

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 636 980**

51 Int. Cl.:

**C07K 14/35** (2006.01)

**C12N 15/31** (2006.01)

**C12N 15/52** (2006.01)

**G01N 33/50** (2006.01)

**A61K 31/00** (2006.01)

12

## TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **28.09.2005 PCT/EP2005/054893**

87 Fecha y número de publicación internacional: **06.04.2006 WO06035051**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **28.09.2005 E 05794520 (6)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **21.06.2017 EP 1797115**

54 Título: **Un dominio de unión de ATP sintasa bacteriana**

30 Prioridad:

**28.09.2004 EP 04104720**

**20.10.2004 US 620500 P**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la  
traducción de la patente:  
**10.10.2017**

73 Titular/es:

**JANSSEN PHARMACEUTICA NV (100.0%)**

**TURNHOUTSEWEG 30**

**2340 BEERSE, BE**

72 Inventor/es:

**ANDRIES, K.J.L.M.;**

**GÖHLMANN, HINRICH W.H.;**

**NEEFS, J.-M.E.F.M.;**

**VERHASSELT, PETER K.M.;**

**WINKLER, JOHANN.;**

**DE JONGE, MARC, RENÉ y**

**KOYMANS, LUCIEN MARIA HENRICUS,**

74 Agente/Representante:

**LEHMANN NOVO, María Isabel**

ES 2 636 980 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

Un dominio de unión de ATP sintasa bacteriana

Esta invención proporciona una proteína atpE mutante aislada y partiendo de dicha proteína atpE mutante la identificación de un dominio de unión de ATPasa. Esta invención también proporciona ácidos nucleicos, vectores, células hospedadoras, composiciones farmacéuticas y artículos de fabricación relacionados. Esta invención proporciona además métodos para determinar si un compuesto de ensayo interactúa con una proteína atpE, es decir con el dominio de unión de ATPasa de la presente invención, así como composiciones farmacéuticas que comprenden dicho compuesto de prueba, en particular como antimicrobianos, más particularmente como un agente antimicobacteriano, aún más particularmente para tratar la tuberculosis en un sujeto.

### Antecedentes de la invención

Después del SIDA, la tuberculosis (TB) es la principal causa de mortalidad en adultos (2-3 millones de muertes al año) en el mundo y es un impedimento crítico para aliviar la pobreza y el sufrimiento en el mundo (1). Factores que contribuyen al resurgimiento de la enfermedad incluyen dificultades en poner en práctica programas anti-TB en muchos países, el drástico incremento en el número de individuos inmunosuprimidos – debido principalmente a la infección por VIH – y el movimiento de personas a través de y desde zonas en las que la TB es endémica. Las epidemias de TB y VIH se alimentan mutuamente en personas coinfectadas- actualmente 11 millones de adultos – incrementando tanto la morbilidad como la mortalidad (2, 3). Además, la TB es la principal causa de muerte en personas infectadas con VIH (4).

Aunque los regímenes farmacológicos anti-TB de primera línea pueden alcanzar grados de eficacia de más de 90%, su complejidad puede conducir a un cumplimiento terapéutico pobre cuando no están disponibles un soporte médico y programas de tratamiento de TB adecuados y, a su vez, a la aparición de resistencia (5). Las cepas resistentes a múltiples fármacos (MDR) de TB complican sustancialmente el tratamiento (6). The Global Alliance for TB Drug Development ha recomendado que cualquier nuevo tratamiento debe ofrecer al menos una de las tres ventajas siguientes sobre las terapias existentes: reducir o simplificar el tratamiento de la TB; incrementar la eficacia contra MDR-TB; y mejorar el tratamiento de la forma latente de infección por TB. Este nuevo fármaco mejoraría mucho el cumplimiento terapéutico de los pacientes, reduciendo de ese modo el coste de los programas de tratamiento de TB como la estrategia de curso corto de tratamiento directamente observado de la (DOTs) de la Organización Mundial de la Salud (OMS) (7).

Los candidatos anti-TB más nuevos actualmente en desarrollo preclínico y clínico tienden a proceder bien de familias de fármacos existentes (tales como moxifloxacina) o bien ser análogos de fármacos de primera línea tales como MJH-98-1-81 (procedente de isoniazida), las oxazolidinonas y rifapentina (un análogo cercano de rifampina) (8). Aunque estos nuevos fármacos pueden ser potentes, los compuestos análogos solo proporcionan soluciones temporales a la resistencia (9), ya que se basan en el mismo mecanismo de acción que las familias de fármacos existentes.

Los antibióticos en general inhiben habitualmente la replicación bacteriana al inhibir el metabolismo bacteriano a través de un mecanismo específico. Por ejemplo, la isoniazida interfiere con la maquinaria enzimática que sintetiza ácidos micólicos, componentes necesarios de la pared celular, mientras que la rifampicina interfiere con la maquinaria bacteriana para transcribir ARN a partir de ADN. Según esto, es interesante explorar nuevos métodos para identificar compuestos anti-TB que se dirijan a diferentes aspectos micobacterianos específicos del crecimiento y la replicación celular en comparación con los agentes conocidos.

### Sumario de la invención

Esta invención proporciona proteínas atpE mutantes aisladas, en particular codificadas por las secuencias de aminoácidos seleccionadas de (SEQ ID N° 1), (SEQ ID N° 2), (SEQ ID N° 3), (SEQ ID N° 4) y (SEQ ID N° 5), un ácido nucleico aislado que codifica dichas proteínas atpE mutantes, en particular seleccionado del grupo que consiste en (SEQ ID N° 6), (SEQ ID N° 7), (SEQ ID N° 8), (SEQ ID N° 9) y (SEQ ID N° 10) y un vector que comprende el presente ácido nucleico. En una realización particular, la proteína atpE mutante es codificada por SEQ ID N° 2 y la secuencia del ácido nucleico aislado que codifica dicha proteína consiste en SEQ ID N° 7.

Esta invención proporciona además un sistema hospedador-vector que comprende una célula que tiene en la misma el presente vector de expresión.

Esta invención proporciona además una célula aislada que comprende una proteína atpE mutante, en donde dicha proteína induce resistencia antimicrobiana en la célula.

Esta invención proporciona además un método para identificar un compuesto antimicrobiano, comprendiendo dicho método las etapas de

(a) poner en contacto una célula que expresa una proteína atpE con un compuesto de prueba bajo condiciones fisiológicas;

5 (b) determinar si el compuesto de ensayo interactúa con la proteína atpE.

Esta invención proporciona además un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE, comprendiendo dicho método;

(a) usar técnica de modelado molecular para generar una estructura tridimensional de la proteína atpE;

10 (b) emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre el compuesto de ensayo y la estructura tridimensional de la proteína atpE; y

(c) analizar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación del compuesto de ensayo con la estructura tridimensional de la proteína atpE.

15 También es un objetivo de la presente invención proporcionar un sitio de unión de una parte  $F_0$  de una ATPasa que comprende al menos los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup> y Phe<sup>65</sup> de una subunidad C; los aminoácidos Ser<sup>182</sup>, Leu<sup>183</sup>, Ser<sup>184</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A y teniendo dichos aminoácidos las coordenadas atómicas de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5.

20 En un objetivo adicional, la presente invención proporciona el uso del susodicho dominio de unión en un método para identificar compuestos que interactúan con la parte  $F_0$  de una ATPasa y a su potencial como compuestos antimicrobianos, en particular en un método para identificar compuestos antimicobacterianos.

25 Según esto, un objetivo de la presente invención es proporcionar un método para tratar a un sujeto con una infección microbiana, que comprende administrar al sujeto un compuesto que interactúa con la parte  $F_0$  de una ATPasa, en particular con una proteína atpE en los sitios de mutación que confieren resistencia o con el sitio de unión de la presente invención. Esta invención proporciona además un método para tratar a un sujeto afectado de tuberculosis que comprende administrar al sujeto un agente que interactúa con una proteína atpE usando cualquiera de los susodichos métodos de cribado. En los métodos de tratamiento que comprende el uso de un compuesto que interactúa con la parte  $F_0$  de una ATPasa, en particular con una proteína atpE, se han de excluir compuestos que se sabe previamente que interactúan con la parte  $F_0$  de una ATPasa, y en particular con una proteína atpE. Más en particular, se ha de excluir el uso de los compuestos de DARQ J descritos en (11) en cualquiera de los métodos de tratamiento divulgados.

35 Esta invención proporciona además una composición farmacéutica que comprende un agente que interactúa con una proteína atpE en una célula, y un vehículo farmacéuticamente aceptable. Finalmente, esta invención proporciona un artículo de fabricación que comprende un envase y un agente farmacéutico, en el que (a) el agente farmacéutico interactúa con una proteína atpE en una célula, y (b) el envase comprende una etiqueta que indica el uso del agente para tratar una infección bacteriana en un sujeto. En una realización particular, la presente invención proporciona el uso de DARQ J en la fabricación de un medicamento antimicrobiano.

40 Este y aspectos adicionales de la presente invención se analizarán con más detalle posteriormente en la presente.

### Breve descripción del dibujo

45 Tabla. 1 Las concentraciones inhibitoras mínimas (MIC) del compuesto de DARQ principal (J), que inhibían 90% del crecimiento de diferentes especies micobacterianas. El número de cepas probadas era n=1, a menos que se indique otra cosa.

Tabla. 2 Los aminoácidos que rodean el sitio de unión para el compuesto de DARQ J.

Tabla. 3 Las coordenadas atómicas para los aminoácidos que rodean el sitio de unión para el compuesto de DARQ J derivado de la cepa de *M. tuberculosis* silvestre y mutante DARQ J.

50 Tabla 4. Las coordenadas atómicas para el sitio de unión para el compuesto de DARQ J en la *M. tuberculosis* silvestre.

- 5      Tabla 5.      Las coordenadas atómicas para el sitio de unión para el compuesto de DARQ J en la cepa de *M. tuberculosis* mutante DARQ J.
- Tabla 6.      Las coordenadas atómicas para la proteína atpE mutante (SEQ ID N° 2) de *M. tuberculosis*.
- Tabla 7.      Las coordenadas atómicas para la proteína atpE silvestre (SEQ ID N° 1) de *M. tuberculosis*.
- Fig. 1      Configuración absoluta de R207910, posteriormente también denominado J o DARQ J.
- 10      Fig. 2      alineamientos de secuencia de proteína atpE para mutantes de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis*. Mtb\_S: cepa sensible a fármaco de *M. tuberculosis* H37Rv, atpE (1-81). Número de registro: Swiss-Prot Q10598 (SEQ ID N° 1). Mtb\_R: cepa resistente a fármaco de *M. tuberculosis* BK12, atpE (1-81) (SEQ ID N° 2). Msm\_S: cepa sensible a fármaco de *M. smegmatis*, atpE (1-86). Secuencia obtenida por the Institute for Genome Research (SEQ ID N° 3). Msm\_R09 (SEQ ID N° 4) y R10 (SEQ ID N° 5): cepas resistentes a fármaco de *M. smegmatis* atpE (1-86). Secuencias obtenidas en las propias instalaciones. Humana: *Homo sapiens*, ATP5G3 (66-142). Número de registro: Ensembl ENSP00000284727. Número superior: atpE de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis*. Número inferior: *H sapiens* ATP5G3 (66-142) El sombreado indica similitud de aminoácidos usando la matriz BLOSUM62 (negro = alta, gris = media). Las flechas indican las posiciones de las mutaciones puntuales observadas en las cepas resistentes.
- 15      Fig. 3      Medida de ATP celular total de *M. tuberculosis* en presencia de DARQ J, isoniazida y DCCD. Unidades de luminiscencia relativas de oxiluciferina medidas a 526 nm, tanto en *M. tuberculosis* silvestre como en *M. tuberculosis* mutante DARQ J.
- 20      Fig. 4.      Representación en forma de cinta de las tres subunidades C (cadena A, cadena K y cadena L) y la subunidad A (cadena M) que forman conjuntamente el sitio de unión para el compuesto de DARQ J.
- 25

## Descripción detallada

### 30 Definiciones

Según se usa en esta solicitud, salvo disposición expresa en contrario, cada uno de los siguientes términos tendrá el significado indicado posteriormente.

35 "Proteína atpE" significará la cadena C de la subunidad F0 de complejo de ATPasa según se representa mediante la entrada de SwissProt Q10598 para *M. tuberculosis*, o una proteína que tenga al menos 70, 80, 90, 95, 97 o 99% de identidad de secuencia con dicha secuencia de *M. tuberculosis*.

40 "F<sub>1</sub>F<sub>0</sub> ATPasa", también denominada ATPasa, ATP sintasa o F<sub>1</sub>F<sub>0</sub> ATPasa, significará un complejo multisubunitario grande que cataliza la síntesis o la hidrólisis de ATP. Las F<sub>1</sub>F<sub>0</sub> ATPasas están compuestas por dos dominios: una parte F<sub>1</sub>, que es extrínseca a la membrana y contiene los sitios catalíticos y una parte F<sub>0</sub> que abarca la bicapa y contiene un poro protónico. Las ATPasas se encuentran en la membrana plasmática de las bacterias, la membrana tilacoide de los cloroplastos y la membrana interna de la mitocondria donde usan la energía de un gradiente electroquímico protónico para conducir la síntesis de ATP.

45 "Administrar" significará aportar de un modo, que se efectúa o realiza usando cualquiera de los diversos métodos y sistema de aporte conocidos por los expertos en la técnica. La administración se puede realizar, por ejemplo, tópicamente, intravenosamente, pericardialmente, oralmente, a través de implante, transmucosamente, transdérmicamente, intramuscularmente, subcutáneamente, intraperitonealmente, intratecalmente, intralinfáticamente, intralesionalmente o epiduralmente. La administración también se puede realizar, por ejemplo, una vez, una pluralidad de veces y/o a lo largo de uno o más períodos prolongados.

50

55 "Células hospedadoras" incluyen, pero no se limitan a, células bacterianas, células de levadura, células fúngicas, células de insecto y células de mamífero. Las células bacterianas se pueden transfectar mediante métodos muy conocidos en la técnica tales como precipitación con fosfato cálcico, electroporación y microinyección.

60 "Aislada", con respecto a una proteína atpE, significará una preparación de fragmentos de membrana que contienen proteína atpE u otra preparación adecuada en la que la atpE retenga su función natural y esté libre de algunas o todas las otras proteínas en su medio natural. Está destinado a incluir preparaciones de membrana que comprenden la parte F<sub>0</sub> de una F<sub>1</sub>F<sub>0</sub> ATPasa, en particular una parte F<sub>0</sub> que comprende las proteínas atpE mutantes de la presente invención.

"Célula bacteriana" significará cualquier célula bacteriana. Células bacterianas incluyen, sin limitación, células que son normales, anormales y están transformadas, y se ejemplifican por micobacterias, en particular *Mycobacterium tuberculosis* y *Mycobacterium smegmatis*, corinebacterias, nocardias, bacterias grampositivas tales como por ejemplo estreptococos, estafilococos y enterococos o bacterias gramnegativas tales como por ejemplo *Escherichia coli*, *Haemophilus influenzae* y *Helicobacter pylori*.

Los términos "ácido nucleico" y "polinucleótido" se usan intercambiabilmente en la presente, y cada uno se refiere a un polímero de desoxirribonucleótidos y/o ribonucleótidos. Los desoxirribonucleótidos y ribonucleótidos pueden estar presentes en la naturaleza o ser análogos químicos de los mismos.

El término "condiciones fisiológicas" significará, con respecto a una célula dada, condiciones tales que normalmente constituirían el medio bioquímico de la célula. El medio bioquímico de la célula incluye, sin limitación, algunas o todas las proteasas a las que normalmente está expuesta la célula. Estas condiciones incluyen, pero no se limitan a, condiciones *in vivo*.

Los términos "polipéptido," "péptido" y "proteína" se usan intercambiabilmente en la presente, y cada uno significa un polímero de residuos de aminoácido. Los residuos de aminoácido pueden estar presentes en la naturaleza o ser análogos químicos de los mismos. Los polipéptidos, los péptidos y las proteínas también pueden incluir modificaciones tales como glicosilación, ligación a lípidos, sulfatación, hidroxilación y ribosilación de ADP.

"Sujeto" significará cualquier animal, tal como un mamífero o un ave, incluyendo, sin limitación, una vaca, un caballo, una oveja, un cerdo, un perro, un gato, un roedor tal como un ratón o una rata, un pavo, un pollo y un primate. En la realización preferida, el sujeto es un ser humano.

"Tratar" incluirá, sin limitación, eliminar, invertir el curso de, frenar el avance de, reducir los síntomas de, o mejorar de otro modo, una enfermedad en un sujeto.

"Vector" significará cualquier vector de ácido nucleico conocido en la técnica. Estos vectores incluyen, pero no se limitan a, vectores plasmídicos, vectores cosmidicos y vectores bacteriofágicos.

Los términos "posible sustancia" y "compuesto de ensayo" se usan intercambiabilmente y se refieren a una sustancia que se cree que interactúa con otro resto, es decir la proteína atpE, como un modificador de la respuesta biológica. Por ejemplo, se cree que una posible sustancia representativa interactúa con una proteína atpE y se cree que modifica la actividad de ATPasa. Posibles sustancias ejemplares que se pueden investigar usando los métodos de la presente invención incluyen, pero no se restringen a, péptidos, enzimas, sustratos para enzimas, cofactores, azúcares, oligonucleótidos, compuestos químicos moléculas pequeñas y anticuerpos monoclonales.

"Modulación" significará un incremento, una disminución u otra alteración de cualquiera o todas las actividades o propiedades químicas y biológicas de una proteína atpE silvestre o mutante.

"Interactuación" significará interacciones detectables entre moléculas, incluyendo interacciones de "unión" entre moléculas. Las interacciones pueden ser, por ejemplo, de naturaleza proteína-proteína o proteína-ácido nucleico. Estas interacciones se pueden detectar usando procedimientos conocidos en la técnica, por ejemplo, un ensayo de dos híbridos de levadura, inmunoprecipitación, ensayo de SPA o ensayos de unión a filtros.

Según se usa en la presente, el término "coordenadas atómicas" o "coordenadas estructurales" se refiere a las coordenadas matemáticas que describen las posiciones de átomos en el formato del Protein Data Bank (PDB), incluyendo X, Y, Z y B para cada átomo. Los expertos en la técnica que un grupo de coordenadas estructurales determinadas por cristalografía de rayos X no está libre de error estándar. Para el propósito de esta invención, cualquier grupo de coordenadas estructurales para ATPsintasa procedente de cualquier fuente que tenga una desviación media cuadrática de átomos distintos a hidrógeno de menos de 1,5 Å cuando están superpuestos a la posición de los átomos distintos de hidrógeno de las coordenadas atómicas correspondientes de las Tablas 3, 4,5, 6 o 7 se considera sustancialmente idéntico u homólogo. En una realización más preferida, cualquier grupo de coordenadas estructurales para ATPsintasa procedente de cualquier fuente que tenga una desviación media cuadrática de átomos distintos a hidrógeno de menos de 0,75 Å cuando están superpuestos a la posición de los átomos distintos de hidrógeno de las coordenadas atómicas correspondientes de las Tablas 3, 4,5, 6 o 7 se considera sustancialmente idéntico.

Realizaciones de la invención

Proteínas atpE mutantes

Esta invención proporciona proteínas atpE, en particular proteínas atpE bacterianas, más particularmente proteínas atpE micobacterianas, aún más particularmente proteínas atpE de *M. tuberculosis* o *M. smegmatis*, mutantes aisladas. La mutación se selecciona de mutaciones puntuales simples, inserciones o eliminaciones. La mutación consiste en al menos una mutación puntual localizada en uno cualquiera de los aminoácidos 20 a 40, en particular

30 a 40, preferiblemente en el aminoácido 34 o de los aminoácidos 60 a 75, en particular de 62 a 73, preferiblemente en el aminoácido 69 según se muestra en el alineamiento de secuencias de la Fig. 2. En una realización de la invención, las proteínas atpE mutantes aisladas son como se definen en las reivindicaciones, p. ej. seleccionadas de Mtb\_R (SEQ ID N° 2), Msm\_R09 (SEQ ID N° 4) y Msm\_R10 (SEQ ID N° 5) según se muestra en la Fig. 2 o de una secuencia de aminoácidos que tiene al menos 70, 80, 90, 95, 97 o 98% de identidad de secuencia con las susodichas secuencias de aminoácidos.

Esta invención proporciona además un ácido nucleico aislado que codifica dichas proteínas atpE mutantes. En una realización, dicha secuencia de ácido nucleico consiste en todos los genes que codifican una parte F<sub>0</sub>, tal como por ejemplo se describe en *J.Biol.Chem*, 1994, Vol.269(10),p.7285-7289, en donde dichos genes se transcriben a partir de un promotor simple y comprenden la secuencia de ácido nucleico que codifica la proteína atpE mutante de la presente invención. El ácido nucleico puede ser ADN o ARN, y preferiblemente ADN, y en una realización adicional se seleccionan de las secuencias de ácido nucleico que codifican Mtb\_R (SEQ ID N° 7) Msm\_R09 (SEQ ID N° 9), Msm\_R10 (SEQ ID N° 10) o una secuencia de ácido nucleico que tiene al menos 70, 80, 90, 95, 97 o 98% de identidad de secuencia con cualquiera de las susodichas secuencias de ácido nucleico.

El porcentaje de identidad de las secuencias de ácido nucleico y polipeptídicas se puede calcular usando algoritmos disponibles comercialmente que comparan una secuencia de referencia con una secuencia de consulta. Los siguientes programas (proporcionados por the National Center for Biotechnology Information) se pueden usar para determinar homologías/identidades: BLAST, BLAST con huecos, BLASTN y PSI-BLAST, que se pueden usar con parámetros por defecto.

El algoritmo GAP (Genetics Computer Group, Madison, WI) usa el algoritmo de Needleman y Wunsch para alinear dos secuencias completas que maximiza el número de coincidencias y minimiza el número de huecos. Generalmente, se usan los parámetros por defecto, con una penalización por creación del hueco = 12 y una penalización por extensión del hueco = 4.

Otro método para determinar la mejor coincidencia global entre una secuencia de ácido nucleico o una porción de la misma y una secuencia de consulta es el uso del programa informático FASTDB basado en el algoritmo de Brutlag y cols. (Comp. App. Biosci., 6; 237-245 (1990)). El programa proporciona un alineamiento de secuencias global. El resultado de dicho alineamiento de secuencias global está en porcentaje de identidad. Parámetros adecuados usados en una investigación por FASTDB de una secuencia de ADN para calcular el porcentaje de identidad son: Matriz=Unitaria, k-tupla=4, Penalización por falta de coincidencia=1, Penalización por unión=30, Longitud del grupo de aleatorización=0, Puntuación de corte=1, Penalización por hueco=5, Penalización por tamaño del hueco=0,05, y Tamaño del intervalo=500 o longitud de la secuencia de consulta en bases nucleotídicas, lo que sea más corto. Parámetros adecuados para calcular el porcentaje de identidad y similitud de un alineamiento de aminoácidos son: Matriz=PAM 150, k-tupla=2, Penalización por falta de coincidencia=1, Penalización por unión=20, Longitud del grupo de aleatorización=0, Puntuación de corte=1, Penalización por hueco=5, Penalización por tamaño del hueco=0,05, y Tamaño del intervalo=500 o longitud de la secuencia de consulta en bases nucleotídicas, lo que sea más corto.

Esta invención proporciona además un vector que comprende el presente ácido nucleico. En una realización, el vector es un vector plasmídico.

Esta invención proporciona además un sistema hospedador-vector que comprende una célula hospedadora que tiene en la misma el presente vector plasmídico. La célula puede ser procariótica o eucariótica, en una realización la célula hospedadora es una célula bacteriana, en particular una célula micobacteriana tal como, por ejemplo, *M. tuberculosis* o *M. smegmatis*.

Esta invención proporciona además una célula aislada que comprende una proteína de atpE mutante, proteína que induce resistencia antimicrobiana en la célula. La célula aislada consiste en una célula de *M. smegmatis* transformada con una proteína atpE micobacteriana mutante, en particular transformada con una proteína atpE micobacteriana mutante en la que la mutación consiste en al menos una mutación puntual situada en uno cualquiera de los aminoácidos 20 a 40, en particular 30 a 40, preferiblemente en el aminoácido 34 o de los aminoácidos 60 a 75, en particular 62 a 73, preferiblemente en el aminoácido 69 según se muestra en el alineamiento de secuencias de la Fig. 2.

#### Métodos de cribado

Esta invención proporciona además un método para identificar un compuesto antimicrobiano, comprendiendo dicho método las etapas de

(a) poner en contacto una célula que expresa una proteína atpE con un compuesto de ensayo bajo condiciones fisiológicas;

(b) determinar si el compuesto de ensayo interactúa con la proteína atpE.

En una realización, la proteína atpE usada en el susodicho método consiste en una proteína atpE bacteriana, en particular una proteína micobacteriana y se entiende que incluye tanto las proteínas atpE silvestres como las proteínas atpE mutantes según se describe anteriormente en la presente. En una realización adicional de la presente invención, la proteína atpE micobacteriana usada en el susodicho método consiste en una proteína atpE micobacteriana mutante según la invención. En una realización particular del susodicho ensayo, se usa una célula hospedadora transformada con una proteína atpE mutante de la invención y la interacción del compuesto de ensayo con dicha proteína atpE se evalúa al determinar la posible inhibición de la actividad enzimática de la F<sub>1</sub>Fo-ATPasa que comprende dicha proteína atpE mutante. La inhibición de la actividad de F<sub>1</sub>Fo-ATPasa se determina usando procedimientos conocidos en la técnica, tales como, por ejemplo, al añadir la sustancia a un sistema que comprende la F<sub>1</sub>Fo-ATPasa y ATP como un sustrato, con detección de la actividad enzimática al acoplar la producción de ADP a la oxidación de NADH a través de reacciones de piruvato cinasa y lactato hidrogenasa.

En una realización del ensayo, la proteína atpE se puede emplear en un ensayo de unión. Los ensayos de unión pueden ser competitivos o no competitivos. Este ensayo puede ajustar el cribado rápido de un gran número de compuestos para determinar qué compuestos, si los hay, son capaces de unirse a los polipéptidos.

Dentro de este contexto, la presente invención proporciona un método para identificar si un compuesto de ensayo se une a una proteína atpE aislada de la presente invención, y es así un compuesto antimicrobiano potencial, comprendiendo dicho método;

a) poner en contacto células que expresan la proteína atpE en donde estas células normalmente no expresan dicha proteína atpE, con el compuesto de ensayo en presencia y ausencia de un compuesto que se sabe que se une a la proteína atpE,

b) determinar la unión del compuesto de ensayo a la proteína atpE usando el compuesto que se sabe que se une a la proteína atpE como una referencia.

La unión del compuesto de ensayo o del compuesto que se sabe que se une a la proteína atpE, en lo sucesivo también denominado en la presente compuesto de referencia, se evalúa usando métodos conocidos en la técnica para el estudio de interacciones proteína-ligando. Por ejemplo, esta unión se puede medir al emplear una sustancia marcada o compuesto de referencia. El compuesto de ensayo o el compuesto de referencia, en particular el compuesto J (Fig. 1) se puede marcar de cualquier modo conveniente conocido en la técnica, p. ej. radiactivamente, fluorescentemente o enzimáticamente. En una realización particular del susodicho método, el compuesto que se sabe que se une a la proteína atpE, también conocido como el compuesto de referencia, se marca detectablemente y. Dicho marcado se usa para determinar la unión del compuesto de ensayo a la proteína atpE. Dicho compuesto de referencia que se marca usando un radiomarcador, un marcador fluorescente o un marcador enzimático, más preferiblemente un radiomarcador.

En una realización alternativa de la presente invención, los susodichos ensayos de unión se realizan sobre una composición celular, es decir un extracto celular, una fracción celular u orgánulos celulares que comprenden una proteína atpE según se define anteriormente en la presente. Más en particular, los susodichos ensayos de unión se realizan sobre una composición celular, es decir una preparación de membrana que comprende una proteína atpE como la definida anteriormente en la presente, en donde dicha composición celular, es decir la preparación de membrana, se obtiene a partir de una célula de *M. smegmatis* transformada con una proteína atpE micobacteriana mutante, en particular transformada con una proteína atpE micobacteriana mutante en la que la mutación consiste en al menos una mutación puntual situada en uno cualquiera de los aminoácidos 20 a 40, en particular 30 a 40, preferiblemente en el aminoácido 34 o de los aminoácidos 60 a 75, en particular 62 a 73, preferiblemente en el aminoácido 69 según se muestra en el alineamiento de secuencias de la Fig. 2. Las susodichas regiones son como se definen en las reivindicaciones.

En una realización, los ensayos de unión se realizan usando preparaciones de membrana. Estas preparaciones de membrana se pueden usar en ensayos de unión a filtro convencionales (p. ej., usando el equipo de ensayo de filtro de Brandel) o en ensayos de unión de tipo de proximidad por centelleo de alto rendimiento (SPA y tecnología de placas instantáneas Cytostar-T; Amersham Pharmacia Biotech) para detectar la unión de los ligados de atpE radiomarcados (incluyendo DARQ marcadas con <sup>3</sup>H) y el desplazamiento de estos radioligandos por competidores con el sitio de unión. La radiactividad se puede medir con Packard Topcount, o una instrumentación similar, capaz de realizar medidas rápidas a partir de formatos de 96, 384, 1536 pocillos de microvaloración. La tecnología SPA/Cytostar-T es particularmente conveniente para el cribado de alto rendimiento y por lo tanto esta tecnología es adecuada para el uso como un cribado para compuestos capaces de desplazar ligandos estándar.

Otro enfoque para estudiar la unión de ligandos a proteína atpE en un ambiente que se aproxima a la situación natural hace uso de un efectos de resonancia de plasmones superficiales explotado por el instrumento Biacore (Biacore). La proteína atpE en preparaciones de membrana o células enteras se podría ligar al chip biosensor de un

Biacore y la unión de ligandos se podría examinar en presencia o ausencia de compuestos para identificar competidores del sitio de unión.

#### Modelado molecular

5 Esta invención proporciona además un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE, comprendiendo dicho método;

(a) usar técnicas de modelado molecular para formular una estructura tridimensional de la proteína atpE;

10 (b) emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre el compuesto de ensayo y la estructura tridimensional de la proteína atpE; y

(c) analizar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación del compuesto de ensayo con la estructura tridimensional de la proteína atpE.

Las técnicas de modelado molecular son conocidas en la especialidad, incluyendo tanto hardware como software apropiados para crear y utilizar modelos de receptores y conformaciones enzimáticas.

15 Numerosos programas informáticos están disponibles y son adecuados para los procedimientos de modelado informático, construcción de modelos e identificación, selección y evaluación informáticas de compuestos que interactúan con atpE potenciales en los métodos descritos en la presente. Estos incluyen, por ejemplo, GRID (disponible de Oxford University, RU), MCSS (disponible de Accelrys, Inc., San Diego, CA), AUTODOCK (disponible de Oxford Molecular Group), FLEX X (disponible de Tripos, St. Louis, MO), DOCK (disponible de University of California, San Francisco, CA), CAVEAT (disponible de University of California, Berkeley), HOOK (disponible de Accelrys, Inc., San Diego, CA) y sistemas de bases de datos 3D tales como MACCS-3D (disponible de MDL Information Systems, San Leandro, CA), UNITY (disponible de Tripos, St. Louis, MO) y CATALYST (disponible de Accelrys, Inc., San Diego, CA). Posibles sustancias potenciales también se pueden diseñar informáticamente "de novo" usando paquetes de software como LUDI (disponible de Biosym Technologies, San Diego, CA), LEGEND (disponible de Accelrys, Inc., San Diego, CA) y LEAPFROG (disponible de Tripos, St. Louis, MO). La energía de deformación y la repulsión electrostática de los compuestos se pueden analizar usando programas tales como GAUSSIAN 92, AMBER, QUANTA/CHARMM e INSIGHT II/DISCOVER. Estas técnicas informáticas de evaluación y modelado se pueden realizar en cualquier hardware adecuado incluyendo, por ejemplo, estaciones de trabajo disponibles de Silicon Graphics, Sun Microsystems y otros. Estas técnicas, métodos, hardware y paquetes de software de modelado son representativos y no pretender ser una lista exhaustiva. También se pueden emplear otras técnicas de modelado conocidas en la especialidad según esta invención. Véase, por ejemplo, N.C. Cohen, Molecular Modeling in Drug Design, Academic Press (1996).

35 En una realización de la presente invención, la estructura tridimensional de la proteína atpE se genera usando las coordenadas atómicas de los Ile28, Glu61 e Ile63 de *E. coli* (Protein Database 1Q01) +/- una desviación media cuadrática de los átomos de esqueleto de dichos aminoácidos de no más de 10 Å, preferiblemente no más de 5 Å.

40 Según se proporciona en los ejemplos posteriores de la presente, un objetivo de la presente invención ha sido proporcionar la estructura tridimensional de la proteína atpE. Las Tablas 6 y 7 proporcionan las coordenadas atómicas para la proteína atpE mutante y silvestre con SEQ ID N° 2 y SEQ ID N° 1. Así, en una realización, la estructura tridimensional de la proteína atpE se genera usando las coordenadas atómicas de las Tablas 6 o 7. En una realización particular, la estructura tridimensional de la proteína atpE se genera usando las coordenadas atómicas de la Tabla 7. El compuesto de DARQ J inhibe la interacción de Arg<sup>186</sup> de la subunidad A con Glu<sup>61</sup> de la subunidad C en su forma desprotonada. De acuerdo con esto, un objetivo de la presente invención es proporcionar el uso de las coordenadas atómicas de las Tablas 6 o 7 en un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE.

#### Sitio de unión

50 En otra realización, la presente invención proporciona la caracterización de un sitio de unión en la parte F<sub>0</sub> de una ATPasa. Se encontró que este sitio de unión, identificado por ser capaz de unirse al compuesto de DARQ J, coincidía con las regiones identificadas anteriormente en la presente, como los sitios de mutación que confieren resistencia en las proteínas atpE de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* (17). De ahí que la presente invención proporcione un sitio de unión en la parte F<sub>0</sub> de una ATPasa caracterizado por que comprende los sitios de mutación que confieren resistencia de una proteína atpE. Los sitios de mutación que confieren resistencia que se usan en la presente son como se definen en las reivindicaciones.

60 En una realización adicional, el sitio de unión comprende al menos los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup> y Phe<sup>65</sup> de una subunidad C y los aminoácidos Ser<sup>182</sup>, Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A (que

tienen para la subunidad A los códigos Ser 206 - Leu 207 - Leu 209 y Arg 210 en las Tablas 3, 4 y 5), en donde dichos aminoácidos tienen las coordenadas atómicas de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5 o coordenadas estructurales homólogas que comprenden una desviación media cuadrática de átomos distintos de hidrógeno de menos de aproximadamente 1,5 Å, preferiblemente no más de 0,75 Å, cuando están superpuestos a las posiciones de los átomos de que no son hidrógeno de las correspondientes coordenadas atómicas de las Tablas 3, 4 o 5. En una realización particular, el sitio de unión comprende los aminoácidos Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup> de una primera subunidad C; los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una segunda subunidad C; los aminoácidos Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una tercera subunidad C y los aminoácidos Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A; en donde dichos aminoácidos tienen las coordenadas atómicas de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5 o las coordenadas estructurales homólogas que comprenden una desviación media cuadrática de átomos distintos de hidrógeno de menos de aproximadamente 1,5 Å, preferiblemente no más de 0,75 Å, cuando están superpuestos a las posiciones de los átomos de que no son hidrógeno de las correspondientes coordenadas atómicas de las Tablas 3, 4 o 5. En una realización aún más particular, el sitio de unión consiste en los aminoácidos Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup> de una primera subunidad C; los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una segunda subunidad C; los aminoácidos Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una tercera subunidad C y los aminoácidos Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A; en donde dichos aminoácidos tienen las coordenadas atómicas de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5. En la realización más particular, el sitio de unión consiste en los aminoácidos Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup> de una primera subunidad C; los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una segunda subunidad C; los aminoácidos Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de una tercera subunidad C y los aminoácidos Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A; en donde dichos aminoácidos tienen las coordenadas atómicas de la Tabla 3.

Según esto, un objetivo de la presente invención es evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE usando las coordenadas atómicas que se esbozan anteriormente, en programas de cribado informatizados. En una realización, la presente invención proporciona un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE, comprendiendo dicho método; - técnicas de modelado molecular para generar la estructura tridimensional de un sitio de unión de una parte F<sub>0</sub> de una ATPasa; - emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre el compuesto de ensayo y la estructura tridimensional del sitio de unión; y - analizar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación del compuesto de ensayo con la estructura tridimensional del sitio de unión. En una realización adicional de la presente invención, la estructura tridimensional del sitio de unión se genera usando las coordenadas atómicas de las Tablas 3, 4 o 5 o las coordenadas estructurales homólogas que comprenden una desviación media cuadrática de átomos distintos de hidrógeno de menos de aproximadamente 1,5 Å, preferiblemente no más de 0,75 Å, cuando están superpuestos a las posiciones de los átomos de que no son hidrógeno de las correspondientes coordenadas atómicas de las Tablas 3, 4 o 5. En una realización particular, la estructura tridimensional se genera usando las coordenadas atómicas de los aminoácidos Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup> de la cadena A de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de la cadena K de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; los aminoácidos Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de la cadena L de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; y los aminoácidos Ser<sup>206</sup>, Leu<sup>207</sup>, Leu<sup>209</sup> y Arg<sup>210</sup> de la cadena M de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5.

En este cribado, la calidad de ajuste de estos compuestos al sitio de unión se puede juzgar bien mediante complementariedad de conformación o bien mediante la energía de interacción estimada (Meng, E.C. y cols., J. Coma.Chem 13:505-524 (1992)).

#### Uso del sitio de unión

El diseño de compuestos que se unen a, promueven o inhiben la actividad funcional de atpE según esta invención implica generalmente la consideración de dos factores. En primer lugar, el compuesto debe ser capaz de asociarse físicamente y estructuralmente con atpE. Interacciones moleculares no covalentes importantes en la asociación de atpE con el compuesto incluyen enlace de hidrógeno, interacciones de van der Waals e hidrófobas. En segundo lugar, el compuesto debe ser capaz de asumir una conformación que le permita asociarse con atpE. Aunque ciertas porciones del compuesto pueden no participar directamente en la asociación con atpE, esas porciones pueden influir sin embargo en la conformación global de la molécula. Esto, a su vez, puede tener un impacto significativo sobre las afinidades de unión, la eficacia terapéutica, las cualidades farmacológicas y la potencia. Estos requisitos de conformación incluyen la estructura tridimensional global y la orientación de la entidad química o compuesto en relación con la totalidad o una porción del sitio activo u otra región de atpE o la separación entre grupos funcionales de un compuesto que comprende varias entidades químicas que interactúan directamente con atpE.

