	5627	C	GLN	B	12	6.461	-25.860	16.041	1.00101.19	C
ATOM	5628	O	GLN	B	12	5.528	-26.387	15.456	1.00 98.32	O
ATOM	5629	CB	GLN	B	12	8.570	-27.237	16.305	1.00161.37	C
ATOM	5630	CG	GLN	B	12	9.614	-27.655	17.294	1.00147.52	C
ATOM	5631	CD	GLN	B	12	10.747	-28.386	16.647	1.00138.34	C
ATOM	5632	NE2	GLN	B	12	11.196	-27.879	15.504	1.00140.24	N
ATOM	5633	OE1	GLN	B	12	11.227	-29.399	17.165	1.00130.01	O
ATOM	5634	N	ASN	B	13	6.758	-24.564	15.915	1.00 84.63	N
ATOM	5635	CA	ASN	B	13	5.990	-23.672	15.071	1.00 86.29	C
ATOM	5636	C	ASN	B	13	6.239	-24.000	13.612	1.00 86.87	C
ATOM	5637	O	ASN	B	13	6.857	-23.231	12.878	1.00 87.48	O
ATOM	5638	CB	ASN	B	13	6.357	-22.226	15.354	1.00 86.64	C
ATOM	5639	CG	ASN	B	13	5.266	-21.272	14.969	1.00 89.79	C
ATOM	5640	ND2	ASN	B	13	4.763	-20.521	15.936	1.00 93.82	N
ATOM	5641	OD1	ASN	B	13	4.864	-21.203	13.813	1.00 90.59	O
ATOM	5642	N	ALA	B	14	5.762	-25.166	13.206	1.00101.34	N
ATOM	5643	CA	ALA	B	14	5.931	-25.642	11.851	1.00 99.99	C
ATOM	5644	C	ALA	B	14	4.564	-26.041	11.319	1.00 97.38	C
ATOM	5645	O	ALA	B	14	3.577	-26.074	12.066	1.00 97.56	O
ATOM	5646	CB	ALA	B	14	6.893	-26.842	11.813	1.00267.77	C
ATOM	5647	N	THR	B	15	4.520	-26.356	10.035	1.00130.89	N
ATOM	5648	CA	THR	B	15	3.304	-26.829	9.408	1.00129.51	C
ATOM	5649	C	THR	B	15	3.222	-28.348	9.458	1.00121.11	C
ATOM	5650	O	THR	B	15	4.237	-29.024	9.513	1.00116.50	O
ATOM	5651	CB	THR	B	15	3.215	-26.349	7.962	1.00 95.48	C
ATOM	5652	CG2	THR	B	15	2.079	-27.058	7.248	1.00 97.08	C
ATOM	5653	OG1	THR	B	15	2.998	-24.929	7.954	1.00101.80	O
TER	5654		THR	B	15					
HETATM	5655	N	PPN	B	16	1.996	-28.853	9.534	1.00118.43	N
HETATM	5656	CA	PPN	B	16	1.646	-30.214	9.225	1.00112.66	C
HETATM	5657	C	PPN	B	16	0.212	-30.058	8.834	1.00117.55	C
HETATM	5658	O	PPN	B	16	-0.329	-28.966	9.142	1.00118.14	O
HETATM	5659	CB	PPN	B	16	1.690	-31.092	10.416	1.00111.33	C
HETATM	5660	CG	PPN	B	16	0.440	-30.774	11.156	1.00114.71	C
HETATM	5661	CD1	PPN	B	16	-0.703	-31.540	11.007	1.00114.68	C
HETATM	5662	CD2	PPN	B	16	0.424	-29.671	11.983	1.00119.20	C
HETATM	5663	CE1	PPN	B	16	-1.860	-31.200	11.690	1.00119.79	C
HETATM	5664	CE2	PPN	B	16	-0.726	-29.330	12.671	1.00123.57	C
HETATM	5665	CZ	PPN	B	16	-1.873	-30.092	12.528	1.00124.26	C
HETATM	5666	N1	PPN	B	16	-3.040	-29.712	13.271	1.00130.64	N
HETATM	5667	O1	PPN	B	16	-3.089	-28.598	13.773	1.00135.59	O
HETATM	5668	O2	PPN	B	16	-4.036	-30.532	13.438	1.00131.91	O

ES 2 587 302 T3

ATOM	5669	N	GLY B	17	-0.437	-31.032	8.185	1.00114.32	N
ATOM	5670	CA	GLY B	17	0.188	-32.283	7.792	0.00113.36	C
ATOM	5671	C	GLY B	17	-0.751	-33.174	6.997	0.00120.47	C
ATOM	5672	O	GLY B	17	-0.916	-32.995	5.792	0.00122.60	O
CONECT	5649	5655							
CONECT	5655	5649	5656						
CONECT	5656	5655	5657	5659					
CONECT	5657	5656							
CONECT	5657	5658							
CONECT	5657	5658							
CONECT	5657	5669							
CONECT	5658	5657							
CONECT	5658	5657							
CONECT	5659	5656	5660						
CONECT	5660	5659							
CONECT	5660	5661							
CONECT	5660	5661							
CONECT	5660	5661							
CONECT	5660	5662							
CONECT	5660	5662							
CONECT	5660	5662							
CONECT	5660	5662							
CONECT	5660	5662							
CONECT	5661	5660							
CONECT	5661	5660							
CONECT	5661	5660							
CONECT	5661	5660							
CONECT	5661	5663							
CONECT	5661	5663							
CONECT	5661	5663							
CONECT	5661	5663							
CONECT	5662	5660							
CONECT	5662	5660							
CONECT	5662	5660							
CONECT	5662	5660							
CONECT	5662	5664							
CONECT	5662	5664							
CONECT	5662	5664							
CONECT	5662	5664							
CONECT	5663	5661							
CONECT	5663	5661							
CONECT	5663	5661							
CONECT	5663	5665							
CONECT	5663	5665							
CONECT	5663	5665							
CONECT	5663	5665							
CONECT	5664	5662							
CONECT	5664	5662							
CONECT	5664	5662							
CONECT	5664	5662							
CONECT	5664	5665							
CONECT	5664	5665							
CONECT	5664	5665							
CONECT	5664	5665							
CONECT	5665	5663							
CONECT	5665	5663							
CONECT	5665	5663							
CONECT	5665	5664							
CONECT	5665	5664							

CONNECT 5665 5664
CONNECT 5665 5664
CONNECT 5665 5666
CONNECT 5666 5665
CONNECT 5666 5667
CONNECT 5666 5667
CONNECT 5666 5667
CONNECT 5666 5667
CONNECT 5666 5668
CONNECT 5666 5668
CONNECT 5666 5668
CONNECT 5666 5668
CONNECT 5667 5666
CONNECT 5667 5666
CONNECT 5667 5666
CONNECT 5667 5666
CONNECT 5668 5666
CONNECT 5668 5666
CONNECT 5668 5666
CONNECT 5668 5666
CONNECT 5669 5657
FIN