El efecto agonista, antagonista o de unión inhibidor potencial predicho de un ligando u otro compuesto sobre atpE se puede analizar antes de su síntesis real y probar el uso de técnicas de modelado informatizadas. Si la estructura teórica del compuesto dado sugiere una interacción y asociación insuficientes entre él y atpE, la síntesis y la prueba

del compuesto se pueden obviar. Sin embargo, si el modelado informatizado indica una fuerte interacción, entonces la molécula se puede sintetizar y probar con respecto a su capacidad para interactuar con atpE. De este modo, se puede evitar la síntesis de compuestos no operativos. En algunos casos, se sintetizan compuestos inactivos predichos durante el modelado y a continuación se prueban para desarrollar una SAR (relación estructura-actividad) para compuestos que interactúan con una región específica de atpE.

Un experto en la técnica puede usar uno de los varios métodos para cribar entidades químicas fragmentos, compuestos o agentes con respecto a su capacidad para asociarse con atpE y más particularmente con los bolsillos de unión individuales o los sitios activos de atpE. Este procedimiento puede comenzar mediante la inspección visual, por ejemplo, del sitio activo en el cribado informático basado en las coordenadas atómicas de atpE o atpE complejada con un ligando. Las entidades químicas, los compuestos o los agentes seleccionados se pueden situar a continuación en una variedad de orientaciones, o acoplarse dentro de un bolsillo de unión individual de atpE. El acoplamiento se puede efectuar usando un software tal como Quanta y Sybyl, seguido por minimización energética y dinámica molecular con campos de fuerza de la mecánica molecular estándar, tales como CHARMM y AMBER.

Programas informáticos especializados también pueden ayudar en el procedimiento de selección de entidades químicas. Estos incluyen, pero no se limitan a: GRID (Goodford, P. J., "A Computational Procedure for Determining Energetically Favorable Binding Sites on Biologically Important Macromolecules," J. Med. Chem. 28:849-857 (1985), disponible de Oxford University, Oxford, RU); MCSS (Miranker, A. y M. Karplus, "Functionality Maps of Binding Sites: A Multiple Copy Simultaneous Search Method." Proteins: Structure, Function and Genetics 11: 29-34 (1991), disponible de Molecular Simulations, Burlington, Mass.); AUTODOCK (Goodsell, D. S. y A. J. Olsen, "Automated Docking of Substrates to Proteins by Simulated Annealing" Proteins: Structure, Function, and Genetics 8:195-202 (1990), disponible de Scripps Research Institute, La Jolla, Calif.); y DOCK (Kuntz, I. D. y cols., "A Geometric Approach to Macromolecule-Ligand Interactions," J.-Mol. Biol. 161:269-288 (1982), disponible de University of California, San Francisco, Calif.).

El uso de una software tal como GRID, un programa que determina probables sitios de interacción entre sondas con diversas características de los grupos funcionales y la superficie macromolecular, se usa para analizar los sitios superficiales para determinar estructuras de proteínas o compuestos inhibidores similares. Los cálculos de GRID, con grupos inhibidores adecuados en moléculas (p. ej., aminas primarias protonadas) como la sonda se usan para identificar puntos calientes potenciales alrededor de posiciones accesibles a niveles de contorno energético adecuados. El programa DOCK se puede usar para analizar un sitio activo o sitio de unión al ligando y sugiere ligandos con propiedades estéricas complementarias.

Una vez que se han seleccionado las entidades químicas, los compuestos o los agentes adecuados, se pueden ensamblar en un solo ligando o compuesto o inhibidor o activador. En ensamblaje puede proceder mediante inspección visual de la relación de los fragmentos entre sí sobre la imagen tridimensional. Esto puede estar seguido por construcción de modelos manuales usando un software tal como Quanta o Sybyl.

Programas útiles para ayudar a conectar las entidades químicas, los compuestos o los agentes individuales incluyen, pero no se limitan a: CAVEAT (Bartlett, P. A. y cols., "CAVEAT: A Program to Facilitate the Structure-Derived Design of Biologically Active Molecules." En Molecular Recognition in Chemical and Biological Problems, Special Pub., Royal Chem. Soc., 78, pp. 82-196 (1989)); sistemas de bases de datos 3D tales como MACCS-3D (MDL Information Systems, San Leandro, Calif. y Martin, Y.C., "3D Database Searching in Drug Design", J. Med. Chem. 35: 2145-2154 (1992); y HOOK (disponible de Molecular Simulations, Burlington, Mass.).

Están disponibles varias metodologías para buscar bases de datos tridimensionales para probar hipótesis de fármacos y seleccionar compuestos para el cribado. Estas incluyen el programa CAVEAT (Bacon y cols., J. Mol. Biol. 225:849-858 (1992)). A modo de ejemplo, CAVEAT usa bases de datos de compuestos cíclicos que pueden actuar como "espaciadores" para conectar cualquier número de fragmentos químicos ya situados en el sitio activo. Esto permite a un experto en la técnica generar rápidamente cientos de posibles modos de conectar los fragmentos que ya se sabe o se sospecha que son necesarios para una unión fuerte.

En lugar de proceder a construir un activador, agonista o antagonista inhibidor de atpE en un modo por etapas una entidad química en un momento que se describe anteriormente, estos compuestos se pueden diseñar como un todo o "de novo" usando bien un sitio activo vacío o que incluye opcionalmente alguna porción o porciones de moléculas conocidas. Estos métodos incluyen: LUDI (Bohm, H.-J., "The Computer Program LUDI: A New Method for the De Novo Design of Enzyme Inhibitors", J. Comput. Mol. Design, 6, pp. 61-78 (1992), disponible de Biosym Technologies, San Diego, Calif.); LEGEND (Nishibata, Y. y A. Itai, Tetrahedron 47:8985 (1991), disponible de Molecular Simulations, Burlington, Mass.); y LeapFrog (disponible de Tripos Associates, St. Louis, Mo.).

A modo de ejemplo, el programa LUDI puede determinar una lista de sitios de interacción en los que situar tanto un enlace de hidrógeno como fragmentos hidrófobos. LUDI usa a continuación una biblioteca de enlazadores para conectar hasta cuatro sitios de interacción diferentes en los fragmentos. A continuación, se usan grupos "de puenteo" menores tales como  $-CH_2-$  y  $-COO-$  para conectar estos fragmentos. Por ejemplo, para la enzima

DHFR, las colocaciones de grupos funcionales clave en el bien conocidos inhibidor metotrexato fueron reproducidas por LUDI. Véase además Rotstein y Murcko, *J. Med. Chem.* 36: 1700-1710 (1992).

Según esta invención, también se pueden emplear otras técnicas de modelado molecular. Véase, p. ej., Cohen, N. C. y cols., "Molecular Modeling Software and Methods for Medicinal Chemistry, *J. Med. Chem.* 33:883-894 (1990). Véase además Navia, M. A. y M. A. Murcko, "The Use of Structural Information in Drug Design," *Current Opinions in Structural Biology*, 2, pp. 202-210 (1992).

Una vez que un compuesto se ha diseñado o seleccionado mediante los métodos anteriores, la afinidad con la que ese compuesto se puede unir o asociar con atpE se puede probar y optimizar mediante evaluación informatizada y/o al probar la actividad biológica después de sintetizar el compuesto. Los inhibidores o los compuestos pueden interactuar con la atpE en más de una conformación que sea similar en la energía de unión global. En esos casos, la energía de deformación de la unión se toma como la diferencia entre la energía del compuesto libre y la energía media de las conformaciones observadas cuando el compuesto se une a atpE.

Un compuesto diseñado o seleccionado por unirse o asociarse con atpE se puede optimizar informáticamente de forma adicional de modo que en su estado unido preferiblemente carezca de interacción electrostática repulsiva con atpE. Estas interacciones no complementarias (p. ej., electrostáticas) incluyen interacciones repulsivas carga-carga, dipolo-dipolo y carga-dipolo. Específicamente, la suma de todas las interacciones electrostáticas entre el inhibidor y atpE cuando el inhibidor está unido preferiblemente realiza una contribución neutra o favorable a la entalpía de unión. También se diseñarán mediante estos métodos compuestos que se unen débilmente, a fin de determinar SAR. Véanse, por ejemplo, las Solicitudes de EE. UU. Nº 60/275.629, 60/331.235, 60/379.617 y 10/097.249.

Está disponible en la técnica un software informático específico para evaluar la energía de deformación y la interacción electrostática de los compuestos. Ejemplos de programas diseñados para estos usos incluyen: Gaussian 92, revisión C (M. J. Frisch, Gaussian, Inc., Pittsburgh, Pa., COPYRIGHT 1992); AMBER, versión 4.0 (P. A. Kollman, University of California at San Francisco, COPYRIGHT 1994); QUANTA/CHARMM (Molecular Simulations, Inc., Burlington, Mass. COPYRIGHT 1994); e Insight II/Discover (Biosym Technologies Inc., San Diego, Calif. COPYRIGHT 1994). Otros sistemas de hardware y paquetes de software serán conocidos por los expertos en la técnica.

Una vez que un compuesto que se asocia con atpE se ha seleccionado o diseñado óptimamente, según se describe anteriormente, se pueden hacer entonces sustituciones en algunos de sus átomos o grupos laterales a fin de mejorar o modificar sus propiedades de unión. Generalmente, las sustituciones iniciales son conservativas, es decir, el grupo de sustitución tendrá aproximadamente iguales tamaño, conformación, hidrofobia y carga que el grupo original. Por supuesto, se debe entender que se pueden evitar componentes conocidos en la técnica por alterar la conformación. Estos compuestos químicos sustituidos se pueden analizar a continuación con respecto a la eficacia de ajuste a atpE mediante los mismos métodos informáticos descritos con detalle, anteriormente.

La presente invención proporciona además sistemas, particularmente sistemas informáticos, que contienen las coordenadas de secuencia y/o estructura descritas en la presente. Estos sistemas están diseñados para realizar la determinación estructural y el diseño racional de fármacos para atpE o para el sitio de unión en la parte F<sub>0</sub> de la ATPasa. Los sistemas informáticos se refieren a los medios de hardware, los medios de software y los medios de almacenamiento de datos usados para analizar las coordenadas de secuencia y/o estructura de la presente invención en cualquiera de los métodos informáticos descritos con detalle, anteriormente. Los medios de hardware mínimos del sistema informático de la presente invención comprenden una unidad de procesamiento central (CPU), medios de entrada, medios de salida y medios de almacenamiento de datos. Un experto en la técnica puede apreciar fácilmente cuáles de los sistemas informáticos actualmente disponibles son adecuados para el uso en la presente invención.

Según esto, un objetivo de la presente invención es proporcionar un medio de almacenamiento de datos legible informáticamente que contenga las coordenadas estructurales descritas en la presente. Según se usa en la presente, "medio de almacenamiento de datos legible informáticamente" se refiere a cualquier medio que pueda ser leído a al que se pueda acceder directamente mediante un ordenador. Estos medios incluyen, pero no se limitan a: medios de almacenamiento magnéticos, tales como discos flexibles, medios de almacenamiento en disco duro y cinta magnética; medios de almacenamiento ópticos tales como discos ópticos o CD-ROM; medios de almacenamiento eléctricos tales como RAM y ROM; e híbridos de estas categorías tales como medios de almacenamiento magnéticos/ópticos.

#### Métodos de tratamiento

Como ya se mencionó anteriormente, también es un objetivo de la presente invención proporcionar el uso de compuestos identificados usando cualquiera de los susodichos métodos de cribado en un método para tratar a un sujeto con una infección microbiana. En general, los patógenos bacterianos se pueden clasificar como patógenos grampositivos o gramnegativos. Se considera generalmente que los compuestos antimicrobianos con actividad contra patógenos tanto grampositivos como gramnegativos tienen un amplio espectro de actividad. Los compuestos de la presente invención se consideran activos contra patógenos bacterianos grampositivos y/o gramnegativos. En

particular, los presentes compuestos son activos contra al menos una bacteria grampositiva, preferiblemente contra varias bacterias grampositivas, más preferiblemente contra uno o más bacterias grampositivas y/o una o más bacterias gramnegativas.

Ejemplos de bacterias aerobias y anaerobias grampositivas y gramnegativas incluyen estafilococos, por ejemplo *S. aureus*; enterococos, por ejemplo *E. faecalis*; estreptococos, por ejemplo *S. pneumoniae*, *S. mutans*, *S. pyogenes*; bacilos, por ejemplo *Bacillus subtilis*; listerias, por ejemplo *Listeria monocytogenes*; Haemophilus, por ejemplo *H. influenza*; Moraxella, por ejemplo *M. catarrhalis*; Pseudomonas, por ejemplo *Pseudomonas aeruginosa*; y Escherichia, por ejemplo *E. coli*. Los patógenos grampositivos, por ejemplo estafilococos, enterococos y estreptococos, son particularmente importantes debido al desarrollo de cepas resistentes que son tanto difíciles de tratar como difíciles de erradicar de, por ejemplo, un entorno hospitalario una vez establecidos. Ejemplos de estas cepas son *Staphylococcus aureus* resistente a meticilina (MRSA), estafilococos negativos a coagulasa resistentes a meticilina (MRCNS), *Streptococcus pneumoniae* resistente a penicilina y *Enterococcus faecium* múltiplemente resistente.

Los compuestos de la presente invención también muestran actividad contra cepas bacterianas resistentes.

Los compuestos de la presente invención se especialmente activos contra las bacterias de las que la viabilidad depende del funcionamiento apropiado de  $F_1F_0$  ATP sintasa. Sin querer limitarse por ninguna teoría, se enseña que la actividad de los presentes compuestos reside en la inhibición de la  $F_1F_0$  ATP sintasa, en particular la inhibición del complejo  $F_0$  de la  $F_1F_0$  ATP sintasa, más en particular la inhibición de la transferencia de protones desde Arg186 de la subunidad A hasta Glu61 de la subunidad C del complejo  $F_0$  de la  $F_1F_0$  ATP sintasa, que conduce a la muerte de las bacterias por agotamiento de los niveles de ATP celular de las bacterias. Los compuestos identificados usando cualquiera de los susodichos métodos de cribado son particularmente activos contra bacterias grampositivas, más particularmente micobacterias, y lo más particularmente contra infecciones provocadas por *M. africanum*, *M. avium*, *M. bovis*, *M. bovis-BCG*, *M. chelonae*, *M. fortuitum*, *M. gordonae*, *M. intracellulare*, *M. kansasii*, *M. microti*, *M. scrofulaceum*, *M. paratuberculosis*, *M. leprea*, *M. tuberculosis*, *M. ulcerans* y *M. ranae*.

Siempre que se use anteriormente o posteriormente en la presente, por que los compuestos puedan tratar una infección bacteriana se entiende que los compuestos puedan tratar una infección con una o más cepas bacterianas. Sin embargo, cuando se usa, en relación con el uso de DARQ J como un compuesto antimicrobiano, se entiende que antimicrobiano es un compuesto que pueda tratar una infección con una o más cepas bacterianas, con la condición de que dichas cepas bacterianas sean distintas de micobacterias.

Infecciones bacterianas que se pueden tratar mediante los presentes compuestos incluyen, por ejemplo, infecciones del sistema nervioso central, infecciones del oído externo, infecciones del oído medio, tales como otitis media aguda, infecciones de los senos craneales, infecciones oculares, infecciones de la cavidad oral, tales como infecciones de los dientes, las encías y la mucosa, infecciones de tracto respiratorio superior, infecciones del tracto respiratorio inferior, infecciones genitourinarias, infecciones gastrointestinales, infecciones ginecológicas, septicemia, infecciones de los huesos y las articulaciones, infecciones de la piel y la estructura cutánea, endocarditis bacteriana, quemaduras, profilaxis antibacteriana de la cirugía y profilaxis antibacteriana de pacientes inmunosuprimidos, tales como pacientes que reciben quimioterapia contra el cáncer, o pacientes de trasplante de órganos.

Esta invención proporciona además un método para tratar a un sujeto afectado de tuberculosis que comprende administrar al sujeto un agente que interactúa con una proteína atpE.

#### Composiciones farmacéuticas

Esta invención proporciona además una composición farmacéutica que comprende un agente que interactúa con una proteína atpE en una células y un vehículos farmacéuticamente aceptable.

Estos agentes se pueden formular en composiciones que comprenden un agente junto con un vehículo o diluyente farmacéuticamente aceptable. El agente puede en la forma de un derivado fisiológicamente funcional, tal como un éster o una sal, tal como una sal por adición de ácido o una sal metálica básica, o un N- o S-óxido. Las composiciones se pueden formular para cualesquiera vía y medio de administración adecuados. Vehículos o diluyentes farmacéuticamente aceptables incluyen los usados en formulaciones adecuadas para la administración oral, rectal, nasal, inhalable, tópica (incluyendo yugal y sublingual), vaginal o parenteral (incluyendo subcutánea, intramuscular, intravenosa, intradérmica, intratecal y epidural). La elección del vehículo o diluyente dependerá por supuesto de la vía de administración propuesta, que puede depender del agente y su propósito terapéutico. Las formulaciones se pueden presentar convenientemente en forma de dosificación unitaria y se pueden preparar mediante cualquiera de los métodos bien conocidos en la técnica de la farmacia. Estos métodos incluyen la etapa de asociar el ingrediente activo con el vehículo que constituye uno o más ingredientes auxiliares. En general, las formulaciones se preparan al asociar uniformemente e íntimamente el ingrediente activo con vehículos líquidos o vehículos sólidos finamente divididos o ambos, y a continuación, si es necesario, conformar el producto.

Para las composiciones sólidas, vehículos sólidos atóxicos convencionales incluyen, por ejemplo, calidades farmacéuticas de manitol, lactosa, celulosa, derivados de celulosa, almidón, estearato magnésico, sacarina sódica, talco, glucosa, sacarosa, carbonato magnésico y similares. El compuesto activo que se define anteriormente se puede formular como supositorios usando, por ejemplo, polialquilenglicoles, triglicéridos acetilados y similares, como el vehículo. Las composiciones líquidas farmacéuticamente administrables se pueden preparar, por ejemplo, al disolver, dispersar, etc., un compuesto activo como el definido anteriormente y adyuvantes farmacéuticos opcionales en un vehículo, tal como, por ejemplo, agua, dextrosa acuosa salina, glicerol, etanol y similares, para formar de ese modo una solución o suspensión. Si se desea, la composición farmacéutica que se va a administrar también puede contener cantidades menores de sustancias auxiliares atóxicas tales como agentes humectantes o emulsionantes, agentes tamponadores del pH y similares, por ejemplo, acetato sódico, monolaurato de sorbitano, acetato sódico de trietanolamina, monolaurato de sorbitano, oleato de trietanolamina, etc. Los métodos reales para preparar estas formas de dosificación son conocidos, o serán evidentes, para los expertos en esta técnica; por ejemplo, véase Gennaro y cols., Remington's Pharmaceutical Sciences, Mack Publishing Company, Easton, Pennsylvania, 18ª Edición, 1990.

La composición o formulación que se va a administrar contendrá, en cualquier caso, una cantidad del compuesto o los compuestos activos en una cantidad eficaz para aliviar los síntomas del sujeto que se trate.

La dosificación y la frecuencia de administración exactas de los presentes compuestos depende del compuesto particular usado, la afección particular que se trate, la gravedad de la afección que se trate, la edad, el peso, el género, la dieta, el tiempo de administración y la afección física general del paciente particular, el modo de administración así como otra medicación que pueda estar tomando el individuo, como es bien sabido por los expertos en la técnica. Por otra parte, es e que la cantidad diaria eficaz de puede disminuir o incrementar dependiendo de la respuesta del sujeto tratado y/o dependiendo de la evaluación del médico que prescribe los compuestos de la presente invención.

Se pueden preparar formas de dosificación o composiciones que contienen ingrediente activo en el intervalo de 0,25 a 95% con el resto constituido por vehículo atóxico. Dependiendo del modo de administración, la composición farmacéutica comprenderá preferiblemente de 0,05 a 99% en peso, más preferiblemente de 0,1 a 70% en peso de los ingredientes activos, y de 1 a 99,95% en peso, más preferiblemente de 30 a 99,9% en peso de un vehículo farmacéuticamente aceptable, basándose todos los porcentajes en la composición total.

Para la administración oral, una composición atóxica farmacéuticamente aceptable se forma mediante la incorporación de cualquiera de los excipientes normalmente empleados, tales como, por ejemplo, calidades farmacéuticas de manitol, lactosa, celulosa, derivados de celulosa, croscarmelosa sódica, almidón, estearato magnésico, sacarina sódica, talco, glucosa, sacarosa, carbonato magnésico y similares. Estas composiciones toman la forma de soluciones, suspensiones, comprimidos, píldoras, cápsulas, polvos, formulaciones de liberación sostenida y similares. Estas composiciones pueden contener 1%-95% de ingrediente activo, más preferiblemente 2-50%, lo más preferiblemente 5-8%.

La administración parenteral se caracteriza generalmente por la inyección, bien subcutáneamente, bien intramuscularmente o bien intravenosamente. Se pueden preparar productos inyectables en formas convencionales, bien como soluciones o suspensiones líquidas, bien formas sólidas adecuadas para disolución o suspensión en un líquido antes de la inyección o bien como emulsiones. Excipientes adecuados son, por ejemplo, agua, solución salina, dextrosa, glicerol, etanol o similares. Además, si se desea, las composiciones farmacéuticas que se van a administrar también pueden contener cantidades menores de sustancias auxiliares atóxicas tales como agentes humectantes o emulsionantes, agentes tamponadores del pH y similares, tales como, por ejemplo, acetato sódico, monolaurato de sorbitano, oleato de trietanolamina, acetato sódico de trietanolamina, etc.

El porcentaje de compuesto activo contenido en estas composiciones originales depende mucho de la naturaleza específica del mismo, así como de la actividad del compuesto y las necesidades del sujeto. Sin embargo, se pueden emplear porcentajes de ingrediente activo de 0,1% a 10% en solución, y serán superiores si la composición es un sólido que posteriormente se diluirá hasta los porcentajes anteriores. Preferiblemente, la composición comprenderá 0,2-2% del agente activo en solución.

Finalmente, esta invención proporciona un artículo de fabricación que comprende un envase y un agente farmacéutico, en el que (a) el agente farmacéutico interactúa con una proteína atpE en una célula, y (b) el envase comprende una etiqueta que indica el uso del agente para tratar una infección bacteriana en un sujeto. En particular, como un medicamento antimicobacteriano.

A lo largo de esta descripción, los términos "métodos estándar", "protocolos estándar" y "procedimientos estándar", cuando se usan en el contexto de técnicas de biología molecular, se han de entender como protocolos y procedimientos encontrados en un manual de laboratorio normal tal como: Current Protocols in Molecular Biology, editores F. Ausubel y cols., John Wiley and Sons, Inc. 1994, o Sambrook, J., Fritsch, E.F. y Maniatis, T., Molecular Cloning: A laboratory manual, 2ª Ed., Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, NY 1989.

Esta invención se entenderá mejor mediante referencia a los Detalles experimentales que siguen, pero los expertos en la técnica apreciarán fácilmente que estos son solo ilustrativos de la invención que se describe más a fondo en las reivindicaciones que siguen más adelante.

## Parte experimental

5 Usando *Mycobacterium smegmatis* como un sustituto, se descubrió una serie de DARQs con potente actividad *in vitro* contra varias micobacterias (11). Hasta la fecha, 20 moléculas de la serie de DARQ tienen una concentración inhibidora mínima (MIC) por debajo de 0,5 µg/ml contra *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv, y para tres de estas la actividad antimicobacteriana se confirmó en el modelo de ratones *in vivo*.

10 Estructuralmente y mecánicamente, las DARQs son muy diferentes tanto de las fluoroquinolonas (incluyendo metoxiquinolonas) como de otras clases de quinolinas, incluyendo mefloquina y sus análogos, 4-metilquinolinas y 4-quinolilhidrazonas (12-16). Una de las principales diferencias estructurales entre las DARQs y otras clases de quinolonas o quinolinas es la especificidad del esqueleto de la cadena lateral (3') funcionalizada por la clase de DARQ. Además, la falta de resistencia cruzada micobacteriana con clases químicas existentes apunta a un mecanismo de acción diferente.

15 Se encontró que el compuesto principal de las DARQs, en lo sucesivo denominado J o DARQ J (Fig. 1), tiene un espectro único de actividad antimicobacteriana potente y selectiva *in vitro* (Tabla 1). La MIC mediana, obtenida para la cepa de laboratorio H37Rv y seis aislados totalmente sensibles, era 0,060 µg/ml, frente a 1,00 µg/ml para la rifampina. J demostró una eficacia similar *in vitro* contra aislados clínicos de *M. tuberculosis* resistentes a los  
20 agentes para TB de primera línea rifampina, estreptomycin, etambutol y piracinamida; y el agente para TB de segunda línea moxifloxacina. Para ocho aislados clínicos resistentes a isoniazida, la MIC mediana era 0,010 µg/ml. La falta de resistencia cruzada con agentes anti-TB actualmente usados sugería que J puede retener actividad contra cepas de MDR-TB. En efecto, usando el sistema de cultivo BACTEC™, se observaba una clara inhibición del crecimiento bacteriano dependiente de la concentración cuando las cepas MDR-TB se exponían a concentraciones  
25 fijadas de J. De los 30 aislados de MDR-TB, se encontró que 13 (43%) eran sensibles a 0,100 µg/ml de J y 17 (57%) eran sensibles a 0,010 µg/ml de J. Se observó un alto grado de sensibilidad similar (MIC por debajo de 0,010 µg/ml) para una sola de 10 cepas totalmente sensibles al fármaco adicionales, cuando se probaban usando el sistema BACTEC™, mientras que todas las cepas eran sensibles a 0,100 µg/ml de J.

30 También se demostró una potente actividad contra otras especies micobacterianas incluyendo *Mycobacterium bovis* y *Mycobacterium kansasii*, así como especies naturalmente resistentes a muchos otros agentes anti-TB e implicadas en infecciones oportunistas, tales como complejo de *Mycobacterium avium* (MAC), *Mycobacterium abscessus*, *Mycobacterium fortuitum* y *Mycobacterium marinum* (Tabla 1).

35 Sorprendentemente, la actividad de J parecía ser específica para micobacterias. J era poco activo contra especies cercanas a micobacterias tales como *Corynebacterium* (MIC 4,00 µg/ml) y *Nocardia* (MIC > 4,00 µg/ml) y no era activo contra otros organismos incluyendo *Streptococcus pneumoniae*, *Staphylococcus aureus* – incluyendo cepas resistentes a meticilina (MIC > 32 µg/ml) – y *Enterococcus faecalis* grampositivos o *Escherichia coli*, *Haemophilus influenzae* y *Helicobacter pylori* gramnegativos. La exposición de *M. tuberculosis* en el crecimiento en fase  
40 logarítmica a concentraciones de J en 100 x MIC daba como resultado una reducción logarítmica 10<sup>3</sup> en los recuentos bacterianos después de 12 días, indicando que J tiene actividad bactericida *in vitro*. El efecto de J sobre bacilos de tuberculosis en fase estacionaria todavía no se ha estudiado.

45 Aislamiento de mutantes, resistencia cruzada y objetivo farmacológico postulado

Al investigar la resistencia micobacteriana, se buscaba identificar el objetivo farmacológico molecular y proponer un mecanismo de acción. Se derivaron mutantes resistentes de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* mediante selección *in vitro* a concentraciones inhibitorias de J, a fin de:

- 50 - cuantificar la proporción de mutantes resistentes en micobacterias (con rifampina como un control)
- evaluar el patrón de resistencia de mutantes resistentes (incluyendo resistencia cruzada/no cruzada a quinolonas)
- investigar el mecanismo de acción.

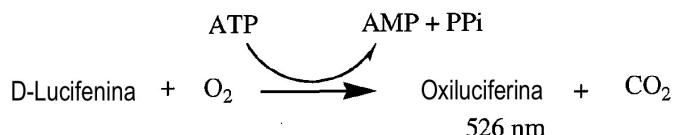
55 A partir de experimentos de selección, la proporción de mutantes con sensibilidad reducida a J era 5 x 10<sup>-7</sup> y 2 x 10<sup>-8</sup> a MIC x 4, y 5 x 10<sup>-8</sup> y 1 x 10<sup>-8</sup> a MIC x 8 para *M. tuberculosis* y *M. smegmatis*, respectivamente (apoyando el texto en línea). En el caso de *M. tuberculosis*, estas proporciones eran comparables a las de mutantes resistentes a rifampina (10<sup>-7</sup> a 10<sup>-8</sup>) e indica que la resistencia presente en la naturaleza a J es rara. Además, la sensibilidad de las cepas de *M. tuberculosis* resistentes a J permanecía inalterada para los agentes anti-TB isoniazida, rifampina,

estreptomicina, amikacina, etambutol y moxifloxacina. Un análisis adicional de mutantes de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* con una sensibilidad reducida a J mostraba que no había mutaciones en las regiones de ADN girasa *gyrA* y *gyrB*, secuencias en las que típicamente se desarrolla resistencia a quinolonas. Esto confirma que el objetivo molecular para J es diferente del de las fluoroquinolonas.

Un enfoque para determinar el objetivo molecular para J e inferir un mecanismo de acción es identificar y comparar mutaciones que confieren resistencia en cepas de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* sensibles y resistentes. Los genomas de la cepa de *M. tuberculosis* BK12 resistente y las dos cepas de *M. smegmatis* R09 y R10 resistentes, así como la *M. smegmatis* parental, se secuenciaron casi hasta la terminación. Se identificaron mutaciones que confieren resistencia mediante el análisis comparativo de las secuencias genómicas de cepas de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* sensibles y resistentes (Fig. 2). Se mostró que el único gen afectado en los tres mutantes independientes frente al tipo silvestre parental correspondiente codifica *atpE*, una parte de la subunidad F0 de ATP sintasa. Esto sugiere que *atpE* es responsable de la resistencia a J en las cepas mutantes, indicando que J inhibe un nuevo objetivo de *M. tuberculosis*, la bomba de protones de ATP sintasa.

Se realizaron estudios complementarios para mostrar que el gen de *atpE* mutante es responsable de la resistencia a J y mediante inferencia directa que el producto del gen de *atpE* es el objetivo de J en las micobacterias. Dado el hecho de que se sabe que todos los genes del operón de ATP sintasa tienen que ser expresados de un modo coordinado, es decir todos los genes que codifican la parte F0 tienen que ser expresados desde la misma localización, se amplificó la parte F0 del operón a partir de la cepa de *M. smegmatis* resistente (D32V) y se seleccionaron clones que no adquirieran mutaciones adicionales a través del procedimiento de PCR. Se transformó *M. smegmatis* silvestre con un plásmido que contenía el fragmento F0 mutante así seleccionado. Esto volvía las células resistentes a J con una MIC prácticamente idéntica a la de la cepa resistente *M. smegmatis* R09 (D32V). Además, cuando el plásmido se reaislaba de estos transformantes y el gen de *atpE* se secuenciaba, se mostró que había permanecido el alelo mutante (D32V).

El efecto real de DARQ J sobre la producción de ATP en *M. tuberculosis* se demostró adicionalmente al medir el efecto de J sobre el ATP celular total presente en las micobacterias usando el ATP Bioluminescence Luciferase Assay Kit HS II de Roche. Este ensayo se basa en la conversión conducida por ATP de D-luciferina en oxiluciferina que se puede medir a 526 nm.



Brevemente, se probó el efecto de DARQ J sobre el ATP total en *M. tuberculosis* tanto silvestre como en la cepa mutante. Se usó DCCD, que es un inhibidor muy conocido de ATP sintasa, como un control positivo y se usó isoniazida, que es un inhibidor para la biosíntesis de ciertos componentes de la pared celular, pero no tiene efecto sobre la producción de ATP, como un control negativo.

Como se puede observar en la Fig. 3, el tratamiento de la *M. tuberculosis* silvestre con DARQ J conduce a una disminución dependiente de la dosis en la producción de ATP en estas bacterias. En contraste, la isoniazida no tiene efecto sobre la producción de ATP. Como ya se describió anteriormente en la presente, exponer estas bacterias a una alta concentración de la DARQ J elevaba los mutantes de *M. tuberculosis* resistentes a diarilquinolinas. Cuando estas *M. tuberculosis* resistentes se trataban con DARQ J, estas bacterias no mostraban ninguna disminución en la producción de ATP incluso con 100 veces la concentración inhibitoria mínima (MIC) de este compuesto. En contraste DCCD era capaz de bloquear la producción de ATP en estos bacilos, sugiriendo que DARQ J y DCCD tienen diferentes bolsillos de unión en ATP sintasas.

#### Modelado e identificación informáticos de la región de unión de DARQ J

Para investigar adicionalmente el diferente modo de acción de DCCD y DARQ J, se generó un modelo 3D generado informáticamente de la ATP sintasa para la *M. tuberculosis* tanto silvestre como mutante DARQ J. Las coordenadas atómicas proporcionadas en las Tablas 4 y 5 se computaron al preparar un modelo de la estructura 3D de las secuencias de aminoácidos publicadas P63691 y AJ865377. Se encontró que el sitio de unión real de DARQ J estaba situado en la zona de contacto de las subunidades A y C, más en particular alrededor del aminoácido 'Arg 210' de la subunidad A y 'Glu 61' de la subunidad C, como se indica en las tablas 3, 4 o 5. Esto se ajusta bien a los resultados observados para el cribado de mutaciones que confieren resistencia en cepas de *M. tuberculosis* y *M. smegmatis* sensibles y resistentes, descritas anteriormente.

El modelo se basa en la optimización de la colocación relativa de las hélices A y C de la estructura de ATPasa y la orientación del esqueleto y la cadena lateral de aminoácidos hacia una deformación interna calculada mínima. La

geometría se obtuvo por medio de un número de ciclos de estimulación dinámica molecular y relajaciones mecánicas moleculares partiendo de la geometría helicoidal general previamente publicada de un organismo diferente [E-Coli PDB código de entrada 1C17 - V.K. Rastogi y M.E. Girvin, Nature, 402, 263-268 (1999)]. La dinámica molecular y la relajación realizaron ambas con una parametrización de campo forzado basada en MMFF94s [Halgren, T.A. (1996), J. Comput. Chem., 17, 490-519], pero se podría emplear cualquier estado del software de dinámica molecular de la técnica [Berendsen, H.J.C., van der Spoel, D. y van Drunen, R., Comp. Phys. Comm. 91 (1995), 43-56; Lindahl, E., Hess, B. y van der Spoel, D., J. Mol. Mod. 7 (2001) 306-317.] seguido por una optimización geométrica adecuada [J. W. Ponder y F. M. Richards, J. Comput. Chem., 8, 1016-1024 (1987)].

- 10 Las coordenadas calculada en las tablas 3, 4 y 5 comprenden la parte (con un volumen de radio de 30 angstroms) de la estructura predicha de la región considerada pertinente para la inhibición de la actividad de ATPasa de MTB en estas enzimas, basándose en el modo de inhibición propuesto y en la presencia de mutaciones puntuales inductoras de resistencia en ensayos biológicos.

#### Análisis

- 15 La DARQ J es un miembro de una nueva clase química de agentes anti-TB con una MIC igual a o menor que la de compuestos de referencia. Su espectro es único en su especificidad para micobacterias, incluyendo especies atípicas importantes en seres humanos; MAC, *M. kansasii* y las *M. fortuitum* y *M. abscessus* de desarrollo rápido. Este espectro antimicobacterianamente específico difiere del de la isoniazida, que no tiene actividad contra MAC. El uso clínico de J se dirigirá en gran parte al tratamiento de TB e infecciones micobacterianas. La incapacidad de J para inhibir no micobacterias se debe traducir en que se desarrollen menos presión menos y menor riesgo de resistencia en otras especies bacterianas, en comparación con anticuerpos con espectros más amplios (9).

- 25 El objetivo y el mecanismo de acción de J es diferente del de otros agentes anti-TB. Una comparación de las secuencias de ATP sintasas de diferentes bacterias y de ATP sintasa eucariótica, y en particular de la cadena C de la subunidad F0 del complejo de ATPasa, junto con el modelado 3D de las ATP sintasas de la *M. tuberculosis* silvestre y mutante, proporciona una razón fundamental para la especificidad del espectro antibacteriano y, en un grado menor, el perfil de seguridad.

- 30 El estudio dinámico realizado sobre los modelos de ATPasas de Mycobacterium construidos muestran que en estas estructuras existe una cavidad (el sitio de unión según las coordenadas atómicas de la Tabla 3) en la zona de contacto de las subunidades A y C (alrededor del aminoácido 'Arg 210' de la subunidad A y 'Glu 61' de la subunidad C). Las tablas 4 y 5 proporcionan las coordenadas de dos variantes estudiadas de los átomos alrededor de este sitio, y su posición media. El inhibidor DARQ J es capaz de interferir con la etapa de transferencia protónica normal que implica a estos dos aminoácidos al prohibir que estos dos aminoácidos interactúen. La estereoespecificidad de DARQ J se puede entender por la asimetría del sitio de unión predicho; el enantiómero quiral activo se ajusta a esta cavidad óptimamente, otras formas del compuesto y variantes de ATPasa coinciden peor.

- 40 El sitio de unión que los presentes inventores han derivado está sobre una parte totalmente diferente del sistema de ATPasa que DCCD (las DARQs están en la parte de la membrana de la enzima, la unión a DCCD se produce aproximadamente 90 angstroms más allá dentro de la célula; basándose en la estructura de PDB de una cristal de ATPasa bovina "1E79" – publicado en C.Gibbons, M.G.Montgomery, A.G.W. Leslie, J.E.Walker, Nat.Struct.Biol.,7,1055 (2000). Por lo tanto, los átomos que podrían estar implicados potencialmente con la inhibición tipo DCCD de ATPasa de MTB no están en la región listada en las tablas de coordenadas del sitio de unión (que solo abarca junto la porción de membrana de la enzima) y, recíprocamente, esta parte de la enzima implicada en el modo de inhibición de DARQ J no está presente en la estructura de "1E79" publicada (que sólo muestra la parte intracelular). Esta diferencia en el sitio de unión puede explicar la diferente respuesta de *M. tuberculosis* observada en el ensayo de producción de ATP *in vitro*.

- 50 A pesar de lo anterior, estudios más antiguos con DCCD sobre ATPasas mitocondriales sugieren otro sitio de unión situado alrededor de un aminoácido ácido en un ambiente lipófilo de la región F0 de la enzima, p. ej. por Sebald W, Machleidt W, Wachter E., Proc Natl Acad Sci U S A. 1980 Feb;77(2):785-789. Esta posición de unión en ATPasas mitocondriales se puede considerar análoga a la descrita para la especie *Mycobacterium* en la presente.

- 55 Al mismo tiempo, la elección como objetivo de un nuevo mecanismo asegura que las capas de TB actualmente en circulación con mutaciones de resistencia a tratamientos disponibles no sean resistentes cruzadamente a J. Es obvio a partir de los presentes estudios *in vitro* que J tiene un efecto antibacteriano al menos tan alto contra aislados de MDR-TB, incluso contra aquellos con una resistencia amplia a cuatro fármacos, como contra cepas de *M. tuberculosis* pansensibles silvestres normales. Esta observación es importante ya que demuestra claramente que no hay resistencia cruzada con fármacos anti-TB existentes. Dada la identificación adicional del bolsillo de unión de la parte de membrana de la ATPasa, los resultados de este estudio permitirán un desarrollo adicional de nuevos compuestos antibacterianos, en particular compuestos antimicobacterianos que eligen como objetivo la síntesis de ATP en estos organismos.

# REFERENCIAS

- 5 1. Global Alliance for TB Drug Development, Developing a faster TB cure (2004; <http://www.tballiance.org>).
2. E. L. Corbett y cols., Arch. Intern. Med. 163, 1009 (2003).
3. UNAIDS, AIDS epidemic update 2003 (2003; [www.unaids.org/Unaid/EN/Resources](http://www.unaids.org/Unaid/EN/Resources)).
4. World Health Organization, Tuberculosis (2004; <http://www.who.int/health topics/tuberculosis/en/>).
5. R. J. O'Brien, P. P. Nunn, Am. J. Respir. Crit. Care Med. 163, 1055 (2001).
- 10 6. World Health Organization, Tuberculosis Fact Sheet No 104 (2004; <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs104/en/>).
7. A. J. Claxton, J. Cramer, C. Pierce, Clin. Ther. 23, 1296 (2001).
8. N. Lounis y cols., Antimicrob. Agents Chemother. 45, 3482 (2001).
9. A. S. Ginsburg, J. H. Grosset, W. R. Bishai, Lancet Infect. Dis. 3, 432 (2003).
- 15 10. C. K. Stover y cols., Nature 405, 962 (2000).
11. Guillemont J, Emile G, Patente (Publicación Internacional Número WO 2004/011436. Fecha de Publicación Internacional 5 de febrero de 2004).
12. Barbachyn MR, Brickner SJ, Patente (Publicación Internacional Número: WO 93/09103, Fecha de Publicación Internacional: 13 de mayo de 1993, Solicitud Internacional Número: PCT/US92/08267, Fecha de Presentación Internacional: 1992).
- 20 13. R. Jain, B. Vaitilingam, A. Nayyar, P. B. Palde, Bioorg. Med. Chem. Lett. 13, 1051 (2003).
14. C. M. Kunin, W. Y. Ellis, Antimicrob. Agents Chemother. 44, 848 (2000).
15. L. Savini, L. Chiasserini, A. Gaeta, C. Pellerano, Bioorg. Med Chem 10, 2193 (2002).
16. S. Vangapandu, M. Jain, R. Jain, S. Kaur, P. P. Singh, Bioorg. Med. Chem. 12, 2501 (2004).
- 25 17. K. Andries y cols., Science 307, 223 (2005).

**Tabla 1**

| Especies micobacterianas                                                 | MIC (µg/ml)<br>Valores medios |
|--------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| <i>M. tuberculosis</i> , H37Rv                                           | 0,030                         |
| <i>M. tuberculosis</i> , aislados clínicos totalmente sensibles, 6 cepas | 0,060                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a isoniazida, 8 cepas                  | 0,010                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a rifampina                            | 0,030                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a isoniazida y rifampina, 2 cepas      | 0,030                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a isoniazida y estreptomycin           | 0,010                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a etambutol                            | 0,010                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a piracinamida                         | 0,030                         |
| <i>M. tuberculosis</i> resistente a moxifloxacina, 2 cepas               | 0,090                         |
| <i>M. bovis</i>                                                          | 0,003                         |
| Complejo de <i>M. avium</i> , 7 cepas                                    | 0,010                         |
| <i>M. kansasii</i>                                                       | 0,003                         |
| <i>M. marinum</i>                                                        | 0,003                         |
| <i>M. fortuitum</i> , 3 cepas                                            | 0,010                         |
| <i>M. fortuitum</i> resistente a fluoroquinolona, 2 cepas                | 0,010                         |
| <i>M. abscessus</i>                                                      | 0,250                         |
| <i>M. smegmatis</i> , 7 cepas                                            | 0,007                         |

**Tabla 2**

Secuencia P63691 = SEQ ID N° 1 = subunidad C de MYCTUB, silvestre

Secuencia AJ865377 = SEQ ID N° 2 = subunidad C de MYCTUB, mutante

Secuencia P63654 = SEQ ID N° 11 = subunidad A de MYCTUB, silvestre y mutante

Aminoácidos que rodean el sitio de unión basándose en las coordenadas atómicas de la Tabla 3

## subunidad C 1 ## - cadena

Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup>

## subunidad C 2 ## - cadena K

Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup>

## subunidad C 3 ## - cadena L

Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup>.

## subunidad A ## - cadena M

Ser<sup>182</sup>, Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup>, Arg<sup>186</sup> (que tienen los códigos Ser 206 - Leu 207 - Leu 209 y Arg 210 en las Tablas 3)

**Tabla 3**

|       |    |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 1  | N   | ALA | A | 21 | 6,113   | -13,437 | -0,893 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 2  | CA  | ALA | A | 21 | 5,269   | -13,569 | 0,293  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 3  | C   | ALA | A | 21 | 3,954   | -12,807 | 0,141  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 4  | O   | ALA | A | 21 | 2,885   | -13,379 | 0,316  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 5  | CB  | ALA | A | 21 | 5,986   | -13,138 | 1,571  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 6  | N   | GLY | A | 25 | -0,067  | -14,118 | -0,399 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 7  | CA  | GLY | A | 25 | -1,020  | -13,780 | 0,640  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 8  | C   | GLY | A | 25 | -2,283  | -13,168 | 0,073  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 9  | O   | GLY | A | 25 | -3,376  | -13,689 | 0,241  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 10 | N   | ALA | K | 24 | -1,077  | -5,399  | 11,361 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 11 | CA  | ALA | K | 24 | -1,976  | -5,787  | 12,444 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 12 | C   | ALA | K | 24 | -3,305  | -5,041  | 12,351 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 13 | O   | ALA | K | 24 | -4,356  | -5,642  | 12,491 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 14 | CB  | ALA | K | 24 | -1,345  | -5,577  | 13,818 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 15 | N   | GLY | K | 27 | -5,452  | -6,238  | 9,570  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 16 | CA  | GLY | K | 27 | -5,851  | -7,589  | 9,928  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 17 | C   | GLY | K | 27 | -7,090  | -7,620  | 10,800 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 18 | O   | GLY | K | 27 | -8,059  | -8,290  | 10,473 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 19 | N   | PHE | K | 53 | -11,017 | -14,602 | 19,149 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 20 | CA  | PHE | K | 53 | -9,784  | -15,282 | 18,770 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 21 | C   | PHE | K | 53 | -9,069  | -14,469 | 17,700 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 22 | O   | PHE | K | 53 | -7,894  | -14,188 | 17,837 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 23 | CB  | PHE | K | 53 | -10,007 | -16,732 | 18,330 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 24 | CG  | PHE | K | 53 | -8,712  | -17,498 | 18,270 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 25 | CD1 | PHE | K | 53 | -7,970  | -17,568 | 17,070 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 26 | CD2 | PHE | K | 53 | -8,215  | -18,156 | 19,416 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 27 | CE1 | PHE | K | 53 | -6,755  | -18,266 | 17,025 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 28 | CE2 | PHE | K | 53 | -7,002  | -18,858 | 19,365 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 29 | CZ  | PHE | K | 53 | -6,270  | -18,911 | 18,171 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 30 | N   | PHE | K | 54 | -9,831  | -14,105 | 16,597 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 31 | CA  | PHE | K | 54 | -9,260  | -13,364 | 15,476 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 32 | C   | PHE | K | 54 | -8,595  | -12,097 | 15,996 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 33 | O   | PHE | K | 54 | -7,423  | -11,868 | 15,755 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 34 | CB  | PHE | K | 54 | -10,281 | -12,983 | 14,388 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 35 | CG  | PHE | K | 54 | -10,604 | -14,066 | 13,398 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 36 | CD1 | PHE | K | 54 | -9,957  | -14,298 | 12,312 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 37 | CD2 | PHE | K | 54 | -11,580 | -14,820 | 13,486 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 38 | CE1 | PHE | K | 54 | -10,285 | -15,248 | 11,337 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 39 | CE2 | PHE | K | 54 | -11,905 | -15,767 | 12,506 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 40 | CZ  | PHE | K | 54 | -11,260 | -15,979 | 11,430 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 41 | N   | VAL | K | 57 | -5,533  | -12,244 | 18,563 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 42 | CA  | VAL | K | 57 | -4,302  | -12,645 | 17,888 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 43 | C   | VAL | K | 57 | -3,748  | -11,428 | 17,142 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 44 | O   | VAL | K | 57 | -2,561  | -11,155 | 17,226 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 45 | CB  | VAL | K | 57 | -4,472  | -13,892 | 16,988 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 3 (continuación)

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 46 | CG1 | VAL | K | 57 | -3,247 | -14,150 | 16,128 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 47 | CG2 | VAL | K | 57 | -4,733 | -15,142 | 17,831 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 48 | N   | GLY | K | 58 | -4,660 | -10,700 | 16,389 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 49 | CA  | GLY | K | 58 | -4,292 | -9,496  | 15,662 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 50 | C   | GLY | K | 58 | -3,574 | -8,479  | 16,534 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 51 | O   | GLY | K | 58 | -2,502 | -8,003  | 16,192 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 52 | N   | GLU | K | 61 | -0,207 | -9,648  | 18,102 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 53 | CA  | GLU | K | 61 | 0,806  | -9,654  | 17,043 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 54 | C   | GLU | K | 61 | 1,665  | -8,402  | 17,132 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 55 | O   | GLU | K | 61 | 2,877  | -8,491  | 17,077 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 56 | CB  | GLU | K | 61 | 0,193  | -9,817  | 15,646 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 57 | CG  | GLU | K | 61 | 1,204  | -9,858  | 14,524 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 58 | CD  | GLU | K | 61 | 0,555  | -10,023 | 13,178 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 59 | OE1 | GLU | K | 61 | -0,140 | -9,444  | 12,697 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 60 | OE2 | GLU | K | 61 | 0,829  | -10,852 | 12,555 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 61 | N   | TYR | K | 64 | 4,232  | -8,387  | 19,897 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 62 | CA  | TYR | K | 64 | 5,349  | -9,298  | 19,625 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 63 | C   | TYR | K | 64 | 6,441  | -8,615  | 18,816 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 64 | O   | TYR | K | 64 | 7,607  | -8,776  | 19,118 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 65 | CB  | TYR | K | 64 | 4,964  | -10,610 | 18,922 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 66 | CG  | TYR | K | 64 | 4,033  | -11,512 | 19,656 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 67 | CD1 | TYR | K | 64 | 4,038  | -11,638 | 21,058 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 68 | CD2 | TYR | K | 64 | 3,155  | -12,305 | 18,914 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 69 | CE1 | TYR | K | 64 | 3,176  | -12,505 | 21,695 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 70 | CE2 | TYR | K | 64 | 2,306  | -13,187 | 19,542 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 71 | CZ  | TYR | K | 64 | 2,318  | -13,274 | 20,937 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 72 | OH  | TYR | K | 64 | 1,474  | -14,099 | 21,599 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 73 | N   | PHE | K | 65 | 6,031  | -7,871  | 17,720 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 74 | CA  | PHE | K | 65 | 6,997  | -7,165  | 16,873 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 75 | C   | PHE | K | 65 | 7,762  | -6,104  | 17,631 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 76 | O   | PHE | K | 65 | 8,941  | -5,932  | 17,396 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 77 | CB  | PHE | K | 65 | 6,392  | -6,543  | 15,630 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 78 | CG  | PHE | K | 65 | 5,963  | -7,560  | 14,648 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 79 | CD1 | PHE | K | 65 | 5,824  | -7,882  | 14,293 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 80 | CE1 | PHE | K | 65 | 5,429  | -8,819  | 13,385 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 81 | CZ  | PHE | K | 65 | 5,167  | -9,448  | 12,818 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 82 | CE2 | PHE | K | 65 | 5,302  | -9,137  | 13,148 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 83 | CD2 | PHE | K | 65 | 5,697  | -8,196  | 14,053 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 84 | N   | MET | L | 17 | 11,107 | -10,632 | 7,686  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 85 | CA  | MET | L | 17 | 10,139 | -10,826 | 8,764  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 86 | C   | MET | L | 17 | 8,887  | -9,997  | 8,526  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 87 | O   | MET | L | 17 | 7,804  | -10,514 | 8,641  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 88 | CB  | MET | L | 17 | 10,705 | -10,543 | 10,163 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 89 | CG  | MET | L | 17 | 11,688 | -11,601 | 10,657 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 3 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |         |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|---------|------|------|---|
| ÁTOMO | 90  | SD  | MET | L | 17 | 10,846 | -13,177 | 10,983  | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 91  | CE  | MET | L | 17 | 11,507 | -14,142 | 9,610   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 92  | N   | GLY | L | 19 | 7,665  | -8,503  | 5,731   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 93  | CA  | GLY | L | 19 | 6,955  | -8,955  | 4,577   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 94  | C   | GLY | L | 19 | 6,222  | -10,215 | 4,817   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 95  | O   | GLY | L | 19 | 5,027  | -10,326 | 4,589   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 96  | N   | GLY | L | 20 | 7,028  | -11,189 | 5,274   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 97  | CA  | GLY | L | 20 | 6,545  | -12,472 | 5,462   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 98  | C   | GLY | L | 20 | 5,400  | -12,516 | 6,352   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 99  | O   | GLY | L | 20 | 4,328  | -12,921 | 5,962   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 100 | N   | ALA | L | 21 | 5,696  | -12,094 | 7,607   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 101 | CA  | ALA | L | 21 | 4,773  | -12,247 | 8,668   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 102 | C   | ALA | L | 21 | 3,441  | -11,568 | 8,418   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 103 | O   | ALA | L | 21 | 2,401  | -12,101 | 8,724   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 104 | CB  | ALA | L | 21 | 5,365  | -11,795 | 9,953   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 105 | N   | ILE | L | 22 | 3,503  | -10,313 | 7,908   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 106 | CA  | ILE | L | 22 | 2,293  | -9,551  | 7,618   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 107 | C   | ILE | L | 22 | 1,551  | -10,212 | 6,464   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 108 | O   | ILE | L | 22 | 0,349  | -10,406 | 6,550   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 109 | CB  | ILE | L | 22 | 2,557  | -8,055  | 7,417   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 110 | CG1 | ILE | L | 22 | 2,757  | -7,350  | 8,740   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 111 | CG2 | ILE | L | 22 | 1,424  | -7,339  | 6,679   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 112 | CD1 | ILE | L | 22 | 3,979  | -7,733  | 9,410   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 113 | N   | GLY | L | 23 | 2,307  | -10,532 | 5,345   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 114 | CA  | GLY | L | 23 | 1,730  | -11,131 | 4,153   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 115 | C   | GLY | L | 23 | 0,953  | -12,395 | 4,473   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 116 | O   | GLY | L | 23 | -0,212 | -12,517 | 4,150   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 117 | N   | ALA | L | 24 | 1,683  | -13,360 | 5,127   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 118 | CA  | ALA | L | 24 | 1,102  | -14,632 | 5,548   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 119 | C   | ALA | L | 24 | -0,076 | -14,444 | 6,468   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 120 | O   | ALA | L | 24 | -1,054 | -15,158 | 6,348   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 121 | CB  | ALA | L | 24 | 2,105  | -15,541 | 6'. 198 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 122 | N   | GLY | L | 25 | 0,067  | -13,469 | 7,438   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 123 | CA  | GLY | L | 25 | -0,962 | -13,170 | 8,392   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 124 | C   | GLY | L | 25 | -2,268 | -12,811 | 7,747   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 125 | O   | GLY | L | 25 | -3,300 | -13,370 | 8,064   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 126 | N   | ILE | L | 26 | -2,180 | -11,796 | 6,833   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 127 | CA  | ILE | L | 26 | -3,331 | -11,306 | 6,108   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 128 | C   | ILE | L | 26 | -3,969 | -12,476 | 5,367   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 129 | O   | ILE | L | 26 | -5,165 | -12,691 | 5,457   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 130 | CB  | ILE | L | 26 | -2,991 | -10,132 | 5,190   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 131 | CG1 | ILE | L | 26 | -2,576 | -8,894  | 5,997   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 132 | CG2 | ILE | L | 26 | -4,165 | -9,810  | 4,293   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 133 | CD1 | ILE | L | 26 | -1,882 | -7,842  | 5,205   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 134 | N   | GLY | L | 27 | -3,109 | -13,215 | 4,602   | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 3 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 135 | CA  | GLY | L | 27 | -3,538  | -14,338 | 3,799  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 136 | C   | GLY | L | 27 | -4,376  | -15,318 | 4,569  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 137 | O   | GLY | L | 27 | -5,486  | -15,649 | 4,182  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 138 | N   | ASP | L | 28 | -3,765  | -15,784 | 5,701  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 139 | CA  | ASP | L | 28 | -4,384  | -16,736 | 6,597  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 140 | C   | ASP | L | 28 | -5,751  | -16,267 | 7,012  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 141 | O   | ASP | L | 28 | -6,700  | -17,036 | 6,990  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 142 | CB  | ASP | L | 28 | -3,509  | -17,005 | 7,806  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 143 | CG  | ASP | L | 28 | -4,194  | -17,916 | 8,775  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 144 | OD1 | ASP | L | 28 | -4,748  | -17,548 | 9,761  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 145 | OD2 | ASP | L | 28 | -4,162  | -19,199 | 8,388  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 146 | N   | GLY | L | 29 | -5,813  | -14,962 | 7,433  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 147 | CA  | GLY | L | 29 | -7,031  | -14,368 | 7,892  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 148 | C   | GLY | L | 29 | -8,136  | -14,525 | 6,883  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 149 | O   | GLY | L | 29 | -9,135  | -15,175 | 7,140  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 150 | N   | ALA | L | 31 | -8,315  | -16,031 | 3,866  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 151 | CA  | ALA | L | 31 | -8,577  | -17,400 | 3,418  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 152 | C   | ALA | L | 31 | -9,439  | -18,145 | 4,436  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 153 | O   | ALA | L | 31 | -10,328 | -18,897 | 4,067  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 154 | CB  | ALA | L | 31 | -7,301  | -18,191 | 3,147  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 155 | N   | PHE | L | 53 | -8,637  | -24,705 | 11,956 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 156 | CA  | PHE | L | 53 | -8,164  | -23,333 | 11,852 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 157 | C   | PHE | L | 53 | -6,980  | -23,146 | 12,776 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 158 | O   | PHE | L | 53 | -5,941  | -22,715 | 12,352 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 159 | CB  | PHE | L | 53 | -9,246  | -22,283 | 12,113 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 160 | CG  | PHE | L | 53 | -8,740  | -20,882 | 11,934 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 161 | CD1 | PHE | L | 53 | -8,446  | -20,390 | 10,644 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 162 | CD2 | PHE | L | 53 | -8,535  | -20,038 | 13,053 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 163 | CE1 | PHE | L | 53 | -7,950  | -19,094 | 10,483 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 164 | CE2 | PHE | L | 53 | -8,049  | -18,738 | 12,885 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 165 | CZ  | PHE | L | 53 | -7,751  | -18,269 | 11,601 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 166 | N   | THR | L | 56 | -3,737  | -24,941 | 11,832 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 167 | CA  | THR | L | 56 | -3,150  | -24,514 | 10,589 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 168 | C   | THR | L | 56 | -2,483  | -23,143 | 10,682 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 169 | O   | THR | L | 56 | -1,599  | -22,885 | 9,907  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 170 | CB  | THR | L | 56 | -4,089  | -24,659 | 9,379  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 171 | OG1 | THR | L | 56 | -3,330  | -24,836 | 8,196  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 172 | CG2 | THR | L | 56 | -5,044  | -23,506 | 9,164  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 173 | N   | VAL | L | 57 | -2,942  | -22,245 | 11,635 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 174 | CA  | VAL | L | 57 | -2,286  | -20,945 | 11,854 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 175 | C   | VAL | L | 57 | -0,799  | -21,212 | 12,078 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 176 | O   | VAL | L | 57 | 0,047   | -20,684 | 11,375 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 177 | CB  | VAL | L | 57 | -2,896  | -20,104 | 13,004 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 178 | CG1 | VAL | L | 57 | -2,085  | -18,841 | 13,259 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 179 | CG2 | VAL | L | 57 | -4,335  | -19,696 | 12,714 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 3 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 180 | N   | GLY | L | 58 | -0,521 | -22,078 | 13,113 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 181 | CA  | GLY | L | 58 | 0,822  | -22,415 | 13,487 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 182 | C   | GLY | L | 58 | 1,623  | -22,917 | 12,328 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 183 | O   | GLY | L | 58 | 2,718  | -22,438 | 12,075 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 184 | N   | LEU | L | 59 | 1,030  | -23,955 | 11,641 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 185 | CA  | LEU | L | 59 | 1,708  | -24,654 | 10,580 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 186 | C   | LEU | L | 59 | 2,185  | -23,705 | 9,498  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 187 | O   | LEU | L | 59 | 3,300  | -23,786 | 9,049  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 188 | CB  | LEU | L | 59 | 0,855  | -25,774 | 9,958  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 189 | CG  | LEU | L | 59 | 0,528  | -26,940 | 10,883 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 190 | CD1 | LEU | L | 59 | -0,499 | -27,867 | 10,248 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 191 | CD2 | LEU | L | 59 | 1,757  | -27,717 | 11,236 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 192 | N   | VAL | L | 60 | 1,263  | -22,821 | 9,044  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 193 | CA  | VAL | L | 60 | 1,554  | -21,906 | 7,967  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 194 | C   | VAL | L | 60 | 2,691  | -20,965 | 8,356  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 195 | O   | VAL | L | 60 | 3,626  | -20,759 | 7,642  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 196 | CB  | VAL | L | 60 | 0,309  | -21,177 | 7,501  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 197 | CG1 | VAL | L | 60 | 0,647  | -20,048 | 6,567  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 198 | CG2 | VAL | L | 60 | -0,657 | -22,127 | 6,817  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 199 | N   | GLU | L | 61 | 2,551  | -20,346 | 9,512  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 200 | CA  | GLU | L | 61 | 3,536  | -19,393 | 9,934  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 201 | C   | GLU | L | 61 | 4,879  | -19,960 | 10,193 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 202 | O   | GLU | L | 61 | 5,880  | -19,269 | 10,118 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 203 | CB  | GLU | L | 61 | 3,063  | -18,660 | 11,104 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 204 | CG  | GLU | L | 61 | 1,925  | -17,819 | 10,799 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 205 | CD  | GLU | L | 61 | 1,586  | -17,006 | 11,921 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 206 | OE1 | GLU | L | 61 | 0,975  | -17,516 | 12,864 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 207 | OE2 | GLU | L | 61 | 1,964  | -15,931 | 11,778 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 208 | N   | ALA | L | 62 | 4,882  | -21,261 | 10,545 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 209 | CA  | ALA | L | 62 | 6,084  | -21,956 | 10,944 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 210 | C   | ALA | L | 62 | 7,286  | -21,785 | 10,048 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 211 | O   | ALA | L | 62 | 8,377  | -21,630 | 10,538 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 212 | CB  | ALA | L | 62 | 5,859  | -23,400 | 11,174 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 213 | N   | ALA | L | 63 | 7,092  | -21,848 | 8,706  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 214 | CA  | ALA | L | 63 | 8,178  | -21,680 | 7,793  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 215 | C   | ALA | L | 63 | 8,991  | -20,466 | 8,068  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 216 | O   | ALA | L | 63 | 10,208 | -20,527 | 8,043  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 217 | CB  | ALA | L | 63 | 7,615  | -21,644 | 6,413  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 218 | N   | TYR | L | 64 | 8,259  | -19,325 | 8,307  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 219 | CA  | TYR | L | 64 | 8,890  | -18,068 | 8,550  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 220 | C   | TYR | L | 64 | 9,659  | -18,103 | 9,830  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 221 | O   | TYR | L | 64 | 10,715 | -17,566 | 9,914  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 222 | CB  | TYR | L | 64 | 7,922  | -16,871 | 8,520  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 223 | CG  | TYR | L | 64 | 7,295  | -16,694 | 7,184  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 224 | CD1 | TYR | L | 64 | 8,019  | -16,167 | 6,135  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 3 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 225 | CD2 | TYR | L | 64  | 5,990  | -17,079 | 6,950  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 226 | CE1 | TYR | L | 64  | 7,462  | -16,049 | 4,875  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 227 | CE2 | TYR | L | 64  | 5,429  | -16,966 | 5,693  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 228 | CZ  | TYR | L | 64  | 6,164  | -16,453 | 4,661  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 229 | OH  | TYR | L | 64  | 5,574  | -16,357 | 3,438  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 230 | N   | PHE | L | 65  | 9,081  | -18,740 | 10,861 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 231 | CA  | PHE | L | 65  | 9,781  | -18,948 | 12,083 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 232 | C   | PHE | L | 65  | 11,125 | -19,657 | 11,874 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 233 | O   | PHE | L | 65  | 12,121 | -19,278 | 12,457 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 234 | CB  | PHE | L | 65  | 8,919  | -19,603 | 13,097 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 235 | CG  | PHE | L | 65  | 9,632  | -20,022 | 14,089 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 236 | CD1 | PHE | L | 65  | 10,118 | -19,245 | 14,878 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 237 | CE1 | PHE | L | 65  | 10,820 | -19,640 | 15,762 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 238 | CZ  | PHE | L | 65  | 11,035 | -20,813 | 15,882 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 239 | CE2 | PHE | L | 65  | 10,543 | -21,593 | 15,120 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 240 | CD2 | PHE | L | 65  | 9,847  | -21,203 | 14,227 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 241 | N   | SER | M | 206 | -1,016 | -25,619 | 19,505 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 242 | CA  | SER | M | 206 | -0,838 | -24,486 | 18,597 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 243 | C   | SER | M | 206 | -0,012 | -23,382 | 19,267 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 244 | O   | SER | M | 206 | 0,971  | -22,911 | 18,713 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 245 | CB  | SER | M | 206 | -2,188 | -23,963 | 18,088 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 246 | OG  | SER | M | 206 | -1,997 | -22,980 | 17,074 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 247 | N   | LEU | M | 207 | -0,489 | -22,952 | 20,499 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 248 | CA  | LEU | M | 207 | 0,102  | -21,823 | 21,215 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 249 | C   | LEU | M | 207 | 1,546  | -22,138 | 21,608 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 250 | O   | LEU | M | 207 | 2,423  | -21,302 | 21,441 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 251 | CB  | LEU | M | 207 | -0,714 | -21,400 | 22,455 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 252 | CG  | LEU | M | 207 | -1,865 | -20,400 | 22,201 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 253 | CD1 | LEU | M | 207 | -1,340 | -19,000 | 21,895 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 254 | CD2 | LEU | M | 207 | -2,853 | -20,839 | 21,125 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 255 | N   | LEU | M | 209 | 3,807  | -24,006 | 20,342 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 256 | CA  | LEU | M | 209 | 4,747  | -24,049 | 19,229 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 257 | C   | LEU | M | 209 | 5,571  | -22,762 | 19,135 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 258 | O   | LEU | M | 209 | 6,785  | -22,821 | 18,999 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 259 | CB  | LEU | M | 209 | 4,036  | -24,368 | 17,902 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 260 | CG  | LEU | M | 209 | 4,958  | -24,569 | 16,686 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 261 | CD1 | LEU | M | 209 | 5,927  | -25,732 | 16,873 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 262 | CD2 | LEU | M | 209 | 4,109  | -24,811 | 15,444 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 263 | N   | ARG | M | 210 | 4,854  | -21,566 | 19,167 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 264 | CA  | ARG | M | 210 | 5,530  | -20,289 | 18,933 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 265 | C   | ARG | M | 210 | 6,635  | -20,028 | 19,961 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 266 | O   | ARG | M | 210 | 7,735  | -19,631 | 19,601 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 267 | CB  | ARG | M | 210 | 4,594  | -19,094 | 18,716 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 268 | CG  | ARG | M | 210 | 4,089  | -18,365 | 19,945 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 269 | CD  | ARG | M | 210 | 2,763  | -18,019 | 20,020 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 3 (continuación)**

|       |     |     |     |   |     |       |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|-------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 270 | NE  | ARG | M | 210 | 2,404 | -17,153 | 21,107 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 271 | CZ  | ARG | M | 210 | 2,203 | -17,389 | 22,361 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 272 | NH1 | ARG | M | 210 | 2,199 | -18,501 | 22,785 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 273 | NH2 | ARG | M | 210 | 1,994 | -16,479 | 23,278 | 1,00 | 0,00 | N |

**Tabla 4**

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 1  | N   | ALA | A | 21 | 6,345  | -14,031 | -0,384 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 2  | CA  | ALA | A | 21 | 5,507  | -14,175 | 0,805  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 3  | C   | ALA | A | 21 | 4,183  | -13,425 | 0,676  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 4  | O   | ALA | A | 21 | 3,126  | -14,005 | 0,893  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 5  | CB  | ALA | A | 21 | 6,228  | -13,751 | 2,081  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 6  | N   | ILE | A | 22 | 4,282  | -12,074 | 0,350  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 7  | CA  | ILE | A | 22 | 3,090  | -11,221 | 0,235  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 8  | C   | ILE | A | 22 | 2,159  | -11,728 | -0,869 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 9  | O   | ILE | A | 22 | 0,946  | -11,670 | -0,719 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 10 | CB  | ILE | A | 22 | 3,362  | -9,687  | 0,133  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 11 | CG1 | ILE | A | 22 | 4,114  | -9,223  | -1,134 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 12 | CG2 | ILE | A | 22 | 4,108  | -9,189  | 1,374  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 13 | CD1 | ILE | A | 22 | 3,187  | -8,776  | -2,254 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 14 | N   | GLY | A | 23 | 2,782  | -12,213 | -2,016 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 15 | CA  | GLY | A | 23 | 2,049  | -12,734 | -3,156 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 16 | C   | GLY | A | 23 | 1,095  | -13,831 | -2,732 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 17 | O   | GLY | A | 23 | -0,107 | -13,720 | -2,928 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 18 | N   | ALA | A | 24 | 1,708  | -14,925 | -2,131 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 19 | CA  | ALA | A | 24 | 0,944  | -16,088 | -1,682 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 20 | C   | ALA | A | 24 | -0,144 | -15,660 | -0,712 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 21 | O   | ALA | A | 24 | -1,298 | -16,015 | -0,897 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 22 | CB  | ALA | A | 24 | 1,797  | -17,177 | -1,039 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 23 | N   | GLY | A | 25 | 0,280  | -14,904 | 0,373  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 24 | CA  | GLY | A | 25 | -0,589 | -14,587 | 1,491  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 25 | C   | GLY | A | 25 | -1,877 | -13,947 | 1,018  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 26 | O   | GLY | A | 25 | -2,953 | -14,520 | 1,129  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 27 | N   | ILE | A | 26 | -1,699 | -12,685 | 0,473  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 28 | CA  | ILE | A | 26 | -2,827 | -11,831 | 0,104  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 29 | C   | ILE | A | 26 | -3,654 | -12,542 | -0,969 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 30 | O   | ILE | A | 26 | -4,871 | -12,600 | -0,857 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 31 | CB  | ILE | A | 26 | -2,401 | -10,397 | -0,323 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 32 | CG1 | ILE | A | 26 | -1,597 | -9,649  | 0,770  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 33 | CG2 | ILE | A | 26 | -3,603 | -9,553  | -0,763 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 34 | CD1 | ILE | A | 26 | -2,318 | -9,454  | 2,099  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 35 | N   | GLY | A | 27 | -2,942 | -13,062 | -2,046 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 36 | CA  | GLY | A | 27 | -3,584 | -13,678 | -3,199 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 37 | C   | GLY | A | 27 | -4,550 | -14,779 | -2,803 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 38 | O   | GLY | A | 27 | -5,716 | -14,754 | -3,175 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 39 | N   | ASP | A | 28 | -3,985 | -15,780 | -2,024 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 40 | CA  | ASP | A | 28 | -4,732 | -16,946 | -1,539 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 41 | C   | ASP | A | 28 | -5,998 | -16,489 | -0,825 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 42 | O   | ASP | A | 28 | -7,077 | -17,007 | -1,083 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 43 | CB  | ASP | A | 28 | -3,917 | -17,846 | -0,588 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 44 | CG  | ASP | A | 28 | -2,860 | -18,655 | -1,307 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 45 | OD1 | ASP | A | 28 | -2,422 | -18,431 | -2,426 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 4 (continuación)

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 46 | OD2 | ASP | A | 28 | -2,415 | -19,668 | -0,523 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 47 | N   | GLY | A | 29 | -5,802 | -15,500 | 0,131  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 48 | CA  | GLY | A | 29 | -6,869 | -14,977 | 0,960  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 49 | C   | GLY | A | 29 | -8,039 | -14,505 | 0,122  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 50 | O   | GLY | A | 29 | -9,123 | -15,072 | 0,181  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 51 | N   | LEU | A | 59 | 0,538  | -20,546 | -3,576 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 52 | CA  | LEU | A | 59 | 1,616  | -21,013 | -2,702 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 53 | C   | LEU | A | 59 | 2,837  | -21,443 | -3,522 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 54 | O   | LEU | A | 59 | 3,955  | -21,055 | -3,213 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 55 | CB  | LEU | A | 59 | 1,142  | -22,138 | -1,760 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 56 | CG  | LEU | A | 59 | 2,189  | -22,609 | -0,730 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 57 | CD1 | LEU | A | 59 | 2,569  | -21,503 | 0,256  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 58 | CD2 | LEU | A | 59 | 1,650  | -23,816 | 0,035  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 59 | N   | ILE | K | 16 | 10,658 | -2,962  | 11,070 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 60 | CA  | ILE | K | 16 | 9,857  | -4,034  | 11,671 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 61 | C   | ILE | K | 16 | 8,610  | -3,416  | 12,307 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 62 | O   | ILE | K | 16 | 7,498  | -3,841  | 12,023 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 63 | CB  | ILE | K | 16 | 10,670 | -4,907  | 12,676 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 64 | CG1 | ILE | K | 16 | 11,731 | -5,750  | 11,933 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 65 | CG2 | ILE | K | 16 | 9,763  | -5,838  | 13,492 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 66 | CD1 | ILE | K | 16 | 12,834 | -6,259  | 12,850 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 67 | N   | GLY | K | 19 | 6,052  | -1,275  | 9,802  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 68 | CA  | GLY | K | 19 | 5,350  | -2,226  | 8,953  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 69 | C   | GLY | K | 19 | 4,316  | -2,998  | 9,750  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 70 | O   | GLY | K | 19 | 3,177  | -3,154  | 9,331  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 71 | N   | GLY | K | 20 | 4,790  | -3,509  | 10,947 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 72 | CA  | GLY | K | 20 | 3,964  | -4,243  | 11,882 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 73 | C   | GLY | K | 20 | 2,664  | -3,538  | 12,201 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 74 | O   | GLY | K | 20 | 1,605  | -4,149  | 12,169 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 75 | N   | ALA | K | 21 | 2,805  | -2,207  | 12,561 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 76 | CA  | ALA | K | 21 | 1,688  | -1,384  | 13,006 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 77 | C   | ALA | K | 21 | 0,546  | -1,397  | 12,001 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 78 | O   | ALA | K | 21 | -0,586 | -1,697  | 12,356 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 79 | CB  | ALA | K | 21 | 2,108  | 0,053   | 13,297 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 80 | N   | ILE | K | 22 | 0,886  | -1,005  | 10,709 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 81 | CA  | ILE | K | 22 | -0,140 | -0,867  | 9,671  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 82 | C   | ILE | K | 22 | -0,799 | -2,219  | 9,390  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 83 | O   | ILE | K | 22 | -2,005 | -2,285  | 9,195  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 84 | CB  | ILE | K | 22 | 0,297  | -0,092  | 8,393  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 85 | CG1 | ILE | K | 22 | 1,377  | -0,768  | 7,521  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 86 | CG2 | ILE | K | 22 | 0,768  | 1,314   | 8,779  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 87 | CD1 | ILE | K | 22 | 0,806  | -1,667  | 6,434  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 88 | N   | GLY | K | 23 | 0,053  | -3,318  | 9,365  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 89 | CA  | GLY | K | 23 | -0,419 | -4,668  | 9,113  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 90  | C   | GLY | K | 23 | -1,487  | -5,090  | 10,101 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 91  | O   | GLY | K | 23 | -2,565  | -5,521  | 9,715  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 92  | N   | ALA | K | 24 | -1,109  | -4,970  | 11,431 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 93  | CA  | ALA | K | 24 | -1,982  | -5,345  | 12,540 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 94  | C   | ALA | K | 24 | -3,312  | -4,596  | 12,475 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 95  | O   | ALA | K | 24 | -4,357  | -5,184  | 12,715 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 96  | CB  | ALA | K | 24 | -1,317  | -5,133  | 13,898 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 97  | N   | GLY | K | 25 | -3,230  | -3,244  | 12,158 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 98  | CA  | GLY | K | 25 | -4,396  | -2,382  | 12,036 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 99  | C   | GLY | K | 25 | -5,442  | -2,961  | 11,101 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 100 | O   | GLY | K | 25 | -6,598  | -3,122  | 11,474 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 101 | N   | ILE | K | 26 | -4,967  | -3,257  | 9,828  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 102 | CA  | ILE | K | 26 | -5,823  | -3,841  | 8,789  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 103 | C   | ILE | K | 26 | -6,427  | -5,132  | 9,343  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 104 | O   | ILE | K | 26 | -7,637  | -5,300  | 9,305  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 105 | CB  | ILE | K | 26 | -5,098  | -4,071  | 7,428  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 106 | CG1 | ILE | K | 26 | -4,568  | -2,767  | 6,788  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 107 | CG2 | ILE | K | 26 | -5,980  | -4,825  | 6,426  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 108 | CD1 | ILE | K | 26 | -5,622  | -1,714  | 6,477  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 109 | N   | GLY | K | 27 | -5,515  | -6,056  | 9,844  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 110 | CA  | GLY | K | 27 | -5,880  | -7,396  | 10,278 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 111 | C   | GLY | K | 27 | -7,077  | -7,409  | 11,210 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 112 | O   | GLY | K | 27 | -8,057  | -8,096  | 10,950 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 113 | N   | ASP | K | 28 | -6,936  | -6,610  | 12,341 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 114 | CA  | ASP | K | 28 | -7,969  | -6,501  | 13,377 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 115 | C   | ASP | K | 28 | -9,319  | -6,221  | 12,728 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 116 | O   | ASP | K | 28 | -10,281 | -6,940  | 12,967 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 117 | CB  | ASP | K | 28 | -7,684  | -5,409  | 14,428 | 1,00 | 0,00 | c |
| ÁTOMO | 118 | CG  | ASP | K | 28 | -6,719  | -5,887  | 15,482 | 1,00 | 0,00 | c |
| ÁTOMO | 119 | OD1 | ASP | K | 28 | -5,501  | -5,869  | 15,384 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 120 | OD2 | ASP | K | 28 | -7,384  | -6,394  | 16,550 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 121 | N   | GLY | K | 29 | -9,348  | -5,102  | 11,901 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 122 | CA  | GLY | K | 29 | -10,569 | -4,615  | 11,289 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 123 | C   | GLY | K | 29 | -11,212 | -5,698  | 10,448 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 124 | O   | GLY | K | 29 | -12,276 | -6,205  | 10,776 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 125 | N   | VAL | K | 30 | -10,501 | -6,027  | 9,303  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 126 | CA  | VAL | K | 30 | -11,107 | -6,819  | 8,230  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 127 | C   | VAL | K | 30 | -11,579 | -8,176  | 8,753  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 128 | O   | VAL | K | 30 | -12,714 | -8,565  | 8,512  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 129 | CB  | VAL | K | 30 | -10,270 | -6,937  | 6,923  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 130 | CG1 | VAL | K | 30 | -10,028 | -5,560  | 6,300  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 131 | CG2 | VAL | K | 30 | -8,940  | -7,684  | 7,063  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 132 | N   | ALA | K | 31 | -10,636 | -8,920  | 9,451  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 133 | CA  | ALA | K | 31 | -10,883 | -10,314 | 9,808  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 134 | C   | ALA | K | 31 | -11,989 | -10,412 | 10,852 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 135 | O   | ALA | K | 31 | -12,931 | -11,178 | 10,696 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 136 | CB  | ALA | K | 31 | -9,624  | -11,033 | 10,283 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 137 | N   | GLY | K | 32 | -11,816 | -9,610  | 11,974 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 138 | CA  | GLY | K | 32 | -12,719 | -9,669  | 13,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 139 | C   | GLY | K | 32 | -14,138 | -9,365  | 12,675 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 140 | O   | GLY | K | 32 | -15,039 | -10,185 | 12,801 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 141 | N   | PHE | K | 53 | -10,783 | -14,377 | 18,969 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 142 | CA  | PHE | K | 53 | -9,482  | -14,955 | 18,629 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 143 | C   | PHE | K | 53 | -8,723  | -14,019 | 17,685 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 144 | O   | PHE | K | 53 | -7,574  | -13,689 | 17,947 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 145 | CB  | PHE | K | 53 | -9,600  | -16,376 | 18,045 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 146 | CG  | PHE | K | 53 | -8,257  | -17,051 | 17,883 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 147 | CD1 | PHE | K | 53 | -7,577  | -17,020 | 16,639 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 148 | CD2 | PHE | K | 53 | -7,660  | -17,740 | 18,968 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 149 | CE1 | PHE | K | 53 | -6,333  | -17,661 | 16,487 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 150 | CE2 | PHE | K | 53 | -6,416  | -18,382 | 18,810 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 151 | CZ  | PHE | K | 53 | -5,753  | -18,344 | 17,571 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 152 | N   | PHE | K | 54 | -9,409  | -13,608 | 16,543 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 153 | CA  | PHE | K | 54 | -8,767  | -12,782 | 15,516 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 154 | C   | PHE | K | 54 | -8,164  | -11,541 | 16,176 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 155 | O   | PHE | K | 54 | -6,978  | -11,270 | 16,042 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 156 | CB  | PHE | K | 54 | -9,706  | -12,321 | 14,380 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 157 | CG  | PHE | K | 54 | -10,176 | -13,399 | 13,433 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 158 | CD1 | PHE | K | 54 | -9,257  | -14,099 | 12,611 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 159 | CD2 | PHE | K | 54 | -11,561 | -13,654 | 13,273 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 160 | CE1 | PHE | K | 54 | -9,716  | -15,014 | 11,644 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 161 | CE2 | PHE | K | 54 | -12,014 | -14,563 | 12,300 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 162 | CZ  | PHE | K | 54 | -11,094 | -15,240 | 11,482 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 163 | N   | ILE | K | 55 | -9,075  | -10,749 | 16,863 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 164 | CA  | ILE | K | 55 | -8,727  | -9,405  | 17,324 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 165 | C   | ILE | K | 55 | -7,693  | -9,410  | 18,450 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 166 | O   | ILE | K | 55 | -6,827  | -8,544  | 18,477 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 167 | CB  | ILE | K | 55 | -9,943  | -8,495  | 17,647 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 168 | CG1 | ILE | K | 55 | -10,898 | -9,081  | 18,707 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 169 | CG2 | ILE | K | 55 | -10,688 | -8,166  | 16,349 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 170 | CD1 | ILE | K | 55 | -12,005 | -8,127  | 19,121 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 171 | N   | THR | K | 56 | -7,833  | -10,391 | 19,426 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 172 | CA  | THR | K | 56 | -6,922  | -10,464 | 20,567 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 173 | C   | THR | K | 56 | -5,505  | -10,773 | 20,080 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 174 | O   | THR | K | 56 | -4,555  | -10,147 | 20,530 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 175 | CB  | THR | K | 56 | -7,422  | -11,383 | 21,713 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 176 | OG1 | THR | K | 56 | -6,750  | -11,036 | 22,925 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 177 | CG2 | THR | K | 56 | -7,216  | -12,880 | 21,504 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 178 | N   | VAL | K | 57 | -5,382  | -11,788 | 19,134 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 179 | CA  | VAL | K | 57 | -4,079  | -12,161 | 18,578 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 180 | C   | VAL | K | 57 | -3,482 | -10,952 | 17,854 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 181 | O   | VAL | K | 57 | -2,287 | -10,725 | 17,957 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 182 | CB  | VAL | K | 57 | -4,122 | -13,438 | 17,699 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 183 | CG1 | VAL | K | 57 | -2,785 | -13,707 | 17,001 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 184 | CG2 | VAL | K | 57 | -4,464 | -14,666 | 18,551 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 185 | N   | GLY | K | 58 | -4,345 | -10,176 | 17,091 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 186 | CA  | GLY | K | 58 | -3,919 | -8,952  | 16,422 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 187 | C   | GLY | K | 58 | -3,232 | -7,958  | 17,352 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 188 | O   | GLY | K | 58 | -2,167 | -7,439  | 17,046 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 189 | N   | LEU | K | 59 | -3,928 | -7,669  | 18,517 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 190 | CA  | LEU | K | 59 | -3,421 | -6,732  | 19,526 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 191 | C   | LEU | K | 59 | -2,069 | -7,205  | 20,069 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 192 | O   | LEU | K | 59 | -1,126 | -6,432  | 20,181 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 193 | CB  | LEU | K | 59 | -4,441 | -6,520  | 20,664 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 194 | CG  | LEU | K | 59 | -4,043 | -5,453  | 21,703 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 195 | CD1 | LEU | K | 59 | -3,930 | -4,059  | 21,088 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 196 | CD2 | LEU | K | 59 | -5,062 | -5,428  | 22,840 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 197 | N   | VAL | K | 60 | -2,028 | -8,531  | 20,469 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 198 | CA  | VAL | K | 60 | -0,841 | -9,149  | 21,063 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 199 | C   | VAL | K | 60 | 0,332  | -9,119  | 20,061 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 200 | O   | VAL | K | 60 | 1,463  | -8,859  | 20,448 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 201 | CB  | VAL | K | 60 | -1,166 | -10,563 | 21,615 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 202 | CG1 | VAL | K | 60 | 0,084  | -11,323 | 22,031 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 203 | CG2 | VAL | K | 60 | -2,098 | -10,481 | 22,829 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 204 | N   | GLU | K | 61 | 0,026  | -9,421  | 18,739 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 205 | CA  | GLU | K | 61 | 0,996  | -9,380  | 17,639 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 206 | C   | GLU | K | 61 | 1,731  | -8,039  | 17,634 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 207 | O   | GLU | K | 61 | 2,948  | -8,006  | 17,511 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 208 | CB  | GLU | K | 61 | 0,337  | -9,677  | 16,274 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 209 | CG  | GLU | K | 61 | 1,291  | -9,513  | 15,092 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 210 | CD  | GLU | K | 61 | 0,631  | -9,807  | 13,767 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 211 | OE1 | GLU | K | 61 | -0,550 | -9,630  | 13,503 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 212 | OE2 | GLU | K | 61 | 1,553  | -10,205 | 12,854 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 213 | N   | ALA | K | 62 | 0,926  | -6,909  | 17,729 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 214 | CA  | ALA | K | 62 | 1,483  | -5,557  | 17,728 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 215 | C   | ALA | K | 62 | 2,586  | -5,411  | 18,775 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 216 | O   | ALA | K | 62 | 3,669  | -4,923  | 18,475 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 217 | CB  | ALA | K | 62 | 0,419  | -4,487  | 17,928 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 218 | N   | ALA | K | 63 | 2,251  | -5,850  | 20,051 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 219 | CA  | ALA | K | 63 | 3,203  | -5,802  | 21,159 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 220 | C   | ALA | K | 63 | 4,484  | -6,563  | 20,818 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 221 | O   | ALA | K | 63 | 5,574  | -6,065  | 21,061 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 222 | CB  | ALA | K | 63 | 2,615  | -6,314  | 22,471 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 223 | N   | TYR | K | 64 | 4,320  | -7,827  | 20,262 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 224 | CA  | TYR | K | 64 | 5,460  | -8,695  | 19,951 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 225 | C   | TYR | K | 64 | 6,472  | -8,042  | 19,015 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 226 | O   | TYR | K | 64 | 7,665  | -8,258  | 19,180 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 227 | CB  | TYR | K | 64 | 5,069  | -10,062 | 19,359 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 228 | CG  | TYR | K | 64 | 4,322  | -11,015 | 20,266 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 229 | CD1 | TYR | K | 64 | 4,486  | -11,028 | 21,679 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 230 | CD2 | TYR | K | 64 | 3,483  | -11,993 | 19,678 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 231 | CE1 | TYR | K | 64 | 3,829  | -11,984 | 22,471 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 232 | CE2 | TYR | K | 64 | 2,857  | -12,979 | 20,459 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 233 | CZ  | TYR | K | 64 | 3,033  | -12,965 | 21,859 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 234 | OH  | TYR | K | 64 | 2,416  | -13,902 | 22,671 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 235 | N   | PHE | K | 65 | 5,971  | -7,269  | 17,972 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 236 | CA  | PHE | K | 65 | 6,881  | -6,566  | 17,058 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 237 | C   | PHE | K | 65 | 7,823  | -5,649  | 17,839 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 238 | O   | PHE | K | 65 | 9,014  | -5,614  | 17,560 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 239 | CB  | PHE | K | 65 | 6,180  | -5,739  | 15,966 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 240 | CG  | PHE | K | 65 | 5,527  | -6,570  | 14,890 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 241 | CD1 | PHE | K | 65 | 4,136  | -6,471  | 14,655 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 242 | CE1 | PHE | K | 65 | 3,536  | -7,174  | 13,596 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 243 | CZ  | PHE | K | 65 | 4,312  | -8,000  | 12,767 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 244 | CE2 | PHE | K | 65 | 5,693  | -8,121  | 12,994 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 245 | CD2 | PHE | K | 65 | 6,298  | -7,409  | 14,046 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 246 | N   | ASN | K | 67 | 8,600  | -5,837  | 21,135 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 247 | CA  | ASN | K | 67 | 9,499  | -6,640  | 21,975 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 248 | C   | ASN | K | 67 | 10,712 | -7,094  | 21,170 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 249 | O   | ASN | K | 67 | 11,841 | -6,910  | 21,603 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 250 | CB  | ASN | K | 67 | 8,840  | -7,875  | 22,619 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 251 | CG  | ASN | K | 67 | 7,877  | -7,498  | 23,726 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 252 | OD1 | ASN | K | 67 | 6,675  | -7,388  | 23,534 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 253 | ND2 | ASN | K | 67 | 8,480  | -7,263  | 24,941 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 254 | N   | LEU | K | 68 | 10,429 | -7,744  | 19,975 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 255 | CA  | LEU | K | 68 | 11,456 | -8,357  | 19,131 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 256 | C   | LEU | K | 68 | 12,495 | -7,303  | 18,752 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 257 | O   | LEU | K | 68 | 13,684 | -7,496  | 18,968 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 258 | CB  | LEU | K | 68 | 10,830 | -9,066  | 17,909 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 259 | CG  | LEU | K | 68 | 11,796 | -9,975  | 17,120 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 260 | CD1 | LEU | K | 68 | 11,014 | -11,105 | 16,449 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 261 | CD2 | LEU | K | 68 | 12,577 | -9,208  | 16,051 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 262 | N   | GLY | L | 14 | 14,989 | -7,715  | 8,662  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 263 | CA  | GLY | L | 14 | 13,793 | -6,924  | 8,905  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 264 | C   | GLY | L | 14 | 12,803 | -7,025  | 7,757  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 265 | O   | GLY | L | 14 | 11,628 | -7,291  | 7,964  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 266 | N   | ILE | L | 16 | 12,496 | -9,152  | 5,091  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 267 | CA  | ILE | L | 16 | 11,861 | -10,451 | 4,837  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 268 | C   | ILE | L | 16 | 10,744 | -10,700 | 5,848  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 269 | O   | ILE | L | 16 | 9,660  | -11,122 | 5,468  | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 270 | CB  | ILE | L | 16 | 12,856 | -11,634 | 4,660  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 271 | CG1 | ILE | L | 16 | 12,208 | -12,880 | 4,017  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 272 | CG2 | ILE | L | 16 | 13,681 | -11,997 | 5,896  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 273 | CD1 | ILE | L | 16 | 11,497 | -13,860 | 4,942  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 274 | N   | MET | L | 17 | 11,051 | -10,447 | 7,180  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 275 | CA  | MET | L | 17 | 10,081 | -10,700 | 8,246  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 276 | C   | MET | L | 17 | 8,818  | -9,866  | 8,100  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 277 | O   | MET | L | 17 | 7,742  | -10,352 | 8,419  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 278 | CB  | MET | L | 17 | 10,651 | -10,523 | 9,664  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 279 | CG  | MET | L | 17 | 11,609 | -11,637 | 10,084 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 280 | SD  | MET | L | 17 | 10,743 | -13,242 | 10,212 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 281 | CE  | MET | L | 17 | 11,465 | -14,067 | 8,772  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 282 | N   | ALA | L | 18 | 8,969  | -8,564  | 7,642  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 283 | CA  | ALA | L | 18 | 7,807  | -7,726  | 7,352  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 284 | C   | ALA | L | 18 | 6,915  | -8,420  | 6,322  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 285 | O   | ALA | L | 18 | 5,715  | -8,548  | 6,522  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 286 | CB  | ALA | L | 18 | 8,183  | -6,319  | 6,895  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 287 | N   | GLY | L | 19 | 7,564  | -8,879  | 5,182  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 288 | CA  | GLY | L | 19 | 6,870  | -9,586  | 4,117  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 289 | C   | GLY | L | 19 | 6,019  | -10,723 | 4,654  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 290 | O   | GLY | L | 19 | 4,826  | -10,794 | 4,389  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 291 | N   | GLY | L | 20 | 6,714  | -11,641 | 5,428  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 292 | CA  | GLY | L | 20 | 6,091  | -12,813 | 6,017  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 293 | C   | GLY | L | 20 | 4,924  | -12,424 | 6,902  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 294 | O   | GLY | L | 20 | 3,775  | -12,706 | 6,596  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 295 | N   | ALA | L | 21 | 5,288  | -11,749 | 8,053  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 296 | CA  | ALA | L | 21 | 4,370  | -11,537 | 9,169  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 297 | C   | ALA | L | 21 | 3,087  | -10,818 | 8,764  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 298 | O   | ALA | L | 21 | 2,008  | -11,206 | 9,192  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 299 | CB  | ALA | L | 21 | 5,030  | -10,783 | 10,317 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 300 | N   | ILE | L | 22 | 3,250  | -9,680  | 7,980  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 301 | CA  | ILE | L | 22 | 2,109  | -8,859  | 7,573  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 302 | C   | ILE | L | 22 | 1,336  | -9,638  | 6,508  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 303 | O   | ILE | L | 22 | 0,144  | -9,865  | 6,661  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 304 | CB  | ILE | L | 22 | 2,489  | -7,415  | 7,124  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 305 | CG1 | ILE | L | 22 | 2,941  | -6,542  | 8,320  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 306 | CG2 | ILE | L | 22 | 1,297  | -6,718  | 6,455  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 307 | CD1 | ILE | L | 22 | 4,411  | -6,675  | 8,676  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 308 | N   | GLY | L | 23 | 2,058  | -10,000 | 5,378  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 309 | CA  | GLY | L | 23 | 1,420  | -10,535 | 4,184  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 310 | C   | GLY | L | 23 | 0,632  | -11,791 | 4,483  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 311 | O   | GLY | L | 23 | -0,575 | -11,846 | 4,285  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 312 | N   | ALA | L | 24 | 1,408  | -12,831 | 4,972  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 313 | CA  | ALA | L | 24 | 0,840  | -14,126 | 5,333  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 314 | C   | ALA | L | 24 | -0,200 | -13,997 | 6,437  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |       |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|-------|------|------|---|
| ÁTOMO | 315 | O   | ALA | L | 24 | -1,182  | -14,722 | 6,421 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 316 | CB  | ALA | L | 24 | 1,894   | -15,147 | 5,746 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 317 | N   | GLY | L | 25 | 0,065   | -13,074 | 7,441 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 318 | CA  | GLY | L | 25 | -0,835  | -12,872 | 8,565 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 319 | C   | GLY | L | 25 | -2,244  | -12,510 | 8,132 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 320 | O   | GLY | L | 25 | -3,203  | -13,173 | 8,505 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 321 |     | ILE | L | 26 | -2,329  | -11,374 | 7,337 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 322 | CA  | ILE | L | 26 | -3,608  | -10,852 | 6,834 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 323 | C   | ILE | L | 26 | -4,264  | -11,948 | 5,991 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 324 | O   | ILE | L | 26 | -5,440  | -12,236 | 6,166 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 325 | CB  | ILE | L | 26 | -3,469  | -9,511  | 6,056 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 326 | CG1 | ILE | L | 26 | -3,005  | -8,379  | 7,001 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 327 | CG2 | ILE | L | 26 | -4,794  | -9,115  | 5,386 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 328 | CD1 | ILE | L | 26 | -2,547  | -7,131  | 6,263 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 329 | N   | GLY | L | 27 | -3,444  | -12,534 | 5,034 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 330 | CA  | GLY | L | 27 | -3,895  | -13,566 | 4,116 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 331 | C   | GLY | L | 27 | -4,612  | -14,699 | 4,822 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 332 | O   | GLY | L | 27 | -5,743  | -15,030 | 4,495 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 333 | N   | ASP | L | 28 | -3,866  | -15,300 | 5,825 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 334 | CA  | ASP | L | 28 | -4,342  | -16,404 | 6,656 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 335 | C   | ASP | L | 28 | -5,678  | -16,044 | 7,295 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 336 | O   | ASP | L | 28 | -6,607  | -16,838 | 7,255 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 337 | CB  | ASP | L | 28 | -3,304  | -16,805 | 7,718 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 338 | CG  | ASP | L | 28 | -3,834  | -17,837 | 8,680 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 339 | OD1 | ASP | L | 28 | -4,192  | -17,594 | 9,822 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 340 | OD2 | ASP | L | 28 | -3,898  | -19,067 | 8,109 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 341 | N   | GLY | L | 29 | -5,735  | -14,805 | 7,918 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 342 | CA  | GLY | L | 29 | -6,922  | -14,317 | 8,598 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 343 | C   | GLY | L | 29 | -8,156  | -14,418 | 7,720 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 344 | O   | GLY | L | 29 | -9,113  | -15,099 | 8,061 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 345 | N   | VAL | L | 30 | -8,091  | -13,675 | 6,548 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 346 | CA  | VAL | L | 30 | -9,233  | -13,575 | 5,632 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 347 | C   | VAL | L | 30 | -9,587  | -14,913 | 4,961 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 348 | O   | VAL | L | 30 | -10,748 | -15,158 | 4,661 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 349 | CB  | VAL | L | 30 | -9,143  | -12,412 | 4,611 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 350 | CG1 | VAL | L | 30 | -9,013  | -11,058 | 5,310 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 351 | CG2 | VAL | L | 30 | -8,035  | -12,576 | 3,573 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 352 | N   | ALA | L | 31 | -8,539  | -15,791 | 4,710 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 353 | CA  | ALA | L | 31 | -8,767  | -17,161 | 4,238 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 354 | C   | ALA | L | 31 | -9,633  | -17,938 | 5,230 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 355 | O   | ALA | L | 31 | -10,516 | -18,686 | 4,834 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 356 | CB  | ALA | L | 31 | -7,472  | -17,928 | 3,981 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 357 | N   | GLY | L | 32 | -9,321  | -17,746 | 6,570 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 358 | CA  | GLY | L | 32 | -10,106 | -18,295 | 7,661 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 359 | C   | GLY | L | 32 | -11,567 | -17,924 | 7,538 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 360 | O   | GLY | L | 32 | -12,428 | -18,788 | 7,620  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 361 | N   | THR | L | 51 | -11,764 | -26,332 | 14,771 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 362 | CA  | THR | L | 51 | -10,467 | -26,987 | 14,935 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 363 | C   | THR | L | 51 | -9,452  | -26,599 | 13,848 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 364 | O   | THR | L | 51 | -8,351  | -26,190 | 14,199 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 365 | CB  | THR | L | 51 | -10,589 | -28,519 | 15,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 366 | OG1 | THR | L | 51 | -11,578 | -28,792 | 16,105 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 367 | CG2 | THR | L | 51 | -9,288  | -29,157 | 15,580 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 368 | N   | PRO | L | 52 | -9,797  | -26,799 | 12,499 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 369 | CA  | PRO | L | 52 | -8,818  | -26,678 | 11,427 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 370 | C   | PRO | L | 52 | -8,028  | -25,377 | 11,428 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 371 | O   | PRO | L | 52 | -6,825  | -25,388 | 11,203 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 372 | CB  | PRO | L | 52 | -9,592  | -26,833 | 10,125 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 373 | CG  | PRO | L | 52 | -10,863 | -27,542 | 10,527 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 374 | CD  | PRO | L | 52 | -11,104 | -27,123 | 11,962 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 375 | N   | PHE | L | 53 | -8,777  | -24,222 | 11,638 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 376 | CA  | PHE | L | 53 | -8,158  | -22,904 | 11,575 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 377 | C   | PHE | L | 53 | -7,070  | -22,835 | 12,640 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 378 | O   | PHE | L | 53 | -5,919  | -22,563 | 12,328 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 379 | CB  | PHE | L | 53 | -9,165  | -21,749 | 11,710 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 380 | CG  | PHE | L | 53 | -8,486  | -20,406 | 11,576 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 381 | CD1 | PHE | L | 53 | -8,068  | -19,938 | 10,308 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 382 | CD2 | PHE | L | 53 | -8,232  | -19,601 | 12,715 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 383 | CE1 | PHE | L | 53 | -7,415  | -18,699 | 10,186 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 384 | CE2 | PHE | L | 53 | -7,598  | -18,352 | 12,585 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 385 | CZ  | PHE | L | 53 | -7,185  | -17,903 | 11,320 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 386 | N   | PHE | L | 54 | -7,493  | -23,069 | 13,942 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 387 | CA  | PHE | L | 54 | -6,624  | -22,780 | 15,082 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 388 | C   | PHE | L | 54 | -5,283  | -23,500 | 14,934 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 389 | O   | PHE | L | 54 | -4,238  | -22,899 | 15,149 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 390 | CB  | PHE | L | 54 | -7,258  | -23,112 | 16,446 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 391 | CG  | PHE | L | 54 | -8,520  | -22,346 | 16,780 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 392 | CD1 | PHE | L | 54 | -8,627  | -20,946 | 16,577 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 393 | CD2 | PHE | L | 54 | -9,626  | -23,027 | 17,347 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 394 | CE1 | PHE | L | 54 | -9,810  | -20,260 | 16,905 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 395 | CE2 | PHE | L | 54 | -10,796 | -22,330 | 17,701 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 396 | CZ  | PHE | L | 54 | -10,892 | -20,948 | 17,473 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 397 | N   | ILE | L | 55 | -5,352  | -24,850 | 14,595 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 398 | CA  | ILE | L | 55 | -4,139  | -25,666 | 14,492 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 399 | C   | ILE | L | 55 | -3,201  | -25,129 | 13,402 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 400 | O   | ILE | L | 55 | -2,003  | -25,002 | 13,627 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 401 | CB  | ILE | L | 55 | -4,402  | -27,198 | 14,419 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 402 | CG1 | ILE | L | 55 | -3,088  | -27,977 | 14,635 |      | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 403 | CG2 | ILE | L | 55 | -5,106  | -27,651 | 13,136 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 404 | CD1 | ILE | L | 55 | -3,303  | -29,446 | 14,966 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 405 | N   | THR | L | 56 | -3,789 | -24,860 | 12,169 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 406 | CA  | THR | L | 56 | -2,977 | -24,541 | 10,996 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 407 | C   | THR | L | 56 | -2,190 | -23,229 | 11,131 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 408 | O   | THR | L | 56 | -1,166 | -23,089 | 10,475 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 409 | CB  | THR | L | 56 | -3,767 | -24,642 | 9,664  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 410 | OG1 | THR | L | 56 | -2,866 | -24,908 | 8,586  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 411 | CG2 | THR | L | 56 | -4,606 | -23,421 | 9,294  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 412 | N   | VAL | L | 57 | -2,720 | -22,244 | 11,970 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 413 | CA  | VAL | L | 57 | -2,067 | -20,936 | 12,149 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 414 | C   | VAL | L | 57 | -0,599 | -21,186 | 12,511 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 415 | O   | VAL | L | 57 | 0,303  | -20,738 | 11,815 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 416 | CB  | VAL | L | 57 | -2,746 | -20,000 | 13,195 | 1,00 | 0,00 | c |
| ÁTOMO | 417 | CG1 | VAL | L | 57 | -1,993 | -18,675 | 13,324 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 418 | CG2 | VAL | L | 57 | -4,196 | -19,681 | 12,839 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 419 | N   | GLY | L | 58 | -0,405 | -21,929 | 13,671 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 420 | CA  | GLY | L | 58 | 0,911  | -22,161 | 14,239 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 421 | C   | GLY | L | 58 | 1,842  | -22,808 | 13,236 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 422 | O   | GLY | L | 58 | 2,952  | -22,341 | 13,023 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 423 | N   | LEU | L | 59 | 1,332  | -23,958 | 12,645 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 424 | CA  | LEU | L | 59 | 2,136  | -24,819 | 11,776 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 425 | C   | LEU | L | 59 | 2,757  | -24,020 | 10,627 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 426 | O   | LEU | L | 59 | 3,950  | -24,127 | 10,374 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 427 | CB  | LEU | L | 59 | 1,344  | -26,017 | 11,210 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 428 | CG  | LEU | L | 59 | 0,863  | -27,034 | 12,268 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 429 | CD1 | LEU | L | 59 | -0,081 | -28,045 | 11,621 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 430 | CD2 | LEU | L | 59 | 2,027  | -27,772 | 12,932 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 431 | N   | VAL | L | 60 | 1,872  | -23,244 | 9,886  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 432 | CA  | VAL | L | 60 | 2,291  | -22,521 | 8,680  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 433 | C   | VAL | L | 60 | 3,333  | -21,474 | 9,071  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 434 | O   | VAL | L | 60 | 4,419  | -21,440 | 8,507  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 435 | CB  | VAL | L | 60 | 1,098  | -21,909 | 7,895  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 436 | CG1 | VAL | L | 60 | 1,551  | -20,964 | 6,776  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 437 | CG2 | VAL | L | 60 | 0,246  | -23,017 | 7,273  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 438 | N   | GLU | L | 61 | 2,931  | -20,563 | 10,039 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 439 | CA  | GLU | L | 61 | 3,735  | -19,381 | 10,357 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 440 | C   | GLU | L | 61 | 5,107  | -19,722 | 10,949 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 441 | O   | GLU | L | 61 | 6,043  | -18,942 | 10,816 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 442 | CB  | GLU | L | 61 | 2,988  | -18,378 | 11,246 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 443 | CG  | GLU | L | 61 | 1,789  | -17,773 | 10,507 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 444 | CD  | GLU | L | 61 | 1,165  | -16,637 | 11,308 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 445 | OE1 | GLU | L | 61 | 0,658  | -16,959 | 12,417 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 446 | OE2 | GLU | L | 61 | 1,212  | -15,497 | 10,769 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 447 | N   | ALA | L | 62 | 5,207  | -20,935 | 11,625 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 448 | CA  | ALA | L | 62 | 6,476  | -21,443 | 12,148 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 449 | C   | ALA | L | 62 | 7,593  | -21,430 | 11,110 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 450 | O   | ALA | L | 62 | 8,733  | -21,152 | 11,454 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 451 | CB  | ALA | L | 62 | 6,351  | -22,844 | 12,734 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 452 | N   | ALA | L | 63 | 7,235  | -21,777 | 9,810  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 453 | CA  | ALA | L | 63 | 8,205  | -21,820 | 8,714  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 454 | C   | ALA | L | 63 | 9,043  | -20,543 | 8,636  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 455 | O   | ALA | L | 63 | 10,257 | -20,607 | 8,499  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 456 | CB  | ALA | L | 63 | 7,547  | -22,083 | 7,362  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 457 | N   | TYR | L | 64 | 8,333  | -19,349 | 8,701  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 458 | CA  | TYR | L | 64 | 9,006  | -18,049 | 8,621  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 459 | C   | TYR | L | 64 | 10,000 | -17,881 | 9,768  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 460 | O   | TYR | L | 64 | 11,097 | -17,379 | 9,562  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 461 | CB  | TYR | L | 64 | 8,042  | -16,849 | 8,590  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 462 | CG  | TYR | L | 64 | 7,194  | -16,820 | 7,341  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 463 | CD1 | TYR | L | 64 | 7,770  | -16,499 | 6,085  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 464 | CD2 | TYR | L | 64 | 5,811  | -17,118 | 7,404  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 465 | CE1 | TYR | L | 64 | 6,990  | -16,502 | 4,914  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 466 | CE2 | TYR | L | 64 | 5,024  | -17,125 | 6,238  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 467 | CZ  | TYR | L | 64 | 5,615  | -16,821 | 4,997  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 468 | OH  | TYR | L | 64 | 4,807  | -16,847 | 3,870  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 469 | N   | PHE | L | 65 | 9,571  | -18,285 | 11,026 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 470 | CA  | PHE | L | 65 | 10,456 | -18,198 | 12,188 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 471 | C   | PHE | L | 65 | 11,751 | -19,001 | 11,982 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 472 | O   | PHE | L | 65 | 12,807 | -18,572 | 12,428 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 473 | CB  | PHE | L | 65 | 9,751  | -18,584 | 13,503 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 474 | CG  | PHE | L | 65 | 10,605 | -18,264 | 14,707 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 475 | CD1 | PHE | L | 65 | 10,790 | -16,921 | 15,123 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 476 | CE1 | PHE | L | 65 | 11,649 | -16,616 | 16,194 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 477 | CZ  | PHE | L | 65 | 12,328 | -17,647 | 16,867 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 478 | CE2 | PHE | L | 65 | 12,135 | -18,985 | 16,481 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 479 | CD2 | PHE | L | 65 | 11,277 | -19,295 | 15,410 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 480 |     | ILE | L | 66 | 11,648 | -20,219 | 11,314 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 481 | CA  | ILE | L | 66 | 12,834 | -21,039 | 11,020 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 482 | C   | ILE | L | 66 | 13,831 | -20,203 | 10,207 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 483 | O   | ILE | L | 66 |        | -20,185 | 10,527 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 484 | CB  | ILE | L | 66 | 12,536 | -22,402 | 10,326 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 485 | CG1 | ILE | L | 66 | 11,537 | -23,293 | 11,099 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 486 | CG2 | ILE | L | 66 | 13,824 | -23,190 | 10,054 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 487 | CD1 | ILE | L | 66 | 11,915 | -23,605 | 12,541 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 488 | N   | ASN | L | 67 | 13,319 | -19,523 | 9,103  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 489 | CA  | ASN | L | 67 | 14,170 | -18,671 | 8,257  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 490 | C   | ASN | L | 67 | 14,893 | -17,621 | 9,100  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 491 | O   | ASN | L | 67 | 16,086 | -17,414 | 8,918  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 492 | CB  | ASN | L | 67 | 13,433 | -17,956 | 7,109  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 493 | CG  | ASN | L | 67 | 12,966 | -18,928 | 6,045  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 494 | OD1 | ASN | L | 67 | 11,854 | -19,433 | 6,070  | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 495 | ND2 | ASN | L | 67  | 13,914  | -19,210 | 5,086  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 496 | N   | LEU | L | 68  | 14,100  | -16,932 | 10,018 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 497 | CA  | LEU | L | 68  | 14,623  | -15,890 | 10,911 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 498 | C   | LEU | L | 68  | 15,848  | -16,461 | 11,624 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 499 | O   | LEU | L | 68  | 16,945  | -15,935 | 11,495 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 500 | CB  | LEU | L | 68  | 13,567  | -15,371 | 11,923 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 501 | CG  | LEU | L | 68  | 13,797  | -13,942 | 12,458 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 502 | CD1 | LEU | L | 68  | 12,687  | -13,579 | 13,446 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 503 | CD2 | LEU | L | 68  | 15,146  | -13,745 | 13,146 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 504 | N   | ALA | L | 69  | 15,599  | -17,586 | 12,403 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 505 | CA  | ALA | L | 69  | 16,590  | -18,175 | 13,295 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 506 | C   | ALA | L | 69  | 17,875  | -18,501 | 12,545 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 507 | O   | ALA | L | 69  | 18,956  | -18,146 | 12,993 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 508 | CB  | ALA | L | 69  | 16,062  | -19,423 | 13,999 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 509 | N   | SER | M | 199 | -10,235 | -24,828 | 20,448 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 510 | CA  | SER | M | 199 | -10,460 | -26,277 | 20,457 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 511 | C   | SER | M | 199 | -9,383  | -26,909 | 21,342 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 512 | O   | SER | M | 199 | -8,255  | -26,439 | 21,436 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 513 | CB  | SER | M | 199 | -10,426 | -26,831 | 19,028 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 514 | OG  | SER | M | 199 | -10,782 | -28,211 | 19,040 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 515 | N   | ALA | M | 202 | -6,359  | -28,395 | 19,399 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 516 | CA  | ALA | M | 202 | -5,624  | -27,448 | 18,568 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 517 | C   | ALA | M | 202 | -4,672  | -26,589 | 19,389 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 518 | O   | ALA | M | 202 | -3,496  | -26,490 | 19,067 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 519 | CB  | ALA | M | 202 | -6,548  | -26,552 | 17,752 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 520 | N   | LYS | M | 203 | -5,259  | -25,887 | 20,436 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 521 | CA  | LYS | M | 203 | -4,565  | -24,776 | 21,085 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 522 | C   | LYS | M | 203 | -3,211  | -25,173 | 21,673 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 523 | O   | LYS | M | 203 | -2,244  | -24,472 | 21,408 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 524 | CB  | LYS | M | 203 | -5,421  | -24,006 | 22,104 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 525 | CG  | LYS | M | 203 | -6,351  | -23,021 | 21,397 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 526 | CD  | LYS | M | 203 | -7,207  | -22,239 | 22,391 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 527 | CE  | LYS | M | 203 | -7,942  | -21,073 | 21,731 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 528 | NZ  | LYS | M | 203 | -8,880  | -21,518 | 20,704 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 529 | N   | PRO | M | 204 | -3,121  | -26,287 | 22,520 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 530 | CA  | PRO | M | 204 | -1,857  | -26,688 | 23,113 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 531 | C   | PRO | M | 204 | -0,698  | -26,719 | 22,124 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 532 | O   | PRO | M | 204 | 0,311   | -26,064 | 22,348 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 533 | CB  | PRO | M | 204 | -2,120  | -28,029 | 23,781 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 534 | CG  | PRO | M | 204 | -3,599  | -27,984 | 24,098 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 535 | CD  | PRO | M | 204 | -4,203  | -27,116 | 23,010 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 536 | N   | ILE | M | 205 | -0,871  | -27,523 | 21,001 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 537 | CA  | ILE | M | 205 | 0,201   | -27,693 | 20,012 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 538 | C   | ILE | M | 205 | 0,518   | -26,340 | 19,365 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 539 | O   | ILE | M | 205 | 1,669   | -25,924 | 19,342 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 540 | CB  | ILE | M | 205 | -0,021 | -28,884 | 19,030 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 541 | CG1 | ILE | M | 205 | 1,238  | -29,236 | 18,204 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 542 | CG2 | ILE | M | 205 | -1,273 | -28,799 | 18,151 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 543 | CD1 | ILE | M | 205 | 1,490  | -28,405 | 16,949 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 544 | N   | SER | M | 206 | -0,566 | -25,670 | 18,816 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 545 | CA  | SER | M | 206 | -0,425 | -24,504 | 17,945 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 546 | C   | SER | M | 206 | 0,370  | -23,401 | 18,645 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 547 | O   | SER | M | 206 | 1,352  | -22,898 | 18,114 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 548 | CB  | SER | M | 206 | -1,797 | -24,005 | 17,472 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 549 | OG  | SER | M | 206 | -1,651 | -23,006 | 16,468 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 550 | N   | LEU | M | 207 | -0,143 | -23,008 | 19,874 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 551 | CA  | LEU | M | 207 | 0,392  | -21,871 | 20,615 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 552 | C   | LEU | M | 207 | 1,815  | -22,188 | 21,070 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 553 | O   | LEU | M | 207 | 2,709  | -21,379 | 20,864 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 554 | CB  | LEU | M | 207 | -0,487 | -21,463 | 21,816 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 555 | CG  | LEU | M | 207 | -1,681 | -20,526 | 21,513 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 556 | CD1 | LEU | M | 207 | -1,223 | -19,102 | 21,205 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 557 | CD2 | LEU | M | 207 | -2,610 | -21,034 | 20,412 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 558 | N   | SER | M | 208 | 1,997  | -23,392 | 21,748 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 559 | CA  | SER | M | 208 | 3,280  | -23,736 | 22,372 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 560 | C   | SER | M | 208 | 4,455  | -23,617 | 21,403 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 561 | O   | SER | M | 208 | 5,522  | -23,154 | 21,783 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 562 | CB  | SER | M | 208 | 3,290  | -25,118 | 23,033 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 563 | OG  | SER | M | 208 | 3,107  | -26,159 | 22,078 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 564 | N   | LEU | M | 209 | 4,216  | -24,105 | 20,122 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 565 | CA  | LEU | M | 209 | 5,240  | -24,173 | 19,081 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 566 | C   | LEU | M | 209 | 6,054  | -22,878 | 19,001 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 567 | O   | LEU | M | 209 | 7,275  | -22,927 | 18,919 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 568 | CB  | LEU | M | 209 | 4,615  | -24,547 | 17,722 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 569 | CG  | LEU | M | 209 | 5,609  | -24,789 | 16,570 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 570 | CD1 | LEU | M | 209 | 6,590  | -25,923 | 16,871 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 571 | CD2 | LEU | M | 209 | 4,831  | -25,116 | 15,295 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 572 | N   | ARG | M | 210 | 5,314  | -21,695 | 19,000 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 573 | CA  | ARG | M | 210 | 5,938  | -20,386 | 18,796 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 574 | C   | ARG | M | 210 | 7,094  | -20,160 | 19,780 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 575 | O   | ARG | M | 210 | 8,194  | -19,788 | 19,390 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 576 | CB  | ARG | M | 210 | 4,919  | -19,217 | 18,766 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 577 | CG  | ARG | M | 210 | 4,539  | -18,617 | 20,123 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 578 | CD  | ARG | M | 210 | 3,368  | -17,645 | 20,037 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 579 | NE  | ARG | M | 210 | 3,204  | -16,963 | 21,336 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 580 | CZ  | ARG | M | 210 | 2,675  | -17,521 | 22,478 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 581 | NH1 | ARG | M | 210 | 2,108  | -18,771 | 22,534 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 582 | NH2 | ARG | M | 210 | 2,702  | -16,823 | 23,658 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 583 | N   | LEU | M | 211 | 6,766  | -20,348 | 21,118 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 584 | CA  | LEU | M | 211 | 7,668  | -19,970 | 22,201 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 4 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 585 | C   | LEU | M | 211 | 8,744  | -21,017 | 22,457 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 586 | O   | LEU | M | 211 | 9,830  | -20,675 | 22,903 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 587 | CB  | LEU | M | 211 | 6,921  | -19,556 | 23,477 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 588 | CG  | LEU | M | 211 | 6,253  | -20,691 | 24,283 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 589 | CD1 | LEU | M | 211 | 7,071  | -21,031 | 25,529 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 590 | CD2 | LEU | M | 211 | 4,828  | -20,304 | 24,668 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 591 | N   | PHE | M | 212 | 8,395  | -22,335 | 22,194 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 592 | CA  | PHE | M | 212 | 9,343  | -23,437 | 22,323 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 593 | C   | PHE | M | 212 | 10,537 | -23,177 | 21,400 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 594 | O   | PHE | M | 212 | 11,684 | -23,308 | 21,810 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 595 | CB  | PHE | M | 212 | 8,657  | -24,790 | 22,053 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 596 | CG  | PHE | M | 212 | 9,531  | -26,001 | 22,266 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 597 | CD1 | PHE | M | 212 | 9,585  | -27,015 | 21,279 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 598 | CD2 | PHE | M | 212 | 10,273 | -26,176 | 23,463 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 599 | CE1 | PHE | M | 212 | 10,360 | -28,171 | 21,483 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 600 | CE2 | PHE | M | 212 | 11,054 | -27,328 | 23,659 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 601 | CZ  | PHE | M | 212 | 11,095 | -28,324 | 22,671 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 602 | N   | GLY | M | 213 | 10,213 | -22,782 | 20,106 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 603 | CA  | GLY | M | 213 | 11,222 | -22,358 | 19,149 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 604 | C   | GLY | M | 213 | 12,077 | -21,244 | 19,726 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 605 | O   | GLY | M | 213 | 13,296 | -21,353 | 19,773 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 606 | N   | ASN | M | 214 | 11,360 | -20,130 | 20,149 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 607 | CA  | ASN | M | 214 | 12,007 | -18,898 | 20,604 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 608 | C   | ASN | M | 214 | 13,063 | -19,144 | 21,674 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 609 | O   | ASN | M | 214 | 14,176 | -18,654 | 21,546 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 610 | CB  | ASN | M | 214 | 11,001 | -17,841 | 21,083 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 611 | CG  | ASN | M | 214 | 11,704 | -16,606 | 21,615 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 612 | OD1 | ASN | M | 214 | 11,859 | -16,419 | 22,813 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 613 | ND2 | ASN | M | 214 | 12,177 | -15,754 | 20,643 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 614 | N   | GLN | M | 252 | 6,092  | -15,258 | 27,574 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 615 | CA  | GLN | M | 252 | 5,399  | -15,988 | 26,508 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 616 | C   | GLN | M | 252 | 4,487  | -17,062 | 27,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 617 | O   | GLN | M | 252 | 3,343  | -17,209 | 26,701 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 618 | CB  | GLN | M | 252 | 6,348  | -16,641 | 25,488 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 619 | CG  | GLN | M | 252 | 7,165  | -15,662 | 24,639 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 620 | CD  | GLN | M | 252 | 6,294  | -14,812 | 23,745 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 621 | OE1 | GLN | M | 252 | 5,949  | -13,685 | 24,069 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 622 | NE2 | GLN | M | 252 | 5,911  | -15,431 | 22,578 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 623 | N   | ILE | M | 255 | 1,315  | -15,654 | 28,673 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 624 | CA  | ILE | M | 255 | 0,314  | -15,323 | 27,648 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 625 | C   | ILE | M | 255 | -0,456 | -16,594 | 27,270 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 626 | O   | ILE | M | 255 | -1,677 | -16,562 | 27,206 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 627 | CB  | ILE | M | 255 | 0,899  | -14,600 | 26,397 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 628 | CG1 | ILE | M | 255 | 1,511  | -13,217 | 26,721 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 629 | CG2 | ILE | M | 255 | -0,132 | -14,462 | 25,269 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 4 (continuación)**

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 630 | CD1 | ILE | M | 255 | 0,539  | -12,178 | 27,265 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 631 | N   | PHE | M | 256 | 0,309  | -17,724 | 26,987 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 632 | CA  | PHE | M | 256 | -0,300 | -19,014 | 26,640 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 633 | C   | PHE | M | 256 | -1,370 | -19,377 | 27,673 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 634 | O   | PHE | M | 256 | -2,501 | -19,676 | 27,309 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 635 | CB  | PHE | M | 256 | 0,741  | -20,143 | 26,468 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 636 | CG  | PHE | M | 256 | 0,139  | -21,530 | 26,434 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 637 | CD1 | PHE | M | 256 | 0,410  | -22,456 | 27,472 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 638 | CD2 | PHE | M | 256 | -0,735 | -21,920 | 25,391 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 639 | CE1 | PHE | M | 256 | -0,169 | -23,740 | 27,459 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 640 | CE2 | PHE | M | 256 | -1,314 | -23,203 | 25,379 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 641 | CZ  | PHE | M | 256 | -1,029 | -24,114 | 26,412 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 642 | N   | LEU | M | 259 | -4,533 | -17,251 | 27,581 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 643 | CA  | LEU | M | 259 | -5,286 | -17,370 | 26,332 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 644 | C   | LEU | M | 259 | -6,190 | -18,597 | 26,384 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 645 | O   | LEU | M | 259 | -7,382 | -18,501 | 26,120 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 646 | CB  | LEU | M | 259 | -4,356 | -17,357 | 25,099 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 647 | CG  | LEU | M | 259 | -5,088 | -17,225 | 23,745 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 648 | CD1 | LEU | M | 259 | -4,218 | -16,458 | 22,749 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 649 | CD2 | LEU | M | 259 | -5,448 | -18,586 | 23,146 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 5**

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 1  | N   | ALA | A | 21 | 5,881  | -12,842 | -1,403 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 2  | CA  | ALA | A | 21 | 5,032  | -12,962 | -0,219 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 3  | C   | ALA | A | 21 | 3,724  | -12,190 | -0,393 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 4  | O   | ALA | A | 21 | 2,644  | -12,753 | -0,261 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 5  | CB  | ALA | A | 21 | 5,743  | -12,524 | 1,061  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 6  | N   | ILE | A | 22 | 3,865  | -10,830 | -0,654 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 7  | CA  | ILE | A | 22 | 2,696  | -9,942  | -0,707 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 8  | C   | ILE | A | 22 | 1,780  | -10,304 | -1,877 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 9  | O   | ILE | A | 22 | 0,564  | -10,249 | -1,742 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 10 | CB  | ILE | A | 22 | 3,012  | -8,420  | -0,634 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 11 | CG1 | ILE | A | 22 | 3,808  | -7,845  | -1,829 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 12 | CG2 | ILE | A | 22 | 3,732  | -8,094  | 0,679  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 13 | CD1 | ILE | A | 22 | 2,917  | -7,216  | -2,890 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 14 | N   | ALA | A | 24 | 1,317  | -13,263 | -3,458 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 15 | CA  | ALA | A | 24 | 0,563  | -14,470 | -3,134 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 16 | C   | ALA | A | 24 | -0,656 | -14,135 | -2,280 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 17 | O   | ALA | A | 24 | -1,754 | -14,581 | -2,580 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 18 | CB  | ALA | A | 24 | 1,423  | -15,525 | -2,443 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 19 | N   | GLY | A | 25 | -0,414 | -13,331 | -1,171 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 20 | CA  | GLY | A | 25 | -1,450 | -12,972 | -0,212 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 21 | C   | GLY | A | 25 | -2,689 | -12,390 | -0,872 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 22 | O   | GLY | A | 25 | -3,799 | -12,857 | -0,647 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 23 | N   | LEU | A | 59 | -1,069 | -19,335 | -3,710 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 24 | CA  | LEU | A | 59 | -0,138 | -19,537 | -2,599 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 25 | C   | LEU | A | 59 | 1,257  | -19,890 | -3,118 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 26 | O   | LEU | A | 59 | 2,236  | -19,287 | -2,700 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 27 | CB  | LEU | A | 59 | -0,654 | -20,593 | -1,599 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 28 | CG  | LEU | A | 59 | 0,253  | -20,834 | -0,375 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 29 | CD1 | LEU | A | 59 | 0,412  | -19,583 | 0,489  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 30 | CD2 | LEU | A | 59 | -0,317 | -21,972 | 0,469  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 31 | N   | ILE | K | 16 | 10,647 | -2,985  | 11,484 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 32 | CA  | ILE | K | 16 | 9,949  | -4,131  | 12,078 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 33 | C   | ILE | K | 16 | 8,633  | -3,639  | 12,688 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 34 | O   | ILE | K | 16 | 7,578  | -4,192  | 12,405 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 35 | CB  | ILE | K | 16 | 10,839 | -4,911  | 13,092 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 36 | CG1 | ILE | K | 16 | 11,982 | -5,650  | 12,360 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 37 | CG2 | ILE | K | 16 | 10,028 | -5,918  | 13,915 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 38 | CD1 | ILE | K | 16 | 13,158 | -5,961  | 13,274 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 39 | N   | GLY | K | 19 | 5,970  | -2,022  | 10,048 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 40 | CA  | GLY | K | 19 | 5,412  | -3,072  | 9,210  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 41 | C   | GLY | K | 19 | 4,400  | -3,910  | 9,967  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 42 | O   | GLY | K | 19 | 3,291  | -4,135  | 9,498  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 43 | N   | GLY | K | 20 | 4,855  | -4,394  | 11,185 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 44 | CA  | GLY | K | 20 | 4,029  | -5,189  | 12,076 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 45 | C   | GLY | K | 20 | 2,705  | -4,513  | 12,381 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |    |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 46 | O   | GLY | K | 20 | 1,655   | -5,133  | 12,286 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 47 | N   | ALA | K | 21 | 2,813   | -3,195  | 12,802 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 48 | CA  | ALA | K | 21 | 1,674   | -2,403  | 13,259 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 49 | C   | ALA | K | 21 | 0,573   | -2,358  | 12,210 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 50 | O   | ALA | K | 21 | -0,571  | -2,687  | 12,496 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 51 | CB  | ALA | K | 21 | 2,069   | -0,980  | 13,646 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 52 | N   | ILE | K | 22 | 0,959   | -1,866  | 10,968 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 53 | CA  | ILE | K | 22 | -0,022  | -1,644  | 9,902  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 54 | C   | ILE | K | 22 | -0,648  | -2,967  | 9,462  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 55 | O   | ILE | K | 22 | -1,839  | -3,017  | 9,187  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 56 | CB  | ILE | K | 22 | 0,471   | -0,759  | 8,721  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 57 | CG1 | ILE | K | 22 | 1,645   | -1,331  | 7,895  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 58 | CG2 | ILE | K | 22 | 0,838   | 0,636   | 9,238  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 59 | CD1 | ILE | K | 22 | 1,196   | -2,128  | 6,680  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 60 | N   | GLY | K | 23 | 0,209   | -4,060  | 9,392  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 61 | CA  | GLY | K | 23 | -0,252  | -5,389  | 9,028  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 62 | C   | GLY | K | 23 | -1,370  | -5,851  | 9,940  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 63 | O   | GLY | K | 23 | -2,445  | -6,210  | 9,480  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 64 | N   | ALA | K | 24 | -1,045  | -5,828  | 11,290 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 65 | CA  | ALA | K | 24 | -1,970  | -6,229  | 12,347 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 66 | C   | ALA | K | 24 | -3,298  | -5,486  | 12,227 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 67 | O   | ALA | K | 24 | -4,355  | -6,101  | 12,268 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 68 | CB  | ALA | K | 24 | -1,374  | -6,022  | 13,737 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 69 | N   | GLY | K | 25 | -3,201  | -4,105  | 12,103 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 70 | CA  | GLY | K | 25 | -4,358  | -3,224  | 12,066 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 71 | C   | GLY | K | 25 | -5,345  | -3,604  | 10,977 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 72 | O   | GLY | K | 25 | -6,530  | -3,776  | 11,233 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 73 | N   | GLY | K | 27 | -5,390  | -6,420  | 9,296  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 74 | CA  | GLY | K | 27 | -5,822  | -7,781  | 9,578  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 75 | C   | GLY | K | 27 | -7,102  | -7,831  | 10,391 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 76 | O   | GLY | K | 27 | -8,060  | -8,484  | 9,997  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 77 | N   | ASP | K | 28 | -7,068  | -7,107  | 11,579 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 78 | CA  | ASP | K | 28 | -8,213  | -7,027  | 12,494 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 79 | C   | ASP | K | 28 | -9,473  | -6,650  | 11,728 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 80 | O   | ASP | K | 28 | -10,504 | -7,289  | 11,892 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 81 | CB  | ASP | K | 28 | -8,029  | -6,024  | 13,647 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 82 | CG  | ASP | K | 28 | -7,176  | -6,602  | 14,743 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 83 | OD1 | ASP | K | 28 | -5,961  | -6,498  | 14,817 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 84 | OD2 | ASP | K | 28 | -7,934  | -7,314  | 15,613 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 85 | N   | ALA | K | 31 | -10,360 | -9,341  | 8,254  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 86 | CA  | ALA | K | 31 | -10,695 | -10,710 | 8,645  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 87 | C   | ALA | K | 31 | -11,886 | -10,733 | 9,598  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 88 | O   | ALA | K | 31 | -12,791 | -11,543 | 9,438  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 89 | CB  | ALA | K | 31 | -9,513  | -11,450 | 9,262  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 90  | N   | PHE | K | 53 | -11,251 | -14,828 | 19,330 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 91  | CA  | PHE | K | 53 | -10,086 | -15,610 | 18,910 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 92  | C   | PHE | K | 53 | -9,416  | -14,919 | 17,715 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 93  | O   | PHE | K | 53 | -8,214  | -14,687 | 17,727 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 94  | CB  | PHE | K | 53 | -10,413 | -17,088 | 18,615 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 95  | CG  | PHE | K | 53 | -9,168  | -17,944 | 18,656 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 96  | CD1 | PHE | K | 53 | -8,363  | -18,116 | 17,502 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 97  | CD2 | PHE | K | 53 | -8,769  | -18,572 | 19,864 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 98  | CE1 | PHE | K | 53 | -7,177  | -18,871 | 17,564 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 99  | CE2 | PHE | K | 53 | -7,587  | -19,335 | 19,920 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 100 | CZ  | PHE | K | 53 | -6,787  | -19,478 | 18,772 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 101 | N   | PHE | K | 54 | -10,253 | -14,602 | 16,650 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 102 | CA  | PHE | K | 54 | -9,754  | -13,946 | 15,437 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 103 | C   | PHE | K | 54 | -9,027  | -12,653 | 15,816 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 104 | O   | PHE | K | 54 | -7,868  | -12,465 | 15,469 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 105 | CB  | PHE | K | 54 | -10,857 | -13,644 | 14,396 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 106 | CG  | PHE | K | 54 | -11,031 | -14,732 | 13,363 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 107 | CD1 | PHE | K | 54 | -10,657 | -14,497 | 12,014 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 108 | CD2 | PHE | K | 54 | -11,600 | -15,986 | 13,699 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 109 | CE1 | PHE | K | 54 | -10,855 | -15,483 | 11,030 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 110 | CE2 | PHE | K | 54 | -11,796 | -16,971 | 12,711 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 111 | CZ  | PHE | K | 54 | -11,427 | -16,719 | 11,377 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 112 | N   | ILE | K | 55 | -9,789  | -11,720 | 16,511 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 113 | CA  | ILE | K | 55 | -9,296  | -10,359 | 16,735 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 114 | C   | ILE | K | 55 | -8,075  | -10,305 | 17,655 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 115 | O   | ILE | K | 55 | -7,239  | -9,431  | 17,475 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 116 | CB  | ILE | K | 55 | -10,374 | -9,314  | 17,141 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 117 | CG1 | ILE | K | 55 | -11,066 | -9,614  | 18,484 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 118 | CG2 | ILE | K | 55 | -11,397 | -9,148  | 16,011 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 119 | CD1 | ILE | K | 55 | -11,876 | -8,446  | 19,024 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 120 | N   | THR | K | 56 | -8,005  | -11,228 | 18,695 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 121 | CA  | THR | K | 56 | -6,877  | -11,241 | 19,628 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 122 | C   | THR | K | 56 | -5,591  | -11,653 | 18,909 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 123 | O   | THR | K | 56 | -4,545  | -11,076 | 19,169 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 124 | CB  | THR | K | 56 | -7,142  | -12,025 | 20,940 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 125 | OG1 | THR | K | 56 | -6,232  | -11,582 | 21,949 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 126 | CG2 | THR | K | 56 | -6,997  | -13,539 | 20,848 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 127 | N   | VAL | K | 57 | -5,684  | -12,700 | 17,993 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 128 | CA  | VAL | K | 57 | -4,525  | -13,128 | 17,197 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 129 | C   | VAL | K | 57 | -4,015  | -11,905 | 16,430 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 130 | O   | VAL |   | 57 | -2,835  | -11,585 | 16,495 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 131 | CB  | VAL | K | 57 | -4,821  | -14,346 | 16,278 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 132 | CG1 | VAL | K | 57 | -3,708  | -14,594 | 15,256 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 133 | CG2 | VAL | K | 57 | -5,001  | -15,618 | 17,111 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 134 | N   | GLY | K | 58 | -4,974  | -11,224 | 15,688 | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 135 | CA  | GLY | K | 58 | -4,665 | -10,040 | 14,902 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 136 | C   | GLY | K | 58 | -3,915 | -8,999  | 15,716 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 137 | O   | GLY | K | 58 | -2,837 | -8,566  | 15,338 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 138 | N   | LEU | K | 59 | -4,569 | -8,588  | 16,866 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 139 | CA  | LEU | K | 59 | -4,102 | -7,488  | 17,709 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 140 | C   | LEU | K | 59 | -2,696 | -7,785  | 18,219 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 141 | O   | LEU | K | 59 | -1,786 | -6,994  | 18,011 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 142 | CB  | LEU | K | 59 | -5,084 | -7,200  | 18,866 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 143 | CG  | LEU | K | 59 | -4,667 | -6,055  | 19,810 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 144 | CD1 | LEU | K | 59 | -4,617 | -4,705  | 19,094 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 145 | CD2 | LEU | K | 59 | -5,640 | -5,983  | 20,985 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 146 | N   | VAL | K | 60 | -2,575 | -8,958  | 18,956 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 147 | CA  | VAL | K | 60 | -1,376 | -9,313  | 19,723 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 148 | C   | VAL | K | 60 | -0,172 | -9,621  | 18,808 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 149 | O   | VAL | K | 60 | 0,965  | -9,587  | 19,262 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 150 | CB  | VAL | K | 60 | -1,666 | -10,425 | 20,774 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 151 | CG1 | VAL | K | 60 | -0,436 | -10,797 | 21,603 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 152 | CG2 | VAL | K | 60 | -2,756 | -9,980  | 21,761 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 153 | N   | GLU | K | 61 | -0,439 | -9,875  | 17,464 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 154 | CA  | GLU | K | 61 | 0,617  | -9,928  | 16,448 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 155 | C   | GLU | K | 61 | 1,600  | -8,765  | 16,629 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 156 | O   | GLU | K | 61 | 2,806  | -8,976  | 16,643 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 157 | CB  | GLU | K | 61 | 0,048  | -9,957  | 15,018 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 158 | CG  | GLU | K | 61 | 1,116  | -10,204 | 13,955 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 159 | CD  | GLU | K | 61 | 0,480  | -10,239 | 12,589 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 160 | OE1 | GLU | K | 61 | 0,270  | -9,258  | 11,891 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 161 | OE2 | GLU | K | 61 | 0,106  | -11,500 | 12,255 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 162 | N   | ALA | K | 62 | 1,026  | -7,499  | 16,735 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 163 | CA  | ALA | K | 62 | 1,838  | -6,288  | 16,832 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 164 | C   | ALA | K | 62 | 2,817  | -6,381  | 18,011 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 165 | O   | ALA | K | 62 | 4,014  | -6,325  | 17,766 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 166 | CB  | ALA | K | 62 | 1,026  | -4,994  | 16,802 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 167 | N   | TYR | K | 64 | 4,143  | -8,947  | 19,533 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 168 | CA  | TYR | K | 64 | 5,238  | -9,901  | 19,299 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 169 | C   | TYR | K | 64 | 6,411  | -9,187  | 18,617 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 170 | O   | TYR | K | 64 | 7,549  | -9,293  | 19,057 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 171 | CB  | TYR | K | 64 | 4,859  | -11,158 | 18,485 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 172 | CG  | TYR | K | 64 | 3,743  | -12,009 | 19,045 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 173 | CD1 | TYR | K | 64 | 3,591  | -12,248 | 20,436 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 174 | CD2 | TYR | K | 64 | 2,826  | -12,617 | 18,151 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 175 | CE1 | TYR | K | 64 | 2,524  | -13,026 | 20,919 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 176 | CE2 | TYR | K | 64 | 1,754  | -13,394 | 18,625 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 177 | CZ  | TYR | K | 64 | 1,603  | -13,582 | 20,014 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 178 | OH  | TYR | K | 64 | 0,533  | -14,296 | 20,528 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 179 | N   | PHE | K | 65 | 6,092  | -8,473  | 17,468 | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 180 | CA  | PHE | K | 65 | 7,112  | -7,764  | 16,688 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 181 | C   | PHE | K | 65 | 7,701  | -6,560  | 17,423 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 182 | O   | PHE | K | 65 | 8,869  | -6,250  | 17,232 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 183 | CB  | PHE | K | 65 | 6,605  | -7,346  | 15,295 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 184 | CG  | PHE | K | 65 | 6,399  | -8,550  | 14,405 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 185 | CD1 | PHE | K | 65 | 7,512  | -9,293  | 13,931 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 186 | CE1 | PHE | K | 65 | 7,321  | -10,463 | 13,174 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 187 | CZ  | PHE | K | 65 | 6,021  | -10,897 | 12,868 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 188 | CE2 | PHE | K | 65 | 4,911  | -10,153 | 13,301 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 189 | CD2 | PHE | K | 65 | 5,096  | -8,983  | 14,061 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 190 | N   | ILE | K | 66 | 6,849  | -5,852  | 18,262 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 191 | CA  | ILE | K | 66 | 7,323  | -4,737  | 19,093 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 192 | C   | ILE | K | 66 | 8,436  | -5,275  | 19,995 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 193 | O   | ILE | K | 66 | 9,510  | -4,692  | 20,045 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 194 | CB  | ILE | K | 66 | 6,205  | -4,010  | 19,896 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 195 | CG1 | ILE | K | 66 | 5,194  | -3,331  | 18,944 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 196 | CG2 | ILE | K | 66 | 6,795  | -2,959  | 20,847 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 197 | CD1 | ILE | K | 66 | 3,915  | -2,888  | 19,641 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 198 | N   | ASN | K | 67 | 8,135  | -6,412  | 20,737 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 199 | CA  | ASN | K | 67 | 9,101  | -7,043  | 21,643 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 200 | C   | ASN | K | 67 | 10,396 | -7,398  | 20,922 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 201 | O   | ASN | K | 67 | 11,470 | -7,186  | 21,466 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 202 | CB  | ASN | K | 67 | 8,561  | -8,295  | 22,359 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 203 | CG  | ASN | K | 67 | 7,789  | -7,913  | 23,607 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 204 | OD1 | ASN | K | 67 | 6,585  | -7,703  | 23,596 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 205 | ND2 | ASN | K | 67 | 8,574  | -7,784  | 24,731 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 206 | N   | LEU | K | 68 | 10,265 | -8,000  | 19,676 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 207 | CA  | LEU | K | 68 | 11,425 | -8,412  | 18,874 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 208 | C   | LEU | K | 68 | 12,356 | -7,211  | 18,673 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 209 | O   | LEU | K | 68 | 13,544 | -7,283  | 18,962 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 210 | CB  | LEU | K | 68 | 11,000 | -9,085  | 17,550 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 211 | CG  | LEU | K | 68 | 12,106 | -9,924  | 16,872 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 212 | CD1 | LEU | K | 68 | 11,478 | -11,029 | 16,022 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 213 | CD2 | LEU | K | 68 | 13,020 | -9,082  | 15,983 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 214 | N   | GLY | L | 14 | 15,198 | -8,074  | 9,311  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 215 | CA  | GLY | L | 14 | 14,066 | -7,197  | 9,559  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 216 | C   | GLY | L | 14 | 12,995 | -7,318  | 8,489  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 217 | O   | GLY | L | 14 | 11,827 | -7,504  | 8,800  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 218 | N   | ILE | L | 16 | 12,564 | -9,668  | 6,039  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 219 | CA  | ILE | L | 16 | 11,972 | -10,997 | 5,849  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 220 | C   | ILE | L | 16 | 10,872 | -11,230 | 6,896  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 221 | O   | ILE | L | 16 | 9,821  | -11,769 | 6,579  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 222 | CB  | ILE | L | 16 | 13,034 | -12,140 | 5,737  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 223 | CG1 | ILE | L | 16 | 12,723 | -13,142 | 4,605  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 224 | CG2 | ILE | L | 16 | 13,344 | -12,873 | 7,046  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 225 | CD1 | ILE | L | 16 | 11,458 | -13,971 | 4,775  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 226 | N   | MET | L | 17 | 11,163 | -10,818 | 8,193  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 227 | CA  | MET | L | 17 | 10,196 | -10,952 | 9,281  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 228 | C   | MET | L | 17 | 8,956  | -10,129 | 8,951  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 229 | O   | MET | L | 17 | 7,865  | -10,675 | 8,862  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 230 | CB  | MET | L | 17 | 10,759 | -10,564 | 10,663 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 231 | CG  | MET | L | 17 | 11,766 | -11,566 | 11,230 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 232 | SD  | MET | L | 17 | 10,949 | -13,111 | 11,753 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 233 | CE  | MET | L | 17 | 11,549 | -14,216 | 10,448 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 234 | N   | ALA | L | 18 | 9,158  | -8,765  | 8,795  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 235 | CA  | ALA | L | 18 | 8,046  | -7,822  | 8,702  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 236 | C   | ALA | L | 18 | 7,152  | -8,180  | 7,521  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 237 | O   | ALA | L | 18 | 5,979  | -8,477  | 7,692  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 238 | CB  | ALA | L | 18 | 8,510  | -6,370  | 8,625  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 239 | N   | GLY | L | 19 | 7,766  | -8,127  | 6,279  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 240 | CA  | GLY | L | 19 | 7,039  | -8,324  | 5,037  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 241 | C   | GLY | L | 19 | 6,426  | -9,707  | 4,980  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 242 | O   | GLY | L | 19 | 5,227  | -9,857  | 4,788  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 243 | N   | GLY | L | 20 | 7,342  | -10,737 | 5,121  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 244 | CA  | GLY | L | 20 | 7,000  | -12,131 | 4,906  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 245 | C   | GLY | L | 20 | 5,877  | -12,608 | 5,802  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 246 | O   | GLY | L | 20 | 4,881  | -13,136 | 5,327  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 247 | N   | ALA | L | 21 | 6,105  | -12,439 | 7,161  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 248 | CA  | ALA | L | 21 | 5,177  | -12,957 | 8,167  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 249 | C   | ALA | L | 21 | 3,795  | -12,317 | 8,072  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 250 | O   | ALA | L | 21 | 2,795  | -12,996 | 8,255  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 251 | CB  | ALA | L | 21 | 5,700  | -12,806 | 9,589  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 252 | N   | ILE | L | 22 | 3,756  | -10,947 | 7,836  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 253 | CA  | ILE | L | 22 | 2,476  | -10,243 | 7,663  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 254 | C   | ILE | L | 22 | 1,766  | -10,786 | 6,419  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 255 | O   | ILE | L | 22 | 0,554  | -10,946 | 6,440  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 256 | CB  | ILE | L | 22 | 2,626  | -8,694  | 7,709  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 257 | CG1 | ILE | L | 22 | 2,574  | -8,158  | 9,161  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 258 | CG2 | ILE | L | 22 | 1,550  | -7,959  | 6,902  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 259 | CD1 | ILE | L | 22 | 3,547  | -8,791  | 10,144 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 260 | N   | GLY | L | 23 | 2,556  | -11,065 | 5,313  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 261 | CA  | GLY | L | 23 | 2,039  | -11,727 | 4,122  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 262 | C   | GLY | L | 23 | 1,274  | -12,998 | 4,463  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 263 | O   | GLY | L | 23 | 0,151  | -13,189 | 4,016  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 264 | N   | ALA | L | 24 | 1,957  | -13,889 | 5,281  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 265 | CA  | ALA | L | 24 | 1,364  | -15,139 | 5,762  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 266 | C   | ALA | L | 24 | 0,049  | -14,890 | 6,499  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 267 | O   | ALA | L | 24 | -0,925 | -15,594 | 6,275  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 268 | CB  | ALA | L | 24 | 2,317  | -15,935 | 6,650  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 269 | N   | GLY | L | 25 | 0,070  | -13,864 | 7,434  | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 270 | CA  | GLY | L | 25 | -1,089  | -13,467 | 8,219  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 271 | C   | GLY | L | 25 | -2,292  | -13,111 | 7,362  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 272 | O   | GLY | L | 25 | -3,397  | -13,566 | 7,623  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 273 | N   | ILE | L | 26 | -2,031  | -12,218 | 6,329  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 274 | CA  | ILE | L | 26 | -3,054  | -11,761 | 5,381  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 275 | C   | ILE | L | 26 | -3,674  | -13,003 | 4,743  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 276 | O   | ILE | L | 26 | -4,889  | -13,145 | 4,749  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 277 | CB  | ILE | L | 26 | -2,514  | -10,752 | 4,324  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 278 | CG1 | ILE | L | 26 | -2,147  | -9,409  | 4,994  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 279 | CG2 | ILE | L | 26 | -3,535  | -10,506 | 3,201  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 280 | CD1 | ILE | L | 26 | -1,217  | -8,554  | 4,146  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 281 | N   | GLY | L | 27 | -2,774  | -13,896 | 4,170  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 282 | CA  | GLY | L | 27 | -3,181  | -15,110 | 3,481  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 283 | C   | GLY | L | 27 | -4,140  | -15,936 | 4,316  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 284 | O   | GLY | L | 27 | -5,230  | -16,267 | 3,870  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 285 | N   | ASP | L | 28 | -3,663  | -16,268 | 5,578  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 286 | CA  | ASP | L | 28 | -4,426  | -17,067 | 6,539  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 287 | C   | ASP | L | 28 | -5,824  | -16,490 | 6,730  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 288 | O   | ASP | L | 28 | -6,793  | -17,235 | 6,725  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 289 | CB  | ASP | L | 28 | -3,714  | -17,205 | 7,894  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 290 | CG  | ASP | L | 28 | -4,554  | -17,995 | 8,870  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 291 | OD1 | ASP | L | 28 | -5,304  | -17,502 | 9,701  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 292 | OD2 | ASP | L | 28 | -4,426  | -19,331 | 8,666  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 293 | N   | GLY | L | 29 | -5,891  | -15,120 | 6,948  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 294 | CA  | GLY | L | 29 | -7,140  | -14,419 | 7,187  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 295 | C   | GLY | L | 29 | -8,116  | -14,632 | 6,046  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 296 | O   | GLY | L | 29 | -9,157  | -15,251 | 6,219  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 297 | N   | VAL | L | 30 | -7,724  | -14,059 | 4,844  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 298 | CA  | VAL | L | 30 | -8,629  | -13,949 | 3,692  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 299 | C   | VAL | L | 30 | -9,094  | -15,327 | 3,208  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 300 | O   | VAL | L | 30 | -10,279 | -15,543 | 2,987  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 301 | CB  | VAL | L | 30 | -8,106  | -13,054 | 2,531  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 302 | CG1 | VAL | L | 30 | -7,924  | -11,606 | 2,995  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 303 | CG2 | VAL | L | 30 | -6,817  | -13,548 | 1,866  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 304 | N   | ALA | L | 31 | -8,091  | -16,272 | 3,023  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 305 | CA  | ALA | L | 31 | -8,388  | -17,640 | 2,597  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 306 | C   | ALA | L | 31 | -9,244  | -18,351 | 3,642  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 307 | O   | ALA | L | 31 | -10,141 | -19,108 | 3,299  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 308 | CB  | ALA | L | 31 | -7,130  | -18,455 | 2,312  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 309 | N   | GLY | L | 32 | -8,904  | -18,097 | 4,963  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 310 | CA  | GLY | L | 32 | -9,633  | -18,628 | 6,099  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 311 | C   | GLY | L | 32 | -11,116 | -18,323 | 6,071  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 312 | O   | GLY | L | 32 | -11,909 | -19,166 | 6,460  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 313 | N   | PHE | L | 53 | -8,496  | -25,187 | 12,274 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 314 | CA  | PHE | L | 53 | -8,171  | -23,763 | 12,130 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 315 | C   | PHE | L | 53 | -6,890 | -23,457 | 12,911 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 316 | O   | PHE | L | 53 | -5,962 | -22,867 | 12,377 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 317 | CB  | PHE | L | 53 | -9,326 | -22,816 | 12,515 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 318 | CG  | PHE | L | 53 | -8,993 | -21,357 | 12,292 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 319 | CD1 | PHE | L | 53 | -8,825 | -20,842 | 10,980 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 320 | CD2 | PHE | L | 53 | -8,839 | -20,476 | 13,391 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 321 | CE1 | PHE | L | 53 | -8,485 | -19,490 | 10,779 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 322 | CE2 | PHE | L | 53 | -8,500 | -19,125 | 13,186 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 323 | CZ  | PHE | L | 53 | -8,317 | -18,634 | 11,882 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 324 | N   | PHE | L | 54 | -6,879 | -23,863 | 14,237 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 325 | CA  | PHE | L | 54 | -5,791 | -23,484 | 15,142 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 326 | C   | PHE | L | 54 | -4,446 | -24,003 | 14,630 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 327 | O   | PHE | L | 54 | -3,462 | -23,274 | 14,628 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 328 | CB  | PHE | L | 54 | -6,001 | -23,941 | 16,598 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 329 | CG  | PHE | L | 54 | -7,288 | -23,500 | 17,265 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 330 | CD1 | PHE | L | 54 | -7,981 | -22,312 | 16,907 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 331 | CD2 | PHE | L | 54 | -7,828 | -24,299 | 18,301 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 332 | CE1 | PHE | L | 54 | -9,188 | -21,961 | 17,539 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 333 | CE2 | PHE | L | 54 | -9,027 | -23,943 | 18,937 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 334 | CZ  | PHE | L | 54 | -9,708 | -22,777 | 18,557 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 335 | N   | ILE | L | 55 | -4,415 | -25,339 | 14,241 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 336 | CA  | ILE | L | 55 | -3,169 | -25,944 | 13,764 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 337 | C   | ILE | L | 55 | -2,708 | -25,302 | 12,450 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 338 | O   | ILE | L | 55 | -1,515 | -25,103 | 12,267 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 339 | CB  | ILE | L | 55 | -3,180 | -27,498 | 13,738 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 340 | CG1 | ILE | L | 55 | -1,738 | -28,049 | 13,695 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 341 | CG2 | ILE | L | 55 | -4,026 | -28,078 | 12,602 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 342 | CD1 | ILE | L | 55 | -1,648 | -29,541 | 13,981 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 343 | N   | THR | L | 56 | -3,685 | -25,022 | 11,495 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 344 | CA  | THR | L | 56 | -3,324 | -24,487 | 10,182 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 345 | C   | THR | L | 56 | -2,776 | -23,057 | 10,234 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 346 | O   | THR | L | 56 | -2,032 | -22,682 | 9,339  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 347 | CB  | THR | L | 56 | -4,411 | -24,676 | 9,094  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 348 | OG1 | THR | L | 56 | -3,794 | -24,763 | 7,805  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 349 | CG2 | THR | L | 56 | -5,482 | -23,591 | 9,035  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 350 | N   | VAL | L | 57 | -3,164 | -22,246 | 11,299 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 351 | CA  | VAL | L | 57 | -2,504 | -20,955 | 11,560 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 352 | C   | VAL | L | 57 | -0,999 | -21,238 | 11,646 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 353 | O   | VAL | L | 57 | -0,210 | -20,630 | 10,934 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 354 | CB  | VAL | L | 57 | -3,046 | -20,209 | 12,813 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 355 | CG1 | VAL | L | 57 | -2,177 | -19,007 | 13,193 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 356 | CG2 | VAL | L | 57 | -4,475 | -19,712 | 12,588 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 357 | N   | GLY | L | 58 | -0,638 | -22,227 | 12,555 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 358 | CA  | GLY | L | 58 | 0,734  | -22,669 | 12,735 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 359 | C   | GLY | L | 58 | 1,405  | -23,027 | 11,420 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 360 | O   | GLY | L | 58 | 2,484  | -22,536 | 11,126 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 361 | N   | LEU | L | 59 | 0,728  | -23,952 | 10,636 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 362 | CA  | LEU | L | 59 | 1,280  | -24,490 | 9,384  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 363 | C   | LEU | L | 59 | 1,613  | -23,390 | 8,370  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 364 | O   | LEU | L | 59 | 2,651  | -23,446 | 7,725  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 365 | CB  | LEU | L | 59 | 0,366  | -25,532 | 8,706  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 366 | CG  | LEU | L | 59 | 0,194  | -26,846 | 9,498  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 367 | CD1 | LEU | L | 59 | -0,918 | -27,689 | 8,875  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 368 | CD2 | LEU | L | 59 | 1,486  | -27,663 | 9,541  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 369 | N   | VAL | L | 60 | 0,655  | -22,399 | 8,202  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 370 | CA  | VAL | L | 60 | 0,818  | -21,290 | 7,253  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 371 | C   | VAL | L | 60 | 2,049  | -20,455 | 7,640  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 372 | O   | VAL | L | 60 | 2,832  | -20,078 | 6,778  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 373 | CB  | VAL | L | 60 | -0,480 | -20,445 | 7,107  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 374 | CG1 | VAL | L | 60 | -0,256 | -19,131 | 6,358  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 375 | CG2 | VAL | L | 60 | -1,560 | -21,237 | 6,361  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 376 | N   | GLU | L | 61 | 2,172  | -20,129 | 8,986  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 377 | CA  | GLU | L | 61 | 3,337  | -19,405 | 9,510  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 378 | C   | GLU | L | 61 | 4,651  | -20,199 | 9,436  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 379 | O   | GLU | L | 61 | 5,716  | -19,596 | 9,419  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 380 | CB  | GLU | L | 61 | 3,138  | -18,941 | 10,962 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 381 | CG  | GLU | L | 61 | 2,061  | -17,864 | 11,090 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 382 | CD  | GLU | L | 61 | 2,006  | -17,374 | 12,535 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 383 | OE1 | GLU | L | 61 | 1,291  | -18,073 | 13,310 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 384 | OE2 | GLU | L | 61 | 2,715  | -16,364 | 12,786 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 385 | N   | ALA | L | 62 | 4,558  | -21,588 | 9,464  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 386 | CA  | ALA | L | 62 | 5,692  | -22,469 | 9,740  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 387 | C   | ALA | L | 62 | 6,978  | -22,140 | 8,986  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 388 | O   | ALA | L | 62 | 8,021  | -22,108 | 9,623  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 389 | CB  | ALA | L | 62 | 5,366  | -23,956 | 9,613  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 390 | N   | TYR | L | 64 | 8,184  | -19,301 | 7,912  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 391 | CA  | TYR | L | 64 | 8,775  | -18,086 | 8,479  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 392 | C   | TYR | L | 64 | 9,317  | -18,325 | 9,892  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 393 | O   | TYR | L | 64 | 10,332 | -17,753 | 10,266 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 394 | CB  | TYR | L | 64 | 7,803  | -16,892 | 8,449  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 395 | CG  | TYR | L | 64 | 7,396  | -16,567 | 7,028  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 396 | CD1 | TYR | L | 64 | 8,268  | -15,834 | 6,184  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 397 | CD2 | TYR | L | 64 | 6,169  | -17,040 | 6,496  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 398 | CE1 | TYR | L | 64 | 7,935  | -15,597 | 4,837  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 399 | CE2 | TYR | L | 64 | 5,833  | -16,808 | 5,148  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 400 | CZ  | TYR | L | 64 | 6,713  | -16,085 | 4,325  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 401 | OH  | TYR | L | 64 | 6,340  | -15,867 | 3,006  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 402 | N   | PHE | L | 65 | 8,591  | -19,196 | 10,695 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 403 | CA  | PHE | L | 65 | 9,106  | -19,699 | 11,977 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 404 | C   | PHE | L | 65 | 10,500 | -20,313 | 11,766 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 405 | O   | PHE | L | 65 | 11,435 | -19,983 | 12,486 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 406 | CB  | PHE | L | 65 | 8,086  | -20,622 | 12,690 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 407 | CG  | PHE | L | 65 | 8,660  | -21,781 | 13,471 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 408 | CD1 | PHE | L | 65 | 9,445  | -21,570 | 14,632 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 409 | CE1 | PHE | L | 65 | 9,992  | -22,664 | 15,330 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 410 | CZ  | PHE | L | 65 | 9,742  | -23,979 | 14,897 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 411 | CE2 | PHE | L | 65 | 8,951  | -24,200 | 13,758 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 412 | CD2 | PHE | L | 65 | 8,417  | -23,111 | 13,045 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 413 | N   | ILE | L | 66 | 10,602 | -21,255 | 10,746 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 414 | CA  | ILE | L | 66 | 11,863 | -21,934 | 10,436 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 415 | C   | ILE | L | 66 | 12,921 | -20,880 | 10,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 416 | O   | ILE | L | 66 | 14,024 | -20,969 | 10,629 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 417 | CB  | ILE | L | 66 | 11,743 | -23,027 | 9,333  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 418 | CG1 | ILE | L | 66 | 10,834 | -24,206 | 9,754  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 419 | CG2 | ILE | L | 66 | 13,112 | -23,552 | 8,880  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 420 | CD1 | ILE | L | 66 | 11,332 | -25,031 | 10,935 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 421 | N   | ASN | L | 67 | 12,568 | -19,878 | 9,205  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 422 | CA  | ASN | L | 67 | 13,514 | -18,826 | 8,807  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 423 | C   | ASN | L | 67 | 14,165 | -18,202 | 10,035 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 424 | O   | ASN | L | 67 | 15,379 | -18,068 | 10,066 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 425 | CB  | ASN | L | 67 | 12,928 | -17,686 | 7,946  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 426 | CG  | ASN | L | 67 | 12,679 | -18,089 | 6,508  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 427 | OD1 | ASN | L | 67 | 11,560 | -18,310 | 6,072  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 428 | ND2 | ASN | L | 67 | 13,821 | -18,186 | 5,747  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 429 | N   | LEU | L | 68 | 13,303 | -17,783 | 11,044 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 430 | CA  | LEU | L | 68 | 13,771 | -17,078 | 12,243 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 431 | C   | LEU | L | 68 | 14,883 | -17,907 | 12,894 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 432 | O   | LEU | L | 68 | 16,014 | -17,453 | 13,016 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 433 | CB  | LEU | L | 68 | 12,610 | -16,759 | 13,216 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 434 | CG  | LEU | L | 68 | 12,886 | -15,638 | 14,239 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 435 | CD1 | LEU | L | 68 | 11,590 | -15,292 | 14,973 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 436 | CD2 | LEU | L | 68 | 13,950 | -16,005 | 15,272 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 437 | N   | ALA | L | 69 | 14,497 | -19,171 | 13,327 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 438 | CA  | ALA | L | 69 | 15,382 | -20,029 | 14,117 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 439 | C   | ALA | L | 69 | 16,671 | -20,348 | 13,360 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 440 | O   | ALA | L | 69 | 17,761 | -20,262 | 13,911 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 441 | CB  | ALA | L | 69 | 14,694 | -21,321 | 14,552 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 442 | N   | PRO | K | 63 | 2,328  | -6,569  | 19,314 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 443 | CA  | PRO | K | 63 | 3,195  | -6,836  | 20,450 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 444 | C   | PRO | K | 63 | 4,365  | -7,788  | 20,267 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 445 | O   | PRO | K | 63 | 5,439  | -7,509  | 20,781 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 446 | CB  | PRO | K | 63 | 2,260  | -7,282  | 21,557 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 447 | CG  | PRO | K | 63 | 0,996  | -6,494  | 21,282 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 448 | CD  | PRO | K | 63 | 0,991  | -6,259  | 19,780 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 449 | N   | PRO | L | 63 | 6,948  | -21,920 | 7,602  | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 450 | CA  | PRO | L | 63  | 8,151  | -21,540 | 6,873  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 451 | C   | PRO | L | 63  | 8,940  | -20,389 | 7,501  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 452 | O   | PRO | L | 63  | 10,158 | -20,447 | 7,588  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 453 | CB  | PRO | L | 63  | 7,683  | -21,204 | 5,464  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 454 | CG  | PRO | L | 63  | 6,402  | -21,994 | 5,304  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 455 | CD  | PRO | L | 63  | 5,820  | -22,071 | 6,701  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 456 | N   | SER | M | 206 | -1,465 | -25,569 | 20,193 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 457 | CA  | SER | M | 206 | -1,251 | -24,467 | 19,250 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 458 | C   | SER | M | 206 | -0,394 | -23,364 | 19,890 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 459 | O   | SER | M | 206 | 0,590  | -22,924 | 19,311 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 460 | CB  | SER | M | 206 | -2,578 | -23,921 | 18,704 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 461 | OG  | SER | M | 206 | -2,343 | -22,955 | 17,679 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 462 | N   | LEU | M | 207 | -0,835 | -22,896 | 21,123 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 463 | CA  | LEU | M | 207 | -0,188 | -21,775 | 21,816 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 464 | C   | LEU | M | 207 | 1,276  | -22,088 | 22,145 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 465 | O   | LEU | M | 207 | 2,137  | -21,226 | 22,019 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 466 | CB  | LEU | M | 207 | -0,942 | -21,337 | 23,093 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 467 | CG  | LEU | M | 207 | -2,049 | -20,274 | 22,888 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 468 | CD1 | LEU | M | 207 | -1,457 | -18,899 | 22,585 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 469 | CD2 | LEU | M | 207 | -3,097 | -20,644 | 21,838 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 470 | N   | LEU | M | 209 | 3,398  | -23,907 | 20,563 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 471 | CA  | LEU | M | 209 | 4,255  | -23,926 | 19,376 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 472 | C   | LEU | M | 209 | 5,088  | -22,645 | 19,269 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 473 | O   | LEU | M | 209 | 6,295  | -22,716 | 19,078 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 474 | CB  | LEU | M | 209 | 3,458  | -24,190 | 18,082 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 475 | CG  | LEU | M | 209 | 4,307  | -24,350 | 16,802 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 476 | CD1 | LEU | M | 209 | 5,264  | -25,541 | 16,875 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 477 | CD2 | LEU | M | 209 | 3,386  | -24,506 | 15,593 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 478 | N   | ARG | M | 210 | 4,395  | -21,436 | 19,334 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 479 | CA  | ARG | M | 210 | 5,121  | -20,192 | 19,071 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 480 | C   | ARG | M | 210 | 6,175  | -19,896 | 20,142 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 481 | O   | ARG | M | 210 | 7,276  | -19,473 | 19,811 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 482 | CB  | ARG | M | 210 | 4,268  | -18,971 | 18,667 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 483 | CG  | ARG | M | 210 | 3,638  | -18,112 | 19,768 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 484 | CD  | ARG | M | 210 | 2,158  | -18,393 | 20,003 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 485 | NE  | ARG | M | 210 | 1,604  | -17,342 | 20,877 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 486 | CZ  | ARG | M | 210 | 1,731  | -17,257 | 22,245 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 487 | NH1 | ARG | M | 210 | 2,289  | -18,232 | 23,037 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 488 | NH2 | ARG | M | 210 | 1,286  | -16,136 | 22,899 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 489 | N   | LEU | M | 211 | 5,795  | -20,083 | 21,471 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 490 | CA  | LEU | M | 211 | 6,734  | -19,803 | 22,567 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 491 | C   | LEU | M | 211 | 7,939  | -20,746 | 22,556 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 492 | O   | LEU | M | 211 | 9,039  | -20,338 | 22,899 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 493 | CB  | LEU | M | 211 | 6,067  | -19,645 | 23,947 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 494 | CG  | LEU | M | 211 | 5,526  | -20,909 | 24,642 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 495 | CD1 | LEU | M | 211 | 6,600  | -21,602 | 25,484 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 496 | CD2 | LEU | M | 211 | 4,341  | -20,550 | 25,539 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 497 | N   | PHE | M | 212 | 7,680  | -22,052 | 22,157 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 498 | CA  | PHE | M | 212 | 8,707  | -23,084 | 21,988 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 499 | C   | PHE | M | 212 | 9,819  | -22,550 | 21,076 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 500 | O   | PHE | M | 212 | 10,996 | -22,649 | 21,401 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 501 | CB  | PHE | M | 212 | 8,068  | -24,391 | 21,469 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 502 | CG  | PHE | M | 212 | 9,004  | -25,542 | 21,220 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 503 | CD1 | PHE | M | 212 | 9,208  | -26,025 | 19,902 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 504 | CD2 | PHE | M | 212 | 9,628  | -26,211 | 22,299 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 505 | CE1 | PHE | M | 212 | 10,009 | -27,158 | 19,672 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 506 | CE2 | PHE | M | 212 | 10,431 | -27,339 | 22,062 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 507 | CZ  | PHE | M | 212 | 10,625 | -27,813 | 20,752 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 508 | N   | GLY | M | 213 | 9,388  | -21,965 | 19,891 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 509 | CA  | GLY | M | 213 | 10,301 | -21,336 | 18,951 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 510 | C   | GLY | M | 213 | 11,123 | -20,232 | 19,597 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 511 | O   | GLY | M | 213 | 12,347 | -20,250 | 19,546 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 512 | N   | ASN | M | 214 | 10,364 | -19,229 | 20,191 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 513 | CA  | ASN | M | 214 | 10,951 | -17,998 | 20,736 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 514 | C   | ASN | M | 214 | 12,113 | -18,295 | 21,676 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 515 | O   | ASN | M | 214 | 13,171 | -17,697 | 21,543 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 516 | CB  | ASN | M | 214 | 9,942  | -17,090 | 21,468 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 517 | CG  | ASN | M | 214 | 9,292  | -16,100 | 20,522 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 518 | OD1 | ASN | M | 214 | 9,826  | -15,042 | 20,224 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 519 | ND2 | ASN | M | 214 | 8,080  | -16,508 | 20,015 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 520 | N   | GLN | M | 252 | 5,809  | -14,680 | 27,293 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 521 | CA  | GLN | M | 252 | 4,947  | -15,475 | 26,417 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 522 | C   | GLN | M | 252 | 3,965  | -16,318 | 27,234 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 523 | O   | GLN | M | 252 | 2,796  | -16,423 | 26,885 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 524 | CB  | GLN | M | 252 | 5,729  | -16,384 | 25,460 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 525 | CG  | GLN | M | 252 | 6,493  | -15,632 | 24,365 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 526 | CD  | GLN | M | 252 | 5,558  | -14,976 | 23,366 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 527 | OE1 | GLN | M | 252 | 5,266  | -13,790 | 23,431 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 528 | NE2 | GLN | M | 252 | 5,051  | -15,838 | 22,419 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 529 | N   | ILE | M | 255 | 0,964  | -14,328 | 28,520 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 530 | CA  | ILE | M | 255 | -0,102 | -14,190 | 27,516 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 531 | C   | ILE | M | 255 | -0,955 | -15,467 | 27,497 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 532 | O   | ILE | M | 255 | -2,176 | -15,390 | 27,471 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 533 | CB  | ILE | M | 255 | 0,417  | -13,804 | 26,101 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 534 | CG1 | ILE | M | 255 | 1,209  | -12,476 | 26,083 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 535 | CG2 | ILE | M | 255 | -0,717 | -13,748 | 25,070 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 536 | CD1 | ILE | M | 255 | 0,452  | -11,258 | 26,598 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 537 | N   | PHE | M | 256 | -0,261 | -16,672 | 27,484 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 538 | CA  | PHE | M | 256 | -0,946 | -17,970 | 27,541 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 539 | C   | PHE | M | 256 | -1,898 | -18,032 | 28,747 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 5 (continuación)

|       |     |     |     |   |     |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|-----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 540 | O   | PHE | M | 256 | -3,034 | -18,468 | 28,616 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 541 | CB  | PHE | M | 256 | 0,059  | -19,141 | 27,510 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 542 | CG  | PHE | M | 256 | -0,534 | -20,518 | 27,696 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 543 | CD1 | PHE | M | 256 | -0,013 | -21,386 | 28,689 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 544 | CD2 | PHE | M | 256 | -1,597 | -20,985 | 26,882 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 545 | CE1 | PHE | M | 256 | -0,539 | -22,680 | 28,863 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 546 | CE2 | PHE | M | 256 | -2,128 | -22,276 | 27,065 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 547 | CZ  | PHE | M | 256 | -1,597 | -23,125 | 28,052 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 548 | N   | LEU | M | 259 | -5,058 | -16,050 | 28,251 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 549 | CA  | LEU | M | 259 | -5,940 | -16,735 | 27,308 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 550 | C   | LEU | M | 259 | -6,805 | -17,754 | 28,046 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 551 | O   | LEU | M | 259 | -8,018 | -17,761 | 27,887 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 552 | CB  | LEU | M | 259 | -5,159 | -17,348 | 26,128 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 553 | CG  | LEU | M | 259 | -6,050 | -17,856 | 24,974 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 554 | CD1 | LEU | M | 259 | -5,327 | -17,681 | 23,640 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 555 | CD2 | LEU | M | 259 | -6,433 | -19,328 | 25,144 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 556 | N   | ILE | M | 205 | -1,811 | -26,903 | 22,691 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 557 | CA  | ILE | M | 205 | -0,778 | -27,375 | 21,760 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 558 | C   | ILE | M | 205 | -0,407 | -26,242 | 20,791 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 559 | O   | ILE | M | 205 | 0,770  | -25,964 | 20,598 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 560 | CB  | ILE | M | 205 | -1,070 | -28,769 | 21,130 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 561 | CG1 | ILE | M | 205 | 0,183  | -29,444 | 20,526 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 562 | CG2 | ILE | M | 205 | -2,263 | -28,819 | 20,179 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 563 | CD1 | ILE | M | 205 | 0,576  | -29,023 | 19,115 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 564 | N   | SER | M | 208 | 1,542  | -23,361 | 22,633 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 565 | CA  | SER | M | 208 | 2,900  | -23,765 | 22,998 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 566 | C   | SER | M | 208 | 3,883  | -23,597 | 21,833 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 567 | O   | SER | M | 208 | 5,032  | -23,247 | 22,054 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 568 | CB  | SER | M | 208 | 2,985  | -25,173 | 23,602 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 569 | OG  | SER | M | 208 | 2,785  | -26,197 | 22,634 | 1,00 | 0,00 | O |

**Tabla 6**

|       |    |     |     |   |    |        |        |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 1  | N   | ILE | K | 5  | 27,058 | -0,783 | 12,427 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 2  | CA  | ILE | K | 5  | 26,005 | -1,691 | 12,91  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 3  | C   | ILE | K | 5  | 24,924 | -0,881 | 13,636 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 4  | O   | ILE | K | 5  | 23,769 | -1,281 | 13,67  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 5  | CB  | ILE | K | 5  | 26,579 | -2,844 | 13,786 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 6  | CG1 | ILE | K | 5  | 25,508 | -3,932 | 14,021 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 7  | CG2 | ILE | K | 5  | 27,182 | -2,353 | 15,11  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 8  | CD1 | ILE | K | 5  | 26,069 | -5,224 | 14,594 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 21 | N   | ALA | K | 6  | 25,369 | 0,283  | 14,253 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 22 | CA  | ALA | K | 6  | 24,511 | 1,128  | 15,082 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 23 | C   | ALA | K | 6  | 23,265 | 1,544  | 14,305 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 24 | O   | ALA | K | 6  | 22,147 | 1,344  | 14,761 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 25 | CB  | ALA | K | 6  | 25,244 | 2,356  | 15,619 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 31 | N   | ALA | K | 7  | 23,517 | 2,156  | 13,081 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 32 | CA  | ALA | K | 7  | 22,441 | 2,61   | 12,201 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 33 | C   | ALA | K | 7  | 21,495 | 1,458  | 11,876 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 34 | O   | ALA | K | 7  | 20,285 | 1,619  | 11,95  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 35 | CB  | ALA | K | 7  | 22,963 | 3,241  | 10,913 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 41 | N   | GLY | K | 8  | 22,114 | 0,275  | 11,484 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 42 | CA  | GLY | K | 8  | 21,387 | -0,928 | 11,111 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 43 | C   | GLY | K | 8  | 20,361 | -1,344 | 12,15  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 44 | O   | GLY | K | 8  | 19,223 | -1,636 | 11,812 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 48 | N   | ALA | K | 9  | 20,834 | -1,403 | 13,453 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 49 | CA  | ALA | K | 9  | 19,997 | -1,824 | 14,574 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 50 | C   | ALA | K | 9  | 18,758 | -0,942 | 14,691 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 51 | O   | ALA | K | 9  | 17,646 | -1,449 | 14,766 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 52 | CB  | ALA | K | 9  | 20,76  | -1,855 | 15,898 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 58 | N   | LEU | K | 10 | 18,999 | 0,426  | 14,75  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 59 | CA  | LEU | K | 10 | 17,924 | 1,389  | 15     | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 60 | C   | LEU | K | 10 | 16,887 | 1,33   | 13,879 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 61 | O   | LEU | K | 10 | 15,7   | 1,191  | 14,146 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 62 | CB  | LEU | K | 10 | 18,423 | 2,836  | 15,198 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 63 | CG  | LEU | K | 10 | 18,696 | 3,198  | 16,672 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 64 | CD1 | LEU | K | 10 | 19,859 | 2,414  | 17,278 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 65 | CD2 | LEU | K | 10 | 18,969 | 4,695  | 16,798 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 77 | N   | ILE | K | 11 | 17,378 | 1,5    | 12,587 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 78 | CA  | ILE | K | 11 | 16,48  | 1,562  | 11,429 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 79 | C   | ILE | K | 11 | 15,7   | 0,252  | 11,263 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 80 | O   | ILE | K | 11 | 14,534 | 0,274  | 10,896 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 81 | CB  | ILE | K | 11 | 17,176 | 2,041  | 10,122 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 82 | CG1 | ILE | K | 11 | 16,131 | 2,575  | 9,12   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 83 | CG2 | ILE | K | 11 | 18,055 | 0,966  | 9,473  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 84 | CD1 | ILE | K | 11 | 16,741 | 3,382  | 7,984  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 96 | N   | GLY | K | 12 | 16,41  | -0,914 | 11,531 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 97 | CA  | GLY | K | 12 | 15,813 | -2,237 | 11,499 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |        |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 98  | C   | GLY | K | 12 | 14,611 | -2,303 | 12,416 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 99  | O   | GLY | K | 12 | 13,536 | -2,709 | 12     | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 103 | N   | GLY | K | 13 | 14,846 | -1,88  | 13,717 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 104 | CA  | GLY | K | 13 | 13,807 | -1,823 | 14,732 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 105 | C   | GLY | K | 13 | 12,578 | -1,072 | 14,253 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 106 | O   | GLY | K | 13 | 11,46  | -1,551 | 14,387 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 110 | N   | GLY | K | 14 | 12,838 | 0,172  | 13,697 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 111 | CA  | GLY | K | 14 | 11,798 | 1,03   | 13,153 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 112 | C   | GLY | K | 14 | 10,931 | 0,316  | 12,128 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 113 | O   | GLY | K | 14 | 9,712  | 0,341  | 12,22  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 117 | N   | LEU | K | 15 | 11,635 | -0,303 | 11,102 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 118 | CA  | LEU | K | 15 | 10,993 | -1,025 | 9,999  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 119 | C   | LEU | K | 15 | 10,067 | -2,105 | 10,557 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 120 | O   | LEU | K | 15 | 8,915  | -2,197 | 10,152 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 121 | CB  | LEU | K | 15 | 12,035 | -1,587 | 9,004  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 122 | CG  | LEU | K | 15 | 11,445 | -2,194 | 7,711  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 123 | CD1 | LEU | K | 15 | 12,428 | -2,021 | 6,554  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 124 | CD2 | LEU | K | 15 | 11,123 | -3,683 | 7,861  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 136 |     | ILE | K | 16 | 10,642 | -2,954 | 11,496 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 137 | CA  | ILE | K | 16 | 9,942  | -4,097 | 12,092 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 138 | C   | ILE | K | 16 | 8,626  | -3,603 | 12,7   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 139 | O   | ILE | K | 16 | 7,571  | -4,156 | 12,418 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 140 | CB  | ILE | K | 16 | 10,83  | -4,875 | 13,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 141 | CG1 | ILE | K | 16 | 11,973 | -5,618 | 12,381 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 142 | CG2 | ILE | K | 16 | 10,018 | -5,879 | 13,935 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 143 | CD1 | ILE | K | 16 | 13,148 | -5,927 | 13,297 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 155 | N   | MET | K | 17 | 8,739  | -2,545 | 13,594 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 156 | CA  | MET | K | 17 | 7,591  | -2,019 | 14,334 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 157 | C   | MET | K | 17 | 6,504  | -1,535 | 13,381 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 158 | O   | MET | K | 17 | 5,348  | -1,902 | 13,537 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 159 | CB  | MET | K | 17 | 7,962  | -0,901 | 15,322 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 160 | CG  | MET | K | 17 | 8,601  | -1,47  | 16,585 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 161 | SD  | MET | K | 17 | 8,93   | -0,146 | 17,788 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 162 | CE  | MET | K | 17 | 10,614 | 0,288  | 17,282 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 172 | N   | ALA | K | 18 | 6,911  | -0,636 | 12,403 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 173 | CA  | ALA | K | 18 | 5,964  | 0,011  | 11,493 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 174 | C   | ALA | K | 18 | 5,188  | -1,023 | 10,677 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 175 | O   | ALA | K | 18 | 3,97   | -0,95  | 10,578 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 176 | CB  | ALA | K | 18 | 6,641  | 1,021  | 10,569 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 182 | N   | GLY | K | 19 | 5,967  | -1,991 | 10,054 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 183 | CA  | GLY | K | 19 | 5,408  | -3,043 | 9,218  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 184 | C   | GLY | K | 19 | 4,394  | -3,878 | 9,977  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 185 | O   | GLY | K | 19 | 3,286  | -4,103 | 9,508  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 189 | N   | GLY | K | 20 | 4,848  | -4,359 | 11,197 | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |        |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|--------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 190 | CA  | GLY | K | 20 | 4,021   | -5,15  | 12,09  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 191 | C   | GLY | K | 20 | 2,697   | -4,472 | 12,392 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 192 | O   | GLY | K | 20 | 1,647   | -5,091 | 12,298 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 196 | N   | ALA | K | 21 | 2,806   | -3,152 | 12,809 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 197 | CA  | ALA | K | 21 | 1,667   | -2,358 | 13,263 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 198 | C   | ALA | K | 21 | 0,567   | -2,315 | 12,213 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 199 | O   | ALA | K | 21 | -0,577  | -2,642 | 12,5   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 200 | CB  | ALA | K | 21 | 2,064   | -0,934 | 13,646 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 206 |     | ILE | K | 22 | 0,955   | -1,827 | 10,97  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 207 | CA  | ILE | K | 22 | -0,025  | -1,608 | 9,903  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 208 | C   | ILE | K | 22 | -0,652  | -2,932 | 9,466  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 209 | O   | ILE | K | 22 | -1,843  | -2,981 | 9,19   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 210 | CB  | ILE | K | 22 | 0,469   | -0,726 | 8,719  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 211 | CG1 | ILE | K | 22 | 1,644   | -1,303 | 7,896  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 212 | CG2 | ILE | K | 22 | 0,837   | 0,67   | 9,233  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 213 | CD1 | ILE | K | 22 | 1,194   | -2,103 | 6,683  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 225 | N   | GLY | K | 23 | 0,203   | -4,026 | 9,4    | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 226 | CA  | GLY | K | 23 | -0,258  | -5,356 | 9,039  | 1,00 | 0,00 |   |
| ÁTOMO | 227 | C   | GLY | K | 23 | -1,377  | -5,813 | 9,952  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 228 | O   | GLY | K | 23 | -2,452  | -6,173 | 9,493  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 232 | N   | ALA | K | 24 | -1,053  | -5,787 | 11,302 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 233 | CA  | ALA | K | 24 | -1,98   | -6,184 | 12,36  | 1,00 | 0,00 |   |
| ÁTOMO | 234 | C   | ALA | K | 24 | -3,307  | -5,44  | 12,237 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 235 | O   | ALA | K | 24 | -4,364  | -6,054 | 12,279 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 236 | CB  | ALA | K | 24 | -1,384  | -5,973 | 13,75  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 242 | N   | GLY | K | 25 | -3,208  | -4,059 | 12,109 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 243 | CA  | GLY | K | 25 | -4,364  | -3,177 | 12,068 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 244 | C   | GLY | K | 25 | -5,351  | -3,56  | 10,98  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 245 | O   | GLY | K | 25 | -6,536  | -3,73  | 11,236 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 249 | N   | ILE | K | 26 | -4,796  | -3,657 | 9,709  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 250 | CA  | ILE | K | 26 | -5,591  | -4,032 | 8,536  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 251 | C   | ILE | K | 26 | -6,235  | -5,396 | 8,795  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 252 | O   | ILE | K | 26 | -7,416  | -5,566 | 8,528  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 253 | CB  | ILE | K | 26 | -4,783  | -4     | 7,206  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 254 | CG1 | ILE | K | 26 | -4,292  | -2,579 | 6,838  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 255 | CG2 | ILE | K | 26 | -5,561  | -4,608 | 6,032  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 256 | CD1 | ILE | K | 26 | -5,385  | -1,554 | 6,559  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 268 | N   | GLY | K | 27 | -5,397  | -6,38  | 9,307  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 269 | CA  | GLY | K | 27 | -5,83   | -7,74  | 9,594  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 270 | C   | GLY | K | 27 | -7,112  | -7,787 | 10,405 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 271 | O   | GLY | K | 27 | -8,07   | -8,439 | 10,013 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 275 | N   | ASP | K | 28 | -7,077  | -7,058 | 11,591 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 276 | CA  | ASP | K | 28 | -8,223  | -6,975 | 12,505 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 277 | C   | ASP | K | 28 | -9,482  | -6,599 | 11,738 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 278 | O   | ASP | K | 28 | -10,514 | -7,236 | 11,903 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 279 | CB  | ASP | K | 28 | -8,039  | -5,969  | 13,656 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 280 | CG  | ASP | K | 28 | -7,187  | -6,544  | 14,754 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 281 | OD1 | ASP | K | 28 | -5,972  | -6,441  | 14,829 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 282 | OD2 | ASP | K | 28 | -7,946  | -7,253  | 15,625 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 288 | N   | GLY | K | 29 | -9,359  | -5,492  | 10,907 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 289 | CA  | GLY | K | 29 | -10,461 | -4,983  | 10,114 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 290 | C   | GLY | K | 29 | -11,002 | -6,071  | 9,208  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 291 | O   | GLY | K | 29 | -12,083 | -6,597  | 9,429  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 295 | N   | VAL | K | 30 | -10,178 | -6,399  | 8,143  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 296 | CA  | VAL | K | 30 | -10,67  | -7,186  | 7,009  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 297 | C   | VAL | K | 30 | -11,213 | -8,543  | 7,465  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 298 | O   | VAL | K | 30 | -12,315 | -8,919  | 7,092  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 299 | CB  | VAL | K | 30 | -9,698  | -7,303  | 5,8    | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 300 | CG1 | VAL | K | 30 | -9,406  | -5,926  | 5,198  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 301 | CG2 | VAL | K | 30 | -8,382  | -8,03   | 6,091  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 311 | N   | ALA | K | 31 | -10,37  | -9,299  | 8,271  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 312 | CA  | ALA | K | 31 | -10,706 | -10,667 | 8,665  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 313 | C   | ALA | K | 31 | -11,898 | -10,686 | 9,618  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 314 | O   | ALA | K | 31 | -12,803 | -11,495 | 9,46   | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 315 | CB  | ALA | K | 31 | -9,525  | -11,407 | 9,286  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 321 | N   | GLY | K | 32 | -11,834 | -9,779  | 10,669 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 322 | CA  | GLY | K | 32 | -12,843 | -9,719  | 11,713 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 323 | C   | GLY | K | 32 | -14,212 | -9,398  | 11,15  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 324 | O   | GLY | K | 32 | -15,182 | -10,089 | 11,427 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 328 | N   | ASN | K | 33 | -14,267 | -8,257  | 10,363 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 329 | CA  | ASN | K | 33 | -15,523 | -7,785  | 9,783  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 330 | C   | ASN | K | 33 | -16,1   | -8,775  | 8,775  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 331 | O   | ASN | K | 33 | -17,312 | -8,902  | 8,669  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 332 | CB  | ASN | K | 33 | -15,438 | -6,39   | 9,141  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 333 | CG  | ASN | K | 33 | -15,197 | -5,297  | 10,168 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 334 | OD1 | ASN | K | 33 | -14,133 | -4,701  | 10,251 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 335 | ND2 | ASN | K | 33 | -16,269 | -5,042  | 10,995 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 342 | N   | ALA | K | 34 | -15,199 | -9,465  | 7,974  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 343 | CA  | ALA | K | 34 | -15,658 | -10,508 | 7,052  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 344 | C   | ALA | K | 34 | -16,41  | -11,608 | 7,806  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 345 | O   | ALA | K | 34 | -17,483 | -12,02  | 7,386  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 346 | CB  | ALA | K | 34 | -14,527 | -11,101 | 6,219  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 352 | N   | LEU | K | 35 | -15,783 | -12,094 | 8,95   | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 353 | CA  | LEU | K | 35 | -16,377 | -13,139 | 9,789  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 354 | C   | LEU | K | 35 | -17,768 | -12,695 | 10,244 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 355 | O   | LEU | K | 35 | -18,742 | -13,411 | 10,043 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 356 | CB  | LEU | K | 35 | -15,479 | -13,513 | 10,99  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 357 | CG  | LEU | K | 35 | -16,052 | -14,618 | 11,902 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 358 | CD1 | LEU | K | 35 | -16,009 | -15,99  | 11,23  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 359 | CD2 | LEU | K | 35 | -15,276 | -14,658 | 13,216 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 371 | N   | ILE | K | 36 | -17,815 | -11,478 | 10,924 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 372 | CA  | ILE | K | 36 | -19,036 | -11,013 | 11,585 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 373 | C   | ILE | K | 36 | -20,189 | -10,855 | 10,589 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 374 | O   | ILE | K | 36 | -21,332 | -11,098 | 10,941 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 375 | CB  | ILE | K | 36 | -18,824 | -9,757  | 12,487 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 376 | CG1 | ILE | K | 36 | -19,806 | -9,719  | 13,676 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 377 | CG2 | ILE | K | 36 | -18,929 | -8,435  | 11,725 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 378 | CD1 | ILE | K | 36 | -19,42  | -10,675 | 14,794 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 390 | N   | SER | K | 37 | -19,865 | -10,405 | 9,312  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 391 | CA  | SER | K | 37 | -20,884 | -10,186 | 8,284  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 392 | C   | SER | K | 37 | -21,815 | -11,397 | 8,16   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 393 | O   | SER | K | 37 | -23,023 | -11,239 | 8,041  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 394 | CB  | SER | K | 37 | -20,287 | -9,841  | 6,914  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 395 | OG  | SER | K | 37 | -19,614 | -8,584  | 6,969  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 401 | N   | GLY | K | 38 | -21,186 | -12,637 | 8,153  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 402 | CA  | GLY | K | 38 | -21,939 | -13,876 | 8,213  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 403 | C   | GLY | K | 38 | -22,605 | -14,037 | 9,569  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 404 | O   | GLY | K | 38 | -23,824 | -14,017 | 9,682  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 408 | N   | VAL | K | 39 | -21,718 | -14,263 | 10,616 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 409 | CA  | VAL | K | 39 | -22,168 | -14,679 | 11,946 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 410 | C   | VAL | K | 39 | -22,563 | -13,39  | 12,682 | 1,00 | 0,00 |   |
| ÁTOMO | 411 | O   | VAL | K | 39 | -21,756 | -12,748 | 13,341 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 412 | CB  | VAL | K | 39 | -21,084 | -15,481 | 12,719 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 413 | CG1 | VAL | K | 39 | -21,656 | -16,043 | 14,02  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 414 | CG2 | VAL | K | 39 | -20,526 | -16,646 | 11,894 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 424 | N   | ALA | K | 40 | -23,894 | -13,035 | 12,506 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 425 | CA  | ALA | K | 40 | -24,463 | -11,774 | 13,006 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 426 | C   | ALA | K | 40 | -25,936 | -11,94  | 13,362 | 1,00 | 0,00 |   |
| ÁTOMO | 427 | O   | ALA | K | 40 | -26,358 | -11,554 | 14,443 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 428 | CB  | ALA | K | 40 | -24,298 | -10,61  | 12,033 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 434 | N   | ARG | K | 41 | -26,737 | -12,496 | 12,37  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 435 | CA  | ARG | K | 41 | -28,114 | -12,909 | 12,642 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 436 | C   | ARG | K | 41 | -28,115 | -14,033 | 13,684 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 437 | O   | ARG | K | 41 | -28,983 | -14,075 | 14,545 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 438 | CB  | ARG | K | 41 | -28,899 | -13,343 | 11,39  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 439 | CG  | ARG | K | 41 | -29,26  | -12,176 | 10,458 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 440 | CD  | ARG | K | 41 | -28,242 | -11,958 | 9,338  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 441 | NE  | ARG | K | 41 | -28,568 | -10,728 | 8,596  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 442 | CZ  | ARG | K | 41 | -28,108 | -9,468  | 8,913  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 443 | NH1 | ARG | K | 41 | -27,365 | -9,179  | 10,037 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 444 | NH2 | ARG | K | 41 | -28,387 | -8,41   | 8,087  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 457 | N   | GLN | K | 42 | -27,106 | -14,986 | 13,554 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 458 | CA  | GLN | K | 42 | -26,838 | -15,971 | 14,603 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 459 | C   | GLN | K | 42 | -26,427 | -15,168 | 15,845 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 460 | O   | GLN | K | 42 | -25,66  | -14,219 | 15,736 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 461 | CB  | GLN | K | 42 | -25,692 | -16,926 | 14,241 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 462 | CG  | GLN | K | 42 | -26,038 | -17,841 | 13,067 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 463 | CD  | GLN | K | 42 | -24,858 | -18,734 | 12,753 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 464 | OE1 | GLN | K | 42 | -23,974 | -18,394 | 11,98  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 465 | NE2 | GLN | K | 42 | -24,852 | -19,924 | 13,446 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 474 | N   | PRO | K | 43 | -26,929 | -15,616 | 17,076 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 475 | CA  | PRO | K | 43 | -26,718 | -14,888 | 18,317 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 476 | C   | PRO | K | 43 | -25,257 | -14,537 | 18,565 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 477 | O   | PRO | K | 43 | -24,341 | -15,313 | 18,304 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 478 | CB  | PRO | K | 43 | -27,219 | -15,818 | 19,412 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 479 | CG  | PRO | K | 43 | -28,251 | -16,685 | 18,727 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 480 | CD  | PRO | K | 43 | -27,812 | -16,751 | 17,277 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 488 | N   | GLU | K | 44 | -25,104 | -13,304 | 19,191 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 489 | CA  | GLU | K | 44 | -23,821 | -12,843 | 19,719 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 490 | C   | GLU | K | 44 | -23,618 | -13,555 | 21,061 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 491 | O   | GLU | K | 44 | -23,904 | -13,05  | 22,137 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 492 | CB  | GLU | K | 44 | -23,689 | -11,309 | 19,801 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 493 | CG  | GLU | K | 44 | -24,829 | -10,561 | 20,501 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 494 | CD  | GLU | K | 44 | -24,464 | -9,106  | 20,633 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 495 | OE1 | GLU | K | 44 | -24,639 | -8,26   | 19,768 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 496 | OE2 | GLU | K | 44 | -23,844 | -8,861  | 21,816 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 504 | N   | ALA | K | 45 | -23,108 | -14,832 | 20,905 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 505 | CA  | ALA | K | 45 | -22,829 | -15,746 | 22,006 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 506 | C   | ALA | K | 45 | -21,818 | -16,757 | 21,467 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 507 | O   | ALA | K | 45 | -20,672 | -16,776 | 21,891 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 508 | CB  | ALA | K | 45 | -24,083 | -16,4   | 22,583 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 514 | N   | GLN | K | 46 | -22,284 | -17,575 | 20,441 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 515 | CA  | GLN | K | 46 | -21,387 | -18,407 | 19,636 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 516 | C   | GLN | K | 46 | -20,471 | -17,482 | 18,834 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 517 | O   | GLN | K | 46 | -19,257 | -17,639 | 18,851 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 518 | CB  | GLN | K | 46 | -22,133 | -19,373 | 18,697 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 519 | CG  | GLN | K | 46 | -22,759 | -20,568 | 19,422 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 520 | CD  | GLN | K | 46 | -23,88  | -20,164 | 20,364 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 521 | OE1 | GLN | K | 46 | -24,797 | -19,434 | 20,015 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 522 | NE2 | GLN | K | 46 | -23,776 | -20,701 | 21,628 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 531 | N   | GLY | K | 47 | -21,113 | -16,481 | 18,113 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 532 | CA  | GLY | K | 47 | -20,379 | -15,473 | 17,363 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 533 | C   | GLY | K | 47 | -19,364 | -14,732 | 18,212 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 534 | O   | GLY | K | 47 | -18,227 | -14,543 | 17,801 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 538 | N   | ARG | K | 48 | -19,851 | -14,254 | 19,419 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 539 | CA  | ARG | K | 48 | -19,045 | -13,46  | 20,342 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 540 | C   | ARG | K | 48 | -17,993 | -14,261 | 21,128 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 541 | O   | ARG | K | 48 | -17,214 | -13,663 | 21,854 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 542 | CB  | ARG | K | 48 | -19,954 | -12,677 | 21,313 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 543 | CG  | ARG | K | 48 | -19,359 | -11,324 | 21,726 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 544 | CD  | ARG | K | 48 | -20,308 | -10,519 | 22,607 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 545 | NE  | ARG | K | 48 | -20,356 | -11,117 | 23,953 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 546 | CZ  | ARG | K | 48 | -21,46  | -11,2   | 24,769 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 547 | NH1 | ARG | K | 48 | -22,727 | -10,788 | 24,417 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 548 | NH2 | ARG | K | 48 | -21,325 | -11,724 | 26,032 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 561 | N   | LEU | K | 49 | -17,971 | -15,646 | 20,987 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 562 | CA  | LEU | K | 49 | -16,83  | -16,458 | 21,424 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 563 | C   | LEU | K | 49 | -15,744 | -16,45  | 20,342 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 564 | O   | LEU | K | 49 | -14,582 | -16,192 | 20,63  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 565 | CB  | LEU | K | 49 | -17,252 | -17,894 | 21,798 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 566 | CG  | LEU | K | 49 | -16,109 | -18,79  | 22,321 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 567 | CD1 | LEU | K | 49 | -15,498 | -18,26  | 23,619 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 568 | CD2 | LEU | K | 49 | -16,627 | -20,209 | 22,542 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 580 | N   | PHE | K | 50 | -16,16  | -16,818 | 19,064 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 581 | CA  | PHE | K | 50 | -15,203 | -17,015 | 17,967 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 582 | C   | PHE | K | 50 | -14,483 | -15,701 | 17,636 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 583 | O   | PHE | K | 50 | -13,28  | -15,693 | 17,411 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 584 | CB  | PHE | K | 50 | -15,847 | -17,62  | 16,692 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 585 | CG  | PHE | K | 50 | -15,074 | -18,773 | 16,077 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 586 | CD1 | PHE | K | 50 | -13,675 | -18,707 | 15,835 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 587 | CE1 | PHE | K | 50 | -12,985 | -19,792 | 15,262 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 588 | CZ  | PHE | K | 50 | -13,679 | -20,958 | 14,898 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 589 | CE2 | PHE | K | 50 | -15,066 | -21,038 | 15,111 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 590 | CD2 | PHE | K | 50 | -15,757 | -19,958 | 15,696 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 600 | N   | THR | K | 51 | -15,291 | -14,571 | 17,559 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 601 | CA  | THR | K | 51 | -14,79  | -13,258 | 17,147 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 602 | C   | THR | K | 51 | -13,543 | -12,867 | 17,958 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 603 | O   | THR | K | 51 | -12,534 | -12,554 | 17,343 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 604 | CB  | THR | K | 51 | -15,891 | -12,173 | 17,107 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 605 | OG1 | THR | K | 51 | -16,873 | -12,559 | 16,143 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 606 | CG2 | THR | K | 51 | -15,364 | -10,808 | 16,678 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 614 | N   | PRO | K | 52 | -13,59  | -12,897 | 19,362 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 615 | CA  | PRO | K | 52 | -12,407 | -12,708 | 20,183 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 616 | C   | PRO | K | 52 | -11,143 | -13,421 | 19,738 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 617 | O   | PRO | K | 52 | -10,081 | -12,818 | 19,762 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 618 | CB  | PRO | K | 52 | -12,818 | -13,12  | 21,581 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 619 | CG  | PRO | K | 52 | -14,286 | -12,768 | 21,63  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 620 | CD  | PRO | K | 52 | -14,776 | -12,857 | 20,191 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 628 | N   | PHE | K | 53 | -11,273 | -14,753 | 19,362 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 629 | CA  | PHE | K | 53 | -10,108 | -15,537 | 18,945 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 630 | C   | PHE | K | 53 | -9,437  | -14,85  | 17,749 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 631 | O   | PHE | K | 53 | -8,235  | -14,619 | 17,761 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 632 | CB  | PHE | K | 53 | -10,436 | -17,016 | 18,655 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 633 | CG  | PHE | K | 53 | -9,193  | -17,873 | 18,699 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 634 | CD1 | PHE | K | 53 | -8,387  | -18,048 | 17,547 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 635 | CD2 | PHE | K | 53 | -8,795  | -18,497 | 19,91  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 636 | CE1 | PHE | K | 53 | -7,202  | -18,805 | 17,612 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 637 | CE2 | PHE | K | 53 | -7,613  | -19,261 | 19,968 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 638 | CZ  | PHE | K | 53 | -6,813  | -19,409 | 18,822 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 648 | N   | PHE | K | 54 | -10,273 | -14,535 | 16,683 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 649 | CA  | PHE | K | 54 | -9,772  | -13,883 | 15,468 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 650 | C   | PHE | K | 54 | -9,045  | -12,59  | 15,844 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 651 | O   | PHE | K | 54 | -7,885  | -12,404 | 15,497 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 652 | CB  | PHE | K | 54 | -10,875 | -13,584 | 14,425 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 653 | CG  | PHE | K | 54 | -11,049 | -14,675 | 13,395 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 654 | CD1 | PHE | K | 54 | -10,674 | -14,445 | 12,046 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 655 | CD2 | PHE | K | 54 | -11,619 | -15,927 | 13,735 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 656 | CE1 | PHE | K | 54 | -10,872 | -15,433 | 11,064 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 657 | CE2 | PHE | K | 54 | -11,815 | -16,915 | 12,749 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 658 | CZ  | PHE | K | 54 | -11,446 | -16,668 | 11,415 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 668 | N   | ILE | K | 55 | -9,806  | -11,654 | 16,535 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 669 | CA  | ILE | K | 55 | -9,312  | -10,293 | 16,755 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 670 | C   | ILE | K | 55 | -8,091  | -10,238 | 17,676 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 671 | O   | ILE | K | 55 | -7,254  | -9,365  | 17,494 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 672 | CB  | ILE | K | 55 | -10,389 | -9,246  | 17,158 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 673 | CG1 | ILE | K | 55 | -11,082 | -9,542  | 18,501 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 674 | CG2 | ILE | K | 55 | -11,412 | -9,083  | 16,026 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 675 | CD1 | ILE | K | 55 | -11,891 | -8,371  | 19,037 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 687 | N   | THR | K | 56 | -8,023  | -11,158 | 18,719 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 688 | CA  | THR | K | 56 | -6,895  | -11,169 | 19,652 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 689 | C   | THR | K | 56 | -5,609  | -11,585 | 18,936 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 690 | O   | THR | K | 56 | -4,563  | -11,008 | 19,195 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 691 | CB  | THR | K | 56 | -7,163  | -11,948 | 20,967 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 692 | OG1 | THR | K | 56 | -6,253  | -21,504 | 21,975 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 693 | CG2 | THR | K | 56 | -7,019  | -13,463 | 20,88  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 701 | N   | VAL | K | 57 | -5,703  | -12,634 | 18,023 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 702 | CA  | VAL | K | 57 | -4,544  | -13,065 | 17,229 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 703 | C   | VAL | K | 57 | -4,032  | -11,845 | 16,459 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 704 | O   | VAL | K | 57 | -2,852  | -11,526 | 16,523 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 705 | CB  | VAL | K | 57 | -4,84   | -14,286 | 16,314 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 706 | CG1 | VAL | K | 57 | -3,727  | -14,538 | 15,293 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 707 | CG2 | VAL | K | 57 | -5,023  | -15,555 | 17,15  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 717 | N   | GLY | K | 58 | -4,99   | -11,166 | 15,714 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 718 | CA  | GLY | K | 58 | -4,679  | -9,985  | 14,925 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 719 | C   | GLY | K | 58 | -3,929  | -8,942  | 15,735 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 720 | O   | GLY | K | 58 | -2,85   | -8,511  | 15,357 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 724 | N   | LEU | K | 59 | -4,583  | -8,526  | 16,885 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 725 | CA  | LEU | K | 59 | -4,116  | -7,424  | 17,724 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 726 | C   | LEU | K | 59 | -2,71   | -7,721  | 18,236 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 727 | O   | LEU | K | 59 | -1,8    | -6,932  | 18,027 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 728 | CB  | LEU | K | 59 | -5,098 | -7,132  | 18,879 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 729 | CG  | LEU | K | 59 | -4,681 | -5,985  | 19,821 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 730 | CD1 | LEU | K | 59 | -4,63  | -4,637  | 19,101 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 731 | CD2 | LEU | K | 59 | -5,655 | -5,908  | 20,995 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 743 | N   | VAL | K | 60 | -2,591 | -8,892  | 18,977 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 744 | CA  | VAL | K | 60 | -1,393 | -9,246  | 19,745 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 745 | C   | VAL | K | 60 | -0,188 | -9,558  | 18,832 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 746 | O   | VAL | K | 60 | 0,948  | -9,523  | 19,287 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 747 | CB  | VAL | K | 60 | -1,685 | -10,355 | 20,8   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 748 | CG1 | VAL | K | 60 | -0,456 | -10,725 | 21,631 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 749 | CG2 | VAL | K | 60 | -2,775 | -9,905  | 21,784 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 759 | N   | GLU | K | 61 | -0,455 | -9,815  | 17,489 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 760 | CA  | GLU | K | 61 | 0,601  | -9,873  | 16,474 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 761 | C   | GLU | K | 61 | 1,585  | -8,71   | 16,652 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 762 | O   | GLU | K | 61 | 2,791  | -8,922  | 16,668 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 763 | CB  | GLU | K | 61 | 0,034  | -9,906  | 15,044 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 764 | CG  | GLU | K | 61 | 1,102  | -10,157 | 13,982 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 765 | CD  | GLU | K | 61 | 0,467  | -10,196 | 12,615 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 766 | OE1 | GLU | K | 61 | 0,258  | -9,216  | 11,914 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 767 | OE2 | GLU | K | 61 | 0,092  | -11,457 | 12,285 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 775 | N   | ALA | K | 62 | 1,013  | -7,443  | 16,754 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 776 | CA  | ALA | K | 62 | 1,826  | -6,232  | 16,847 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 777 | C   | ALA | K | 62 | 2,804  | -6,324  | 18,027 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 778 | O   | ALA | K | 62 | 4,001  | -6,269  | 17,784 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 779 | CB  | ALA | K | 62 | 1,015  | -4,938  | 16,813 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 785 | N   | TYR | K | 64 | 4,126  | -8,886  | 19,558 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 786 | CA  | TYR | K | 64 | 5,22   | -9,841  | 19,328 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 787 | C   | TYR | K | 64 | 6,395  | -9,131  | 18,644 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 788 | O   | TYR | K | 64 | 7,533  | -9,237  | 19,085 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 789 | CB  | TYR | K | 64 | 4,841  | -11,101 | 18,517 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 790 | CG  | TYR | K | 64 | 3,724  | -11,949 | 19,079 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 791 | CD1 | TYR | K | 64 | 3,57   | -12,184 | 20,471 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 792 | CD2 | TYR | K | 64 | 2,807  | -12,559 | 18,186 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 793 | CE1 | TYR | K | 64 | 2,502  | -12,959 | 20,955 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 794 | CE2 | TYR | K | 64 | 1,734  | -13,333 | 18,662 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 795 | CZ  | TYR | K | 64 | 1,582  | -13,517 | 20,051 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 796 | OH  | TYR | K | 64 | 0,51   | -14,228 | 20,567 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 806 | N   | PHE | K | 65 | 6,078  | -8,42   | 17,493 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 807 | CA  | PHE | K | 65 | 7,098  | -7,715  | 16,711 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 808 | C   | PHE | K | 65 | 7,688  | -6,509  | 17,443 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 809 | O   | PHE | K | 65 | 8,857  | -6,2    | 17,252 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 810 | CB  | PHE | K | 65 | 6,592  | -7,299  | 15,317 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 811 | CG  | PHE | K | 65 | 6,386  | -8,506  | 14,431 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 812 | CD1 | PHE | K | 65 | 7,499  | -9,252  | 13,959 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 813 | CE1 | PHE | K | 65 | 7,307  | -10,424 | 13,206 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 814 | CZ  | PHE | K | 65 | 6,007  | -10,858 | 12,9   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 815 | CE2 | PHE | K | 65 | 4,898  | -10,111 | 13,33  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 816 | CD2 | PHE | K | 65 | 5,083  | -8,939  | 14,087 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 826 | N   | ILE | K | 66 | 6,836  | -5,797  | 18,28  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 827 | CA  | ILE | K | 66 | 7,311  | -4,68   | 19,108 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 828 | C   | ILE | K | 66 | 8,423  | -5,216  | 20,012 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 829 | O   | ILE | K | 66 | 9,497  | -4,635  | 20,061 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 830 | CB  | ILE | K | 66 | 6,193  | -3,949  | 19,908 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 831 | CG1 | ILE | K | 66 | 5,183  | -3,272  | 18,953 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 832 | CG2 | ILE | K | 66 | 6,784  | -2,897  | 20,856 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 833 | CD1 | ILE | K | 66 | 3,904  | -2,827  | 19,648 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 845 | N   | ASN | K | 67 | 8,12   | -6,351  | 20,758 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 846 | CA  | ASN | K | 67 | 9,084  | -6,98   | 21,666 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 847 | C   | ASN | K | 67 | 10,38  | -7,338  | 20,946 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 848 | O   | ASN | K | 67 | 11,454 | -7,126  | 21,491 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 849 | CB  | ASN | K | 67 | 8,543  | -8,23   | 22,385 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 850 | CG  | ASN | K | 67 | 7,77   | -7,843  | 23,631 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 851 | OD1 | ASN | K | 67 | 6,567  | -7,632  | 23,619 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 852 | ND2 | ASN | K | 67 | 8,555  | -7,711  | 24,756 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 859 | N   | LEU | K | 68 | 10,249 | -7,945  | 19,702 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 860 | CA  | LEU | K | 68 | 11,409 | -8,36   | 18,903 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 861 | C   | LEU | K | 68 | 12,342 | -7,161  | 18,698 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 862 | O   | LEU | K | 68 | 13,529 | -7,233  | 18,988 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 863 | CB  | LEU | K | 68 | 10,985 | -9,036  | 17,579 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 864 | CG  | LEU | K | 68 | 12,09  | -9,878  | 16,906 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 865 | CD1 | LEU | K | 68 | 11,462 | -10,985 | 16,058 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 866 | CD2 | LEU | K | 68 | 13,006 | -9,04   | 16,015 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 878 | N   | ALA | K | 69 | 11,744 | -6,024  | 18,167 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 879 | CA  | ALA | K | 69 | 12,484 | -4,781  | 17,934 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 880 | C   | ALA | K | 69 | 13,125 | -4,241  | 19,216 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 881 | O   | ALA | K | 69 | 14,252 | -3,764  | 19,191 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 882 | CB  | ALA | K | 69 | 11,606 | -3,701  | 17,312 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 888 | N   | PHE | K | 70 | 12,328 | -4,3    | 20,354 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 889 | CA  | PHE | K | 70 | 12,764 | -3,853  | 21,679 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 890 | C   | PHE | K | 70 | 14,099 | -4,515  | 22,02  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 891 | O   | PHE | K | 70 | 15,029 | -3,848  | 22,445 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 892 | CB  | PHE | K | 70 | 11,724 | -4,153  | 22,791 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 893 | CG  | PHE | K | 70 | 11,511 | -3,023  | 23,769 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 894 | CD1 | PHE | K | 70 | 10,227 | -2,434  | 23,901 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 895 | CE1 | PHE | K | 70 | 10,001 | -1,403  | 24,831 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 896 | CZ  | PHE | K | 70 | 11,054 | -0,936  | 25,635 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 897 | CE2 | PHE | K | 70 | 12,332 | -1,512  | 25,521 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 898 | CD2 | PHE | K | 70 | 12,559 | -2,555  | 24,602 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 908 | N   | MET | K | 71 | 14,144 | -5,895  | 21,855 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 909 | CA  | MET | K | 71 | 15,311 | -6,702  | 22,213 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 6 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 910 | C   | MET | K | 71 | 16,54  | -6,268  | 21,42  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 911 | O   | MET | K | 71 | 17,617 | -6,161  | 21,989 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 912 | CB  | MET | K | 71 | 15,074 | -8,211  | 22,043 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 913 | CG  | MET | K | 71 | 14,1   | -8,744  | 23,094 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 914 | SD  | MET | K | 71 | 13,617 | -10,446 | 22,689 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 915 | CE  | MET | K | 71 | 12,287 | -10,632 | 23,901 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 925 | N   | ALA | K | 72 | 16,354 | -6,05   | 20,057 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 926 | CA  | ALA | K | 72 | 17,447 | -5,605  | 19,185 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 927 | C   | ALA | K | 72 | 18,091 | -4,323  | 19,72  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 928 | O   | ALA | K | 72 | 19,307 | -4,229  | 19,831 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 929 | CB  | ALA | K | 72 | 17,003 | -5,411  | 17,736 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 935 | N   | LEU | K | 73 | 17,199 | -3,304  | 20,035 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 936 | CA  | LEU | K | 73 | 17,624 | -2,018  | 20,597 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 937 | C   | LEU | K | 73 | 18,403 | -2,272  | 21,888 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 938 | O   | LEU | K | 73 | 19,485 | -1,735  | 22,075 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 939 | CB  | LEU | K | 73 | 16,417 | -1,069  | 20,8   | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 940 | CG  | LEU | K | 73 | 16,695 | 0,393   | 21,215 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 941 | CD1 | LEU | K | 73 | 17,026 | 0,557   | 22,699 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 942 | CD2 | LEU | K | 73 | 17,744 | 1,075   | 20,34  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 954 | N   | PHE | K | 74 | 17,774 | -3,097  | 22,81  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 955 | CA  | PHE | K | 74 | 18,26  | -3,297  | 24,171 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 956 | C   | PHE | K | 74 | 19,694 | -3,832  | 24,176 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 957 | O   | PHE | K | 74 | 20,534 | -3,302  | 24,891 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 958 | CB  | PHE | K | 74 | 17,307 | -4,194  | 24,987 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 959 | CG  | PHE | K | 74 | 17,521 | -4,114  | 26,478 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 960 | CD1 | PHE | K | 74 | 17,967 | -5,242  | 27,209 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 961 | CE1 | PHE | K | 74 | 18,105 | -5,172  | 28,609 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 962 | CZ  | PHE | K | 74 | 17,815 | -3,979  | 29,293 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 963 | CE2 | PHE | K | 74 | 17,377 | -2,851  | 28,579 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 964 | CD2 | PHE | K | 74 | 17,224 | -2,918  | 27,182 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 974 | N   | VAL | K | 75 | 19,946 | -4,946  | 23,371 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 975 | CA  | VAL | K | 75 | 21,272 | -5,585  | 23,333 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 976 | C   | VAL | K | 75 | 22,348 | -4,601  | 22,861 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 977 | O   | VAL | K | 75 | 23,447 | -4,59   | 23,401 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 978 | CB  | VAL | K | 75 | 21,372 | -6,94   | 22,573 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 979 | CG1 | VAL | K | 75 | 20,544 | -8,024  | 23,262 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 980 | CG2 | VAL | K | 75 | 21,017 | -6,882  | 21,086 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 990 | N   | PHE | K | 76 | 21,997 | -3,787  | 21,789 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 991 | CA  | PHE | K | 76 | 22,881 | -2,742  | 21,272 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 992 | C   | PHE | K | 76 | 23,25  | -1,789  | 22,416 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 993 | O   | PHE | K | 76 | 24,423 | -1,544  | 22,664 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 994 | CB  | PHE | K | 76 | 22,268 | -2,031  | 20,042 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 995 | CG  | PHE | K | 76 | 22,877 | -0,685  | 19,729 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 996 | CD1 | PHE | K | 76 | 22,154 | 0,501   | 20,013 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 997 | CD2 | PHE | K | 76 | 24,174 | -0,578  | 19,171 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 6 (continuación)**

|       |      |     |     |   |    |        |        |        |      |      |   |
|-------|------|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 998  | CE1 | PHE | K | 76 | 22,718 | 1,764  | 19,756 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 999  | CE2 | PHE | K | 76 | 24,736 | 0,689  | 18,92  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1000 | CZ  | PHE | K | 76 | 24,01  | 1,858  | 19,211 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1010 | N   | ALA | K | 77 | 22,172 | -1,217 | 23,081 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 1011 | CA  | ALA | K | 77 | 22,328 | -0,136 | 24,048 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1012 | C   | ALA | K | 77 | 23,234 | -0,547 | 25,206 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1013 | O   | ALA | K | 77 | 24,165 | 0,171  | 25,545 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 1014 | CB  | ALA | K | 77 | 20,987 | 0,377  | 24,569 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1020 | N   | THR | K | 78 | 22,88  | -1,727 | 25,855 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 1021 | CA  | THR | K | 78 | 23,625 | -2,223 | 27,009 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1022 | C   | THR | K | 78 | 24,987 | -2,674 | 26,515 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1023 | O   | THR | K | 78 | 25,974 | -2,7   | 27,236 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 1024 | CB  | THR | K | 78 | 22,881 | -3,339 | 27,78  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1025 | OG1 | THR | K | 78 | 23,43  | -3,473 | 29,094 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 1026 | CG2 | THR | K | 78 | 22,894 | -4,71  | 27,107 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1035 | N   | PRO | K | 63 | 2,314  | -6,507 | 19,331 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 1036 | CA  | PRO | K | 63 | 3,18   | -6,771 | 20,468 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1038 | C   | PRO | K | 63 | 4,349  | -7,725 | 20,289 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1039 | O   | PRO | K | 63 | 5,423  | -7,445 | 20,802 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 1040 | CB  | PRO | K | 63 | 2,244  | -7,213 | 21,576 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1043 | CG  | PRO | K | 63 | 0,981  | -6,425 | 21,298 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 1046 | CD  | PRO | K | 63 | 0,977  | -6,194 | 19,795 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 7**

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 1  | N   | ILE | K | 5  | 28,121 | -7,663  | 2,389  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 2  | CA  | ILE | K | 5  | 27,537 | -8,933  | 2,847  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 3  | C   | ILE | K | 5  | 26,933 | -8,728  | 4,240  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 4  | O   | ILE | K | 5  | 25,896 | -9,292  | 4,558  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 5  | CB  | ILE | K | 5  | 28,544 | -10,118 | 2,780  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 6  | CG1 | ILE | K | 5  | 27,845 | -11,446 | 3,142  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 7  | CG2 | ILE | K | 5  | 29,809 | -9,894  | 3,618  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 8  | CD1 | ILE | K | 5  | 28,630 | -12,682 | 2,730  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 9  | N   | ALA | K | 6  | 27,652 | -7,885  | 5,078  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 10 | CA  | ALA | K | 6  | 27,188 | -7,544  | 6,421  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 11 | C   | ALA | K | 6  | 25,850 | -6,821  | 6,317  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 12 | O   | ALA | K | 6  | 24,876 | -7,223  | 6,940  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 13 | CB  | ALA | K | 6  | 28,205 | -6,721  | 7,207  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 14 | N   | ALA | K | 7  | 25,842 | -5,715  | 5,472  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 15 | CA  | ALA | K | 7  | 24,627 | -4,946  | 5,207  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 16 | C   | ALA | K | 7  | 23,504 | -5,870  | 4,742  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 17 | O   | ALA | K | 7  | 22,387 | -5,777  | 5,234  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 18 | CB  | ALA | K | 7  | 24,850 | -3,832  | 4,187  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 19 | N   | GLY | K | 8  | 23,861 | -6,771  | 3,743  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 20 | CA  | GLY | K | 8  | 22,942 | -7,733  | 3,159  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 21 | C   | GLY | K | 8  | 22,190 | -8,547  | 4,197  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 22 | O   | GLY | K | 8  | 20,981 | -8,701  | 4,105  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 23 | N   | ALA | K | 9  | 22,983 | -9,120  | 5,181  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 24 | CA  | ALA | K | 9  | 22,435 | -9,985  | 6,224  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 25 | C   | ALA | K | 9  | 21,368 | -9,263  | 7,040  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 26 | O   | ALA | K | 9  | 20,289 | -9,802  | 7,254  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 27 | CB  | ALA | K | 9  | 23,515 | -10,557 | 7,140  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 28 | N   | LEU | K | 10 | 21,734 | -8,017  | 7,538  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 29 | CA  | LEU | K | 10 | 20,857 | -7,260  | 8,435  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 30 | C   | LEU | K | 10 | 19,538 | -6,964  | 7,722  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 31 | O   | LEU | K | 10 | 18,472 | -7,283  | 8,235  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 32 | CB  | LEU | K | 10 | 21,475 | -5,951  | 8,973  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 33 | CG  | LEU | K | 10 | 22,328 | -6,133  | 10,246 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 34 | CD1 | LEU | K | 10 | 23,675 | -6,796  | 9,973  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 35 | CD2 | LEU | K | 10 | 22,563 | -4,777  | 10,912 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 36 | N   | ILE | K | 11 | 19,650 | -6,281  | 6,514  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 37 | CA  | ILE | K | 11 | 18,467 | -5,824  | 5,777  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 38 | C   | ILE | K | 11 | 17,578 | -7,005  | 5,372  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 39 | O   | ILE | K | 11 | 16,360 | -6,901  | 5,425  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 40 | CB  | ILE | K | 11 | 18,795 | -4,856  | 4,606  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 41 | CG1 | ILE | K | 11 | 17,524 | -4,109  | 4,147  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 42 | CG2 | ILE | K | 11 | 19,480 | -5,544  | 3,421  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 43 | CD1 | ILE | K | 11 | 17,822 | -2,876  | 3,306  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 44 | N   | GLY | K | 12 | 18,241 | -8,146  | 4,933  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 45 | CA  | GLY | K | 12 | 17,555 | -9,364  | 4,535  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |    |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 46 | C   | GLY | K | 12 | 16,642 | -9,865  | 5,635  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 47 | O   | GLY | K | 12 | 15,472 | -10,131 | 5,399  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 48 | N   | GLY | K | 13 | 17,246 | -10,004 | 6,877  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 49 | CA  | GLY | K | 13 | 16,527 | -10,463 | 8,054  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 50 | C   | GLY | K | 13 | 15,268 | -9,650  | 8,300  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 51 | O   | GLY | K | 13 | 14,189 | -10,202 | 8,473  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 52 | N   | GLY | K | 14 | 15,468 | -8,276  | 8,332  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 53 | CA  | GLY | K | 14 | 14,388 | -7,324  | 8,544  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 54 | C   | GLY | K | 14 | 13,234 | -7,535  | 7,579  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 55 | O   | GLY | K | 14 | 12,086 | -7,620  | 7,992  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 56 | N   | LEU | K | 15 | 13,605 | -7,585  | 6,240  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 57 | CA  | LEU | K | 15 | 12,661 | -7,745  | 5,129  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 58 | C   | LEU | K | 15 | 11,777 | -8,963  | 5,401  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 59 | O   | LEU | K | 15 | 10,558 | -8,853  | 5,398  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 60 | CB  | LEU | K | 15 | 13,400 | -7,824  | 3,771  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 61 | CG  | LEU | K | 15 | 12,529 | -7,641  | 2,510  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 62 | CD1 | LEU | K | 15 | 13,428 | -7,309  | 1,318  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 63 | CD2 | LEU | K | 15 | 11,700 | -8,879  | 2,169  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 64 | N   | ILE | K | 16 | 12,463 | -10,153 | 5,628  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 65 | CA  | ILE | K | 16 | 11,799 | -11,454 | 5,776  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 66 | C   | ILE | K | 16 | 10,735 | -11,338 | 6,868  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 67 | O   | ILE | K | 16 | 9,582  | -11,680 | 6,643  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 68 | CB  | ILE | K | 16 | 12,803 | -12,619 | 6,039  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 69 | CG1 | ILE | K | 16 | 13,659 | -12,895 | 4,782  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 70 | CG2 | ILE | K | 16 | 12,086 | -13,909 | 6,458  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 71 | CD1 | ILE | K | 16 | 14,930 | -13,674 | 5,089  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 72 | N   | MET | K | 17 | 11,186 | -10,883 | 8,101  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 73 | CA  | MET | K | 17 | 10,325 | -10,873 | 9,285  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 74 | C   | MET | K | 17 | 9,112  | -9,969  | 9,083  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 75 | O   | MET | K | 17 | 7,992  | -10,376 | 9,358  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 76 | CB  | MET | K | 17 | 11,072 | -10,480 | 10,569 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 77 | CG  | MET | K | 17 | 11,965 | -11,617 | 11,063 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 78 | SD  | MET | K | 17 | 12,781 | -11,152 | 12,622 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 79 | CE  | MET | K | 17 | 14,229 | -10,299 | 11,947 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 80 | N   | ALA | K | 18 | 9,381  | -8,681  | 8,641  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 81 | CA  | ALA | K | 18 | 8,335  | -7,661  | 8,530  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 82 | C   | ALA | K | 18 | 7,251  | -8,073  | 7,536  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 83 | O   | ALA | K | 18 | 6,066  | -7,978  | 7,829  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 84 | CB  | ALA | K | 18 | 8,898  | -6,297  | 8,153  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 85 | N   | GLY | K | 19 | 7,717  | -8,515  | 6,304  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 86 | CA  | GLY | K | 19 | 6,829  | -9,005  | 5,260  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 87 | C   | GLY | K | 19 | 5,987  | -10,160 | 5,767  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 88 | O   | GLY | K | 19 | 4,781  | -10,204 | 5,565  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 89 | N   | GLY | K | 20 | 6,707  | -11,134 | 6,437  | 1,00 | 0,00 | N |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 90  | CA  | GLY | K | 20 | 6,099  | -12,302 | 7,039  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 91  | C   | GLY | K | 20 | 4,913  | -11,965 | 7,916  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 92  | O   | GLY | K | 20 | 3,864  | -12,584 | 7,803  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 93  | N   | ALA | K | 21 | 5,151  | -10,963 | 8,844  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 94  | CA  | ALA | K | 21 | 4,174  | -10,565 | 9,849  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 95  | C   | ALA | K | 21 | 2,837  | -10,204 | 9,219  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 96  | O   | ALA | K | 21 | 1,807  | -10,745 | 9,602  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 97  | CB  | ALA | K | 21 | 4,669  | -9,411  | 10,713 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 98  | N   | ILE | K | 22 | 2,887  | -9,210  | 8,246  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 99  | CA  | ILE | K | 22 | 1,657  | -8,691  | 7,639  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 100 | C   | ILE | K | 22 | 0,932  | -9,798  | 6,872  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 101 | O   | ILE | K | 22 | -0,288 | -9,878  | 6,917  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 102 | CB  | ILE | K | 22 | 1,811  | -7,360  | 6,845  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 103 | CG1 | ILE | K | 22 | 2,660  | -7,427  | 5,557  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 104 | CG2 | ILE | K | 22 | 2,377  | -6,274  | 7,765  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 105 | CD1 | ILE | K | 22 | 1,848  | -7,745  | 4,310  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 106 | N   | GLY | K | 23 | 1,741  | -10,663 | 6,142  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 107 | CA  | GLY | K | 23 | 1,204  | -11,765 | 5,363  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 108 | C   | GLY | K | 23 | 0,376  | -12,709 | 6,211  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 109 | O   | GLY | K | 23 | -0,767 | -13,004 | 5,889  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 110 | N   | ALA | K | 24 | 1,042  | -13,206 | 7,322  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 111 | CA  | ALA | K | 24 | 0,432  | -14,149 | 8,256  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 112 | C   | ALA | K | 24 | -0,867 | -13,592 | 8,834  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 113 | O   | ALA | K | 24 | -1,841 | -14,320 | 8,961  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 114 | CB  | ALA | K | 24 | 1,385  | -14,552 | 9,378  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 115 | N   | GLY | K | 25 | -0,837 | -12,253 | 9,209  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 116 | CA  | GLY | K | 25 | -1,989 | -11,554 | 9,762  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 117 | C   | GLY | K | 25 | -3,224 | -11,712 | 8,896  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 118 | O   | GLY | K | 25 | -4,270 | -12,142 | 9,367  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 119 | N   | ILE | K | 26 | -3,049 | -11,314 | 7,575  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 120 | CA  | ILE | K | 26 | -4,123 | -11,406 | 6,580  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 121 | C   | ILE | K | 26 | -4,608 | -12,856 | 6,541  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 122 | O   | ILE | K | 26 | -5,800 | -13,101 | 6,670  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 123 | CB  | ILE | K | 26 | -3,723 | -10,885 | 5,167  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 124 | CG1 | ILE | K | 26 | -3,329 | -9,390  | 5,154  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 125 | CG2 | ILE | K | 26 | -4,818 | -11,147 | 4,125  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 126 | CD1 | ILE | K | 26 | -4,410 | -8,423  | 5,617  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 127 | N   | GLY | K | 27 | -3,622 | -13,815 | 6,331  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 128 | CA  | GLY | K | 27 | -3,902 | -15,227 | 6,118  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 129 | C   | GLY | K | 27 | -4,862 | -15,800 | 7,143  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 130 | O   | GLY | K | 27 | -5,885 | -16,369 | 6,784  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 131 | N   | ASP | K | 28 | -4,461 | -15,632 | 8,465  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 132 | CA  | ASP | K | 28 | -5,235 | -16,133 | 9,607  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 133 | C   | ASP | K | 28 | -6,691 | -15,707 | 9,464  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 134 | O   | ASP | K | 28 | -7,587 | -16,541 | 9,509  | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 135 | CB  | ASP | K | 28 | -4,707  | -15,657 | 10,975 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 136 | CG  | ASP | K | 28 | -3,539  | -16,488 | 11,442 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 137 | OD1 | ASP | K | 28 | -2,373  | -16,308 | 11,122 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 138 | OD2 | ASP | K | 28 | -3,957  | -17,506 | 12,234 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 139 | N   | GLY | K | 29 | -6,886  | -14,338 | 9,315  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 140 | CA  | GLY | K | 29 | -8,205  | -13,736 | 9,279  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 141 | C   | GLY | K | 29 | -9,036  | -14,339 | 8,166  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 142 | O   | GLY | K | 29 | -10,008 | -15,041 | 8,410  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 143 | N   | VAL | K | 30 | -8,603  | -14,009 | 6,889  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 144 | CA  | VAL | K | 30 | -9,444  | -14,243 | 5,714  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 145 | C   | VAL | K | 30 | -9,809  | -15,722 | 5,590  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 146 | O   | VAL | K | 30 | -10,974 | -16,055 | 5,423  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 147 | CB  | VAL | K | 30 | -8,921  | -13,639 | 4,378  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 148 | CG1 | VAL | K | 30 | -8,803  | -12,116 | 4,474  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 149 | CG2 | VAL | K | 30 | -7,604  | -14,230 | 3,864  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 150 | N   | ALA | K | 31 | -8,745  | -16,616 | 5,628  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 151 | CA  | ALA | K | 31 | -8,927  | -18,027 | 5,299  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 152 | C   | ALA | K | 31 | -9,775  | -18,719 | 6,360  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 153 | O   | ALA | K | 31 | -10,740 | -19,402 | 6,043  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 154 | CB  | ALA | K | 31 | -7,605  | -18,761 | 5,097  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 155 | N   | GLY | K | 32 | -9,344  | -18,541 | 7,669  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 156 | CA  | GLY | K | 32 | -9,973  | -19,223 | 8,786  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 157 | C   | GLY | K | 32 | -11,448 | -18,886 | 8,852  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 158 | O   | GLY | K | 32 | -12,311 | -19,748 | 8,739  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 159 | N   | ASN | K | 33 | -11,697 | -17,540 | 9,067  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 160 | CA  | ASN | K | 33 | -13,041 | -17,042 | 9,353  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 161 | C   | ASN | K | 33 | -14,030 | -17,338 | 8,237  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 162 | O   | ASN | K | 33 | -15,195 | -17,586 | 8,518  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 163 | CB  | ASN | K | 33 | -13,082 | -15,548 | 9,682  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 164 | CG  | ASN | K | 33 | -12,429 | -15,313 | 11,027 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 165 | OD1 | ASN | K | 33 | -11,228 | -15,123 | 11,150 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 166 | ND2 | ASN | K | 33 | -13,304 | -15,391 | 12,084 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 167 | N   | ALA | K | 34 | -13,550 | -17,251 | 6,936  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 168 | CA  | ALA | K | 34 | -14,421 | -17,507 | 5,790  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 169 | C   | ALA | K | 34 | -15,122 | -18,859 | 5,907  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 170 | O   | ALA | K | 34 | -16,319 | -18,947 | 5,666  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 171 | CB  | ALA | K | 34 | -13,694 | -17,415 | 4,452  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 172 | N   | LEU | K | 35 | -14,314 | -19,944 | 6,241  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 173 | CA  | LEU | K | 35 | -14,846 | -21,307 | 6,228  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 174 | C   | LEU | K | 35 | -15,971 | -21,436 | 7,251  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 175 | O   | LEU | K | 35 | -17,069 | -21,845 | 6,903  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 176 | CB  | LEU | K | 35 | -13,772 | -22,394 | 6,421  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 177 | CG  | LEU | K | 35 | -14,300 | -23,840 | 6,297  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 178 | CD1 | LEU | K | 35 | -15,047 | -24,085 | 4,985  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 179 | CD2 | LEU | K | 35 | -13,141 | -24,824 | 6,390  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 180 | N   | ILE | K | 36 | -15,638 | -21,099 | 8,558  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 181 | CA  | ILE | K | 36 | -16,600 | -21,255 | 9,659  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 182 | C   | ILE | K | 36 | -17,882 | -20,429 | 9,441  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 183 | O   | ILE | K | 36 | -18,949 | -20,824 | 9,886  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 184 | CB  | ILE | K | 36 | -15,962 | -21,030 | 11,062 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 185 | CG1 | ILE | K | 36 | -16,871 | -21,445 | 12,238 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 186 | CG2 | ILE | K | 36 | -15,510 | -19,587 | 11,273 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 187 | CD1 | ILE | K | 36 | -17,169 | -22,935 | 12,277 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 188 | N   | SER | K | 37 | -17,738 | -19,213 | 8,783  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 189 | CA  | SER | K | 37 | -18,885 | -18,361 | 8,470  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 190 | C   | SER | K | 37 | -19,842 | -19,064 | 7,503  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 191 | O   | SER | K | 37 | -21,048 | -19,060 | 7,714  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 192 | CB  | SER | K | 37 | -18,468 | -16,998 | 7,904  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 193 | OG  | SER | K | 37 | -17,726 | -16,273 | 8,882  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 194 | N   | GLY | K | 38 | -19,250 | -19,608 | 6,368  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 195 | CA  | GLY | K | 38 | -20,018 | -20,200 | 5,286  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 196 | C   | GLY | K | 38 | -20,674 | -21,495 | 5,719  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 197 | O   | GLY | K | 38 | -21,892 | -21,595 | 5,801  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 198 | N   | VAL | K | 39 | -19,771 | -22,524 | 5,962  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 199 | CA  | VAL | K | 39 | -20,202 | -23,854 | 6,388  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 200 | C   | VAL | K | 39 | -20,585 | -23,634 | 7,851  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 201 | O   | VAL | K | 39 | -19,755 | -23,371 | 8,710  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 202 | CB  | VAL | K | 39 | -19,109 | -24,938 | 6,216  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 203 | CG1 | VAL | K | 39 | -19,600 | -26,295 | 6,726  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 204 | CG2 | VAL | K | 39 | -18,706 | -25,084 | 4,746  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 205 | N   | ALA | K | 40 | -21,950 | -23,720 | 8,052  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 206 | CA  | ALA | K | 40 | -22,661 | -23,216 | 9,225  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 207 | C   | ALA | K | 40 | -24,147 | -23,511 | 9,031  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 208 | O   | ALA | K | 40 | -24,767 | -24,137 | 9,880  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 209 | CB  | ALA | K | 40 | -22,458 | -21,723 | 9,480  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 210 | N   | ARG | K | 41 | -24,700 | -23,008 | 7,852  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 211 | CA  | ARG | K | 41 | -26,085 | -23,274 | 7,460  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 212 | C   | ARG | K | 41 | -26,211 | -24,778 | 7,215  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 213 | O   | ARG | K | 41 | -27,000 | -25,451 | 7,864  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 214 | CB  | ARG | K | 41 | -26,570 | -22,473 | 6,234  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 215 | CG  | ARG | K | 41 | -26,713 | -20,966 | 6,485  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 216 | CD  | ARG | K | 41 | -25,452 | -20,174 | 6,135  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 217 | NE  | ARG | K | 41 | -25,678 | -18,741 | 6,386  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 218 | CZ  | ARG | K | 41 | -25,452 | -18,101 | 7,583  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 219 | NH1 | ARG | K | 41 | -25,060 | -18,741 | 8,738  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 220 | NH2 | ARG | K | 41 | -25,621 | -16,742 | 7,672  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 221 | N   | GLN | K | 42 | -25,370 | -25,293 | 6,231  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 222 | CA  | GLN | K | 42 | -25,068 | -26,723 | 6,170  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 223 | C   | GLN | K | 42 | -24,106 | -26,908 | 7,346  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 224 | O   | GLN | K | 42 | -23,120 | -26,187 | 7,425  | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 225 | CB  | GLN | K | 42 | -24,378 | -27,132 | 4,861  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 226 | CG  | GLN | K | 42 | -25,309 | -26,988 | 3,656  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 227 | CD  | GLN | K | 42 | -24,569 | -27,351 | 2,387  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 228 | OE1 | GLN | K | 42 | -23,890 | -26,535 | 1,781  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 229 | NE2 | GLN | K | 42 | -24,697 | -28,671 | 2,018  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 230 | N   | PRO | K | 43 | -24,423 | -27,890 | 8,291  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 231 | CA  | PRO | K | 43 | -23,884 | -27,878 | 9,642  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 232 | C   | PRO | K | 43 | -22,377 | -27,648 | 9,717  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 233 | O   | PRO | K | 43 | -21,587 | -28,264 | 9,010  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 234 | CB  | PRO | K | 43 | -24,244 | -29,240 | 10,215 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 235 | CG  | PRO | K | 43 | -25,513 | -29,627 | 9,485  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 236 | CD  | PRO | K | 43 | -25,436 | -28,920 | 8,145  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 237 | N   | GLU | K | 44 | -22,018 | -26,729 | 10,698 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 238 | CA  | GLU | K | 44 | -20,630 | -26,532 | 11,109 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 239 | C   | GLU | K | 44 | -20,263 | -27,787 | 11,901 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 240 | O   | GLU | K | 44 | -20,648 | -27,973 | 13,047 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 241 | CB  | GLU | K | 44 | -20,357 | -25,222 | 11,885 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 242 | CG  | GLU | K | 44 | -21,282 | -24,897 | 13,065 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 243 | CD  | GLU | K | 44 | -20,874 | -23,584 | 13,689 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 244 | OE1 | GLU | K | 44 | -21,169 | -22,482 | 13,249 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 245 | OE2 | GLU | K | 44 | -20,084 | -23,772 | 14,778 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 246 | N   | ALA | K | 45 | -19,503 | -28,690 | 11,171 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 247 | CA  | ALA | K | 45 | -19,111 | -29,993 | 11,700 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 248 | C   | ALA | K | 45 | -17,820 | -30,392 | 10,992 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 249 | O   | ALA | K | 45 | -16,751 | -30,343 | 11,586 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 250 | CB  | ALA | K | 45 | -20,221 | -31,038 | 11,595 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 251 | N   | GLN | K | 46 | -17,945 | -30,742 | 9,651  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 252 | CA  | GLN | K | 46 | -16,777 | -31,025 | 8,812  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 253 | C   | GLN | K | 46 | -15,948 | -29,747 | 8,696  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 254 | O   | GLN | K | 46 | -14,745 | -29,762 | 8,923  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 255 | CB  | GLN | K | 46 | -17,123 | -31,555 | 7,408  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 256 | CG  | GLN | K | 46 | -17,621 | -33,004 | 7,392  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 257 | CD  | GLN | K | 46 | -19,006 | -33,186 | 7,986  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 258 | OE1 | GLN | K | 46 | -19,859 | -32,308 | 7,971  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 259 | NE2 | GLN | K | 46 | -19,226 | -34,446 | 8,491  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 260 | N   | GLY | K | 47 | -16,657 | -28,614 | 8,311  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 261 | CA  | GLY | K | 47 | -16,039 | -27,303 | 8,201  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 262 | C   | GLY | K | 47 | -15,338 | -26,879 | 9,479  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 263 | O   | GLY | K | 47 | -14,240 | -26,342 | 9,441  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 264 | N   | ARG | K | 48 | -16,061 | -27,090 | 10,644 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 265 | CA  | ARG | K | 48 | -15,555 | -26,706 | 11,960 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 266 | C   | ARG | K | 48 | -14,231 | -27,405 | 12,262 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 267 | O   | ARG | K | 48 | -13,287 | -26,756 | 12,689 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 268 | CB  | ARG | K | 48 | -16,597 | -26,944 | 13,061 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 269 | CG  | ARG | K | 48 | -16,186 | -26,354 | 14,413 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |         |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|---------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 270 | CD  | ARG | K | 48 | -17,369 | -26,238 | 15,367 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 271 | NE  | ARG | K | 48 | -17,915 | -27,575 | 15,655 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 272 | CZ  | ARG | K | 48 | -19,183 | -27,822 | 16,126 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 273 | NH1 | ARG | K | 48 | -20,102 | -26,840 | 16,422 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 274 | NH2 | ARG | K | 48 | -19,592 | -29,116 | 16,330 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 275 | N   | LEU | K | 49 | -14,204 | -28,779 | 12,049 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 276 | CA  | LEU | K | 49 | -13,005 | -29,597 | 12,271 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 277 | C   | LEU | K | 49 | -11,827 | -29,081 | 11,437 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 278 | O   | LEU | K | 49 | -10,702 | -29,027 | 11,916 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 279 | CB  | LEU | K | 49 | -13,275 | -31,090 | 11,982 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 280 | CG  | LEU | K | 49 | -12,083 | -32,036 | 12,236 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 281 | CD1 | LEU | K | 49 | -11,677 | -32,080 | 13,709 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 282 | CD2 | LEU | K | 49 | -12,425 | -33,444 | 11,754 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 283 | N   | PHE | K | 50 | -12,130 | -28,759 | 10,121 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 284 | CA  | PHE | K | 50 | -11,132 | -28,301 | 9,155  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 285 | C   | PHE | K | 50 | -10,455 | -27,011 | 9,641  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 286 | O   | PHE | K | 50 | -9,236  | -26,909 | 9,608  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 287 | CB  | PHE | K | 50 | -11,767 | -28,116 | 7,763  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 288 | CG  | PHE | K | 50 | -10,777 | -28,053 | 6,628  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 289 | CD1 | PHE | K | 50 | -10,020 | -26,882 | 6,371  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 290 | CE1 | PHE | K | 50 | -9,135  | -26,833 | 5,279  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 291 | CZ  | PHE | K | 50 | -9,016  | -27,936 | 4,421  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 292 | CE2 | PHE | K | 50 | -9,753  | -29,103 | 4,664  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 293 | CD2 | PHE | K | 50 | -10,628 | -29,162 | 5,761  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 294 | N   | THR | K | 51 | -11,316 | -25,991 | 10,042 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 295 | CA  | THR | K | 51 | -10,914 | -24,586 | 10,190 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 296 | C   | THR | K | 51 | -9,594  | -24,387 | 10,960 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 297 | O   | THR | K | 51 | -8,750  | -23,638 | 10,482 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 298 | CB  | THR | K | 51 | -12,056 | -23,684 | 10,725 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 299 | OG1 | THR | K | 51 | -13,156 | -23,711 | 9,813  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 300 | CG2 | THR | K | 51 | -11,641 | -22,223 | 10,839 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 301 | N   | PRO | K | 52 | -9,405  | -25,041 | 12,190 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 302 | CA  | PRO | K | 52 | -8,158  | -24,960 | 12,932 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 303 | C   | PRO | K | 52 | -6,858  | -25,075 | 12,146 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 304 | O   | PRO | K | 52 | -5,885  | -24,428 | 12,506 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 305 | CB  | PRO | K | 52 | -8,261  | -26,043 | 13,991 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 306 | CG  | PRO | K | 52 | -9,743  | -26,108 | 14,284 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 307 | CD  | PRO | K | 52 | -10,411 | -25,728 | 12,977 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 308 | N   | PHE | K | 53 | -6,854  | -25,955 | 11,068 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 309 | CA  | PHE | K | 53 | -5,670  | -26,171 | 10,235 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 310 | C   | PHE | K | 53 | -5,125  | -24,829 | 9,739  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 311 | O   | PHE | K | 53 | -3,942  | -24,556 | 9,891  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 312 | CB  | PHE | K | 53 | -5,936  | -27,142 | 9,069  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 313 | CG  | PHE | K | 53 | -4,673  | -27,523 | 8,331  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 314 | CD1 | PHE | K | 53 | -4,287  | -26,835 | 7,153  | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 315 | CD2 | PHE | K | 53 | -3,860 | -28,588 | 8,795  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 316 | CE1 | PHE | K | 53 | -3,117 | -27,201 | 6,460  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 317 | CE2 | PHE | K | 53 | -2,693 | -28,953 | 8,097  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 318 | CZ  | PHE | K | 53 | -2,322 | -28,262 | 6,930  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 319 | N   | PHE | K | 54 | -6,042 | -23,989 | 9,109  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 320 | CA  | PHE | K | 54 | -5,632 | -22,714 | 8,512  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 321 | C   | PHE | K | 54 | -4,879 | -21,890 | 9,557  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 322 | O   | PHE | K | 54 | -3,748 | -21,476 | 9,337  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 323 | CB  | PHE | K | 54 | -6,794 | -21,857 | 7,962  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 324 | CG  | PHE | K | 54 | -7,478 | -22,388 | 6,726. | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 325 | CD1 | PHE | K | 54 | -6,776 | -22,516 | 5,501  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 326 | CD2 | PHE | K | 54 | -8,868 | -22,667 | 6,744  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 327 | CE1 | PHE | K | 54 | -7,453 | -22,895 | 4,325  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 328 | CE2 | PHE | K | 54 | -9,540 | -23,037 | 5,565  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 329 | CZ  | PHE | K | 54 | -8,835 | -23,146 | 4,354  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 330 | N   | ILE | K | 55 | -5,602 | -21,616 | 10,711 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 331 | CA  | ILE | K | 55 | -5,139 | -20,632 | 11,690 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 332 | C   | ILE | K | 55 | -3,881 | -21,077 | 12,435 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 333 | O   | ILE | K | 55 | -3,018 | -20,252 | 12,706 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 334 | CB  | ILE | K | 55 | -6,240 | -20,109 | 12,653 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 335 | CG1 | ILE | K | 55 | -6,944 | -21,221 | 13,459 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 336 | CG2 | ILE | K | 55 | -7,249 | -19,271 | 11,863 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 337 | CD1 | ILE | K | 55 | -7,916 | -20,694 | 14,499 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 338 | N   | THR | K | 56 | -3,815 | -22,415 | 12,811 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 339 | CA  | THR | K | 56 | -2,675 | -22,938 | 13,561 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 340 | C   | THR | K | 56 | -1,407 | -22,838 | 12,711 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 341 | O   | THR | K | 56 | -0,371 | -22,417 | 13,208 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 342 | CB  | THR | K | 56 | -2,921 | -24,337 | 14,185 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 343 | OG1 | THR | K | 56 | -1,991 | -24,550 | 15,248 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 344 | CG2 | THR | K | 56 | -2,789 | -25,522 | 13,234 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 345 | N   | VAL | K | 57 | -1,512 | -23,258 | 11,387 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 346 | CA  | VAL | K | 57 | -0,372 | -23,191 | 10,471 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 347 | C   | VAL | K | 57 | 0,068  | -21,732 | 10,327 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 348 | O   | VAL | K | 57 | 1,259  | -21,469 | 10,285 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 349 | CB  | VAL | K | 57 | -0,628 | -23,887 | 9,109  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 350 | CG1 | VAL | K | 57 | 0,515  | -23,659 | 8,115  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 351 | CG2 | VAL | K | 57 | -0,791 | -25,399 | 9,300  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 352 | N   | GLY | K | 58 | -0,931 | -20,773 | 10,232 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 353 | CA  | GLY | K | 58 | -0,646 | -19,343 | 10,177 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 354 | C   | GLY | K | 58 | 0,245  | -18,856 | 11,314 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 355 | O   | GLY | K | 58 | 1,223  | -18,154 | 11,094 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 356 | N   | LEU | K | 59 | -0,170 | -19,229 | 12,585 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 357 | CA  | LEU | K | 59 | 0,563  | -18,847 | 13,797 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 358 | C   | LEU | K | 59 | 1,995  | -19,390 | 13,755 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 359 | O   | LEU | K | 59 | 2,950  | -18,680 | 14,037 | 1,00 | 0,00 | O |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 360 | CB  | LEU | K | 59 | -0,175 | -19,306 | 15,071 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 361 | CG  | LEU | K | 59 | 0,460  | -18,836 | 16,396 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 362 | CD1 | LEU | K | 59 | 0,454  | -17,314 | 16,532 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 363 | CD2 | LEU | K | 59 | -0,280 | -19,457 | 17,578 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 364 | N   | VAL | K | 60 | 2,103  | -20,735 | 13,437 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 365 | CA  | VAL | K | 60 | 3,383  | -21,445 | 13,401 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 366 | C   | VAL | K | 60 | 4,304  | -20,826 | 12,329 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 367 | O   | VAL | K | 60 | 5,497  | -20,677 | 12,556 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 368 | CB  | VAL | K | 60 | 3,168  | -22,974 | 13,243 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 369 | CG1 | VAL | K | 60 | 4,467  | -23,717 | 12,973 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 370 | CG2 | VAL | K | 60 | 2,530  | -23,575 | 14,502 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 371 | N   | GLU | K | 61 | 3,707  | -20,485 | 11,121 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 372 | CA  | GLU | K | 61 | 4,409  | -19,828 | 10,011 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 373 | C   | GLU | K | 61 | 5,144  | -18,585 | 10,515 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 374 | O   | GLU | K | 61 | 6,304  | -18,381 | 10,182 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 375 | CB  | GLU | K | 61 | 3,458  | -19,496 | 8,840  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 376 | CG  | GLU | K | 61 | 4,128  | -18,695 | 7,725  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 377 | CD  | GLU | K | 61 | 3,185  | -18,379 | 6,589  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 378 | OE1 | GLU | K | 61 | 1,978  | -18,211 | 6,690  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 379 | OE2 | GLU | K | 61 | 3,875  | -18,199 | 5,434  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 380 | N   | ALA | K | 62 | 4,398  | -17,723 | 11,310 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 381 | CA  | ALA | K | 62 | 4,961  | -16,490 | 11,858 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 382 | C   | ALA | K | 62 | 6,272  | -16,759 | 12,595 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 383 | O   | ALA | K | 62 | 7,268  | -16,086 | 12,362 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 384 | CB  | ALA | K | 62 | 3,985  | -15,755 | 12,765 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 385 | N   | ALA | K | 63 | 6,222  | -17,786 | 13,532 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 386 | CA  | ALA | K | 63 | 7,397  | -18,184 | 14,304 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 387 | C   | ALA | K | 63 | 8,559  | -18,562 | 13,385 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 388 | O   | ALA | K | 63 | 9,683  | -18,139 | 13,615 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 389 | CB  | ALA | K | 63 | 7,109  | -19,317 | 15,286 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 390 | N   | TYR | K | 64 | 8,256  | -19,413 | 12,328 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 391 | CA  | TYR | K | 64 | 9,285  | -19,912 | 11,410 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 392 | C   | TYR | K | 64 | 10,073 | -18,796 | 10,731 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 393 | O   | TYR | K | 64 | 11,269 | -18,949 | 10,526 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 394 | CB  | TYR | K | 64 | 8,751  | -20,857 | 10,318 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 395 | CG  | TYR | K | 64 | 8,211  | -22,195 | 10,773 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 396 | CD1 | TYR | K | 64 | 8,685  | -22,868 | 11,933 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 397 | CD2 | TYR | K | 64 | 7,247  | -22,847 | 9,964  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 398 | CE1 | TYR | K | 64 | 8,206  | -24,146 | 12,270 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 399 | CE2 | TYR | K | 64 | 6,796  | -24,141 | 10,271 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 400 | CZ  | TYR | K | 64 | 7,279  | -24,784 | 11,431 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 401 | OH  | TYR | K | 64 | 6,844  | -26,049 | 11,786 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 402 | N   | PHE | K | 65 | 9,364  | -17,669 | 10,325 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 403 | CA  | PHE | K | 65 | 10,059 | -16,531 | 9,710  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 404 | C   | PHE | K | 65 | 11,164 | -16,015 | 10,631 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 405 | O   | PHE | K | 65 | 12,265 | -15,736 | 10,172 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 406 | CB  | PHE | K | 65 | 9,145  | -15,353 | 9,328  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 407 | CG  | PHE | K | 65 | 8,256  | -15,625 | 8,140  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 408 | CD1 | PHE | K | 65 | 6,850  | -15,558 | 8,269  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 409 | CE1 | PHE | K | 65 | 6,019  | -15,722 | 7,147  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 410 | CZ  | PHE | K | 65 | 6,578  | -15,970 | 5,883  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 411 | CE2 | PHE | K | 65 | 7,973  | -16,052 | 5,738  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 412 | CD2 | PHE | K | 65 | 8,808  | -15,877 | 6,858  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 413 | N   | ILE | K | 66 | 10,810 | -15,851 | 11,967 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 414 | CA  | ILE | K | 66 | 11,764 | -15,375 | 12,973 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 415 | C   | ILE | K | 66 | 12,951 | -16,337 | 13,006 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 416 | O   | ILE | K | 66 | 14,086 | -15,893 | 12,915 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 417 | CB  | ILE | K | 66 | 11,140 | -15,149 | 14,379 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 418 | CG1 | ILE | K | 66 | 10,099 | -14,011 | 14,323 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 419 | CG2 | ILE | K | 66 | 12,227 | -14,831 | 15,415 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 420 | CD1 | ILE | K | 66 | 9,228  | -13,930 | 15,564 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 421 | N   | ASN | K | 67 | 12,652 | -17,685 | 13,180 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 422 | CA  | ASN | K | 67 | 13,703 | -18,702 | 13,320 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 423 | C   | ASN | K | 67 | 14,701 | -18,596 | 12,170 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 424 | O   | ASN | K | 67 | 15,900 | -18,535 | 12,401 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 425 | CB  | ASN | K | 67 | 13,186 | -20,151 | 13,395 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 426 | CG  | ASN | K | 67 | 12,499 | -20,446 | 14,713 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 427 | OD1 | ASN | K | 67 | 11,286 | -20,373 | 14,846 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 428 |     | ASN | K | 67 | 13,361 | -20,767 | 15,738 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 429 | N   | LEU | K | 68 | 14,148 | -18,617 | 10,895 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 430 | CA  | LEU | K | 68 | 14,952 | -18,648 | 9,672  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 431 | C   | LEU | K | 68 | 15,897 | -17,447 | 9,657  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 432 | O   | LEU | K | 68 | 17,102 | -17,606 | 9,507  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 433 | CB  | LEU | K | 68 | 14,060 | -18,741 | 8,415  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 434 | CG  | LEU | K | 68 | 14,812 | -19,062 | 7,106  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 435 | CD1 | LEU | K | 68 | 13,884 | -19,801 | 6,142  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 436 | CD2 | LEU | K | 68 | 15,348 | -17,806 | 6,416  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 437 | N   | ALA | K | 69 | 15,280 | -16,209 | 9,799  | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 438 | CA  | ALA | K | 69 | 16,020 | -14,950 | 9,727  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 439 | C   | ALA | K | 69 | 17,139 | -14,903 | 10,766 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 440 | O   | ALA | K | 69 | 18,266 | -14,546 | 10,449 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 441 | CB  | ALA | K | 69 | 15,107 | -13,737 | 9,887  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 442 | N   | PHE | K | 70 | 16,758 | -15,243 | 12,059 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 443 | CA  | PHE | K | 70 | 17,670 | -15,188 | 13,199 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 444 | C   | PHE | K | 70 | 18,884 | -16,072 | 12,927 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 445 | O   | PHE | K | 70 | 20,011 | -15,631 | 13,104 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 446 | CB  | PHE | K | 70 | 16,975 | -15,568 | 14,523 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 447 | CG  | PHE | K | 70 | 17,885 | -15,411 | 15,718 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 448 | CD1 | PHE | K | 70 | 18,073 | -14,141 | 16,317 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 449 | CE1 | PHE | K | 70 | 18,941 | -13,990 | 17,415 | 1,00 | 0,00 | C |

Tabla 7 (continuación)

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 450 | CZ  | PHE | K | 70 | 19,631 | -15,104 | 17,928 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 451 | CE2 | PHE | K | 70 | 19,449 | -16,372 | 17,346 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 452 | CD2 | PHE | K | 70 | 18,578 | -16,527 | 16,251 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 453 | N   | MET | K | 71 | 18,608 | -17,374 | 12,522 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 454 | CA  | MET | K | 71 | 19,663 | -18,364 | 12,302 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 455 | C   | MET | K | 71 | 20,669 | -17,820 | 11,295 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 456 | O   | MET | K | 71 | 21,861 | -17,837 | 11,565 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 457 | CB  | MET | K | 71 | 19,144 | -19,738 | 11,845 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 458 | CG  | MET | K | 71 | 18,539 | -20,532 | 13,001 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 459 | SD  | MET | K | 71 | 17,840 | -22,089 | 12,369 | 1,00 | 0,00 | S |
| ÁTOMO | 460 | CE  | MET | K | 71 | 17,151 | -22,720 | 13,919 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 461 | N   | ALA | K | 72 | 20,140 | -17,350 | 10,096 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 462 | CA  | ALA | K | 72 | 20,987 | -16,868 | 9,002  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 463 | C   | ALA | K | 72 | 21,948 | -15,778 | 9,479  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 464 | O   | ALA | K | 72 | 23,143 | -15,836 | 9,214  | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 465 | CB  | ALA | K | 72 | 20,171 | -16,371 | 7,810  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 466 | N   | LEU | K | 73 | 21,352 | -14,740 | 10,188 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 467 | CA  | LEU | K | 73 | 22,105 | -13,603 | 10,723 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 468 | C   | LEU | K | 73 | 23,219 | -14,134 | 11,625 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 469 | O   | LEU | K | 73 | 24,380 | -13,793 | 11,445 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 470 | CB  | LEU | K | 73 | 21,168 | -12,597 | 11,435 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 471 | CG  | LEU | K | 73 | 21,770 | -11,268 | 11,940 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 472 | CD1 | LEU | K | 73 | 22,598 | -11,416 | 13,216 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 473 | CD2 | LEU | K | 73 | 22,551 | -10,518 | 10,865 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 474 | N   | PHE | K | 74 | 22,798 | -14,976 | 12,647 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 475 | CA  | PHE | K | 74 | 23,673 | -15,420 | 13,728 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 476 | C   | PHE | K | 74 | 24,905 | -16,131 | 13,168 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 477 | O   | PHE | K | 74 | 26,020 | -15,816 | 13,560 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 478 | CB  | PHE | K | 74 | 22,924 | -16,299 | 14,751 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 479 | CG  | PHE | K | 74 | 23,732 | -16,543 | 16,002 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 480 | CD1 | PHE | K | 74 | 24,581 | -17,672 | 16,106 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 481 | CE1 | PHE | K | 74 | 25,344 | -17,887 | 17,269 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 482 | CZ  | PHE | K | 74 | 25,264 | -16,982 | 18,342 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 483 | CE2 | PHE | K | 74 | 24,421 | -15,860 | 18,254 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 484 | CD2 | PHE | K | 74 | 23,658 | -15,640 | 17,091 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 485 | N   | VAL | K | 75 | 24,659 | -17,162 | 12,265 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 486 | CA  | VAL | K | 75 | 25,740 | -18,022 | 11,768 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 487 | C   | VAL | K | 75 | 26,806 | -17,217 | 11,023 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 488 | O   | VAL | K | 75 | 27,988 | -17,509 | 11,151 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 489 | CB  | VAL | K | 75 | 25,296 | -19,270 | 10,961 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 490 | CG1 | VAL | K | 75 | 24,498 | -20,225 | 11,849 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 491 | CG2 | VAL | K | 75 | 24,524 | -18,965 | 9,677  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 492 | N   | PHE | K | 76 | 26,338 | -16,197 | 10,199 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 493 | CA  | PHE | K | 76 | 27,254 | -15,284 | 9,518  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 494 | C   | PHE | K | 76 | 28,106 | -14,562 | 10,570 | 1,00 | 0,00 | C |

**Tabla 7 (continuación)**

|       |     |     |     |   |    |        |         |        |      |      |   |
|-------|-----|-----|-----|---|----|--------|---------|--------|------|------|---|
| ÁTOMO | 495 | O   | PHE | K | 76 | 29,327 | -14,567 | 10,485 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 496 | CB  | PHE | K | 76 | 26,514 | -14,307 | 8,577  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 497 | CG  | PHE | K | 76 | 27,428 | -13,236 | 8,034  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 498 | CD1 | PHE | K | 76 | 27,372 | -11,920 | 8,557  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 499 | CD2 | PHE | K | 76 | 28,398 | -13,540 | 7,048  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 500 | CE1 | PHE | K | 76 | 28,293 | -10,945 | 8,136  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 501 | CE2 | PHE | K | 76 | 29,317 | -12,561 | 6,628  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 502 | CZ  | PHE | K | 76 | 29,271 | -11,268 | 7,180  | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 503 | N   | ALA | K | 77 | 27,390 | -13,889 | 11,554 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 504 | CA  | ALA | K | 77 | 28,022 | -12,981 | 12,509 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 505 | C   | ALA | K | 77 | 29,158 | -13,664 | 13,265 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 506 | O   | ALA | K | 77 | 30,255 | -13,126 | 13,348 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 507 | CB  | ALA | K | 77 | 27,020 | -12,372 | 13,488 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 508 | N   | THR | K | 78 | 28,833 | -14,872 | 13,873 | 1,00 | 0,00 | N |
| ÁTOMO | 509 | CA  | THR | K | 78 | 29,831 | -15,665 | 14,586 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 510 | C   | THR | K | 78 | 30,768 | -16,240 | 13,544 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 511 | O   | THR | K | 78 | 31,932 | -16,523 | 13,791 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 512 | CB  | THR | K | 78 | 29,211 | -16,756 | 15,490 | 1,00 | 0,00 | C |
| ÁTOMO | 513 | OG1 | THR | K | 78 | 30,185 | -17,218 | 16,432 | 1,00 | 0,00 | O |
| ÁTOMO | 514 | CG2 | THR | K | 78 | 28,636 | -17,966 | 14,756 | 1,00 | 0,00 | C |

LISTA DE SECUENCIAS

<110> Janssen Pharmaceutica N.V.

<120> Proteínas atpE mutantes

<130> PRD2323p

5 <150> EP 04104720,0

< 151> 2004-09-28

<150> US 60/620500

< 151> 2004-10-20

<160> 12

10 <170> PatentIn version 3,1

<210> 1

< 211> 81

< 212> PRT

<213> Mycobacterium tuberculosis

15 <400> 1

Met Asp Pro Thr Ile Ala Ala Gly Ala Leu Ile Gly Gly Gly Leu Ile  
1 5 10 15

Met Ala Gly Gly Ala Ile Gly Ala Gly Ile Gly Asp Gly Val Ala Gly  
20 25 30

Asn Ala Leu Ile Ser Gly Val Ala Arg Gln Pro Glu Ala Gln Gly Arg  
35 40 45

Leu Phe Thr Pro Phe Phe Ile Thr Val Gly Leu Val Glu Ala Ala Tyr  
50 55 60

Phe Ile Asn Leu Ala Phe Met Ala Leu Phe Val Phe Ala Thr Pro Val  
65 70 75 80

Lys

<210> 2

< 211> 81

< 212> PRT

20 <213> Mycobacterium tuberculosis

<400> 2

# ES 2 636 980 T3

Met Asp Pro Thr Ile Ala Ala Gly Ala Leu Ile Gly Gly Gly Leu Ile  
1 5 10 15

Met Ala Gly Gly Ala Ile Gly Ala Gly Ile Gly Asp Gly Val Ala Gly  
20 25 30

Asn Ala Leu Ile Ser Gly Val Ala Arg Gln Pro Glu Ala Gln Gly Arg

35 40 45  
Leu Phe Thr Pro Phe Phe Ile Thr Val Gly Leu Val Glu Ala Pro Tyr  
50 55 60

Phe Ile Asn Leu Ala Phe Met Ala Leu Phe Val Phe Ala Thr Pro Val  
65 70 75 80

Lys

<210> 3

5 < 211> 86

< 212> PRT

<213> Mycobacterium smegmatis

<400> 3

Met Asp Leu Asp Pro Asn Ala Ile Ile Thr Ala Gly Ala Leu Ile Gly  
1 5 10 15

Gly Gly Leu Ile Met Gly Gly Gly Ala Ile Gly Ala Gly Ile Gly Asp  
20 25 30

Gly Ile Ala Gly Asn Ala Leu Ile Ser Gly Ile Ala Arg Gln Pro Glu  
35 40 45

Ala Gln Gly Arg Leu Phe Thr Pro Phe Phe Ile Thr Val Gly Leu Val  
50 55 60

Glu Ala Ala Tyr Phe Ile Asn Leu Ala Phe Met Ala Leu Phe Val Phe  
65 70 75 80

Ala Thr Pro Gly Leu Gln  
85

10 <210> 4

< 211> 86

< 212> PRT

<213> Mycobacterium smegmatis

<400> 4

# ES 2 636 980 T3

Met Asp Leu Asp Pro Asn Ala Ile Ile Thr Ala Gly Ala Leu Ile Gly  
1 5 10 15  
Gly Gly Leu Ile Met Gly Gly Gly Ala Ile Gly Ala Gly Ile Gly Val  
20 25 30  
Gly Ile Ala Gly Asn Ala Leu Ile Ser Gly Ile Ala Arg Gln Pro Glu  
35 40 45  
Ala Gln Gly Arg Leu Phe Thr Pro Phe Phe Ile Thr Val Gly Leu Val  
50 55 60  
Glu Ala Ala Tyr Phe Ile Asn Leu Ala Phe Met Ala Leu Phe Val Phe  
65 70 75 80  
Ala Thr Pro Gly Leu Gln  
85

<210> 5

< 211> 86

< 212> PRT

5 <213> Mycobacterium smegmatis

<400> 5

Met Asp Leu Asp Pro Asn Ala Ile Ile Thr Ala Gly Ala Leu Ile Gly  
1 5 10 15  
Gly Gly Leu Ile Met Gly Gly Gly Ala Ile Gly Ala Gly Ile Gly Val  
20 25 30  
Gly Ile Ala Gly Asn Ala Leu Ile Ser Gly Ile Ala Arg Gln Pro Glu  
35 40 45  
Ala Gln Gly Arg Leu Phe Thr Pro Phe Phe Ile Thr Val Gly Leu Val  
50 55 60  
Glu Ala Ala Tyr Phe Ile Asn Leu Ala Phe Met Ala Leu Phe Val Phe  
65 70 75 80  
Ala Thr Pro Gly Leu Gln  
85

<210> 6

< 211> 246

10 < 212> ADN

<213> Mycobacterium tuberculosis

<400> 6

atggacccca ctatcgctgc cggcgccctc atcggcggtg gactgatcat ggccggtggc 60  
gccatcggtc cgggtatcgg tgacggtgtc gccggtaacg cgcttatctc cgggtgtcgcc 120  
cggcaaccgg aggcgcaagg gcggctgttc acaccgttct tcatcacgtt cggtttggtt 180  
gaggcggtcat acttcatcaa cctggcggtt atggcgctgt tcgtcttcgc tacaccgtc 240  
aagtaa 246

<210> 7

15 < 211> 246

< 212> ADN

<213> Mycobacterium tuberculosis

<400> 7

|            |            |            |             |            |            |     |
|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|-----|
| atggacccca | ctatcgctgc | cggcgcctc  | atcggcgggtg | gactgatcat | ggcgggtggc | 60  |
| gccatcggcg | cgggtatcgg | tgacgggtgc | gccggtaacg  | cgcttatctc | cgggtgcgcc | 120 |
| cggcaaccgg | aggcgcaagg | gcggctgttc | acacggttct  | tcatcacctg | cggtttggtt | 180 |
| gaggcgccat | acttcatcaa | cctggcggtt | atggcgctgt  | tcgtcttcgc | tacaccgcgc | 240 |
| aagtaa     |            |            |             |            |            | 246 |

<210> 8

5 < 211> 261

< 212> ADN

<213> Mycobacterium smegmatis

<400> 8

|             |             |             |            |            |            |     |
|-------------|-------------|-------------|------------|------------|------------|-----|
| atggatctcg  | atcccaacgc  | catcatcacg  | gccggcgccc | tgatcggcgg | tggattgac  | 60  |
| atgggtggcg  | gcgccatcgg  | tgccgggtatc | ggcgacggta | tcgcgggtaa | cgcgctgac  | 120 |
| tcgggtatcg  | cccgtcagcc  | cgaggcccag  | ggccggctgt | tcaccccggt | cttcatcacc | 180 |
| gtcgggtctgg | tggaaagccgc | gtacttcac   | aacctggcct | tcattggcgt | gttcgtcttc | 240 |

10

|            |            |   |     |
|------------|------------|---|-----|
| gccactcctg | gccttcagta | a | 261 |
|------------|------------|---|-----|

<210> 9

< 211> 261

< 212> ADN

15 <213> Mycobacterium smegmatis

<400> 9

|             |             |             |            |            |            |     |
|-------------|-------------|-------------|------------|------------|------------|-----|
| atggatctcg  | atcccaacgc  | catcatcacg  | gccggcgccc | tgatcggcgg | tggattgac  | 60  |
| atgggtggcg  | gcgccatcgg  | tgccgggtatc | ggcgacggta | tcgcgggtaa | cgcgctgac  | 120 |
| tcgggtatcg  | cccgtcagcc  | cgaggcccag  | ggccggctgt | tcaccccggt | cttcatcacc | 180 |
| gtcgggtctgg | tggaaagccgc | gtacttcac   | aacctggcct | tcattggcgt | gttcgtcttc | 240 |
| gccactcctg  | gccttcagta  | a           |            |            |            | 261 |

<210> 10

< 211> 261

20 < 212> ADN

<213> Mycobacterium smegmatis

<400> 10

|             |             |             |            |            |            |     |
|-------------|-------------|-------------|------------|------------|------------|-----|
| atggatctcg  | atcccaacgc  | catcatcacg  | gccggcgccc | tgatcggcgg | tggattgac  | 60  |
| atgggtggcg  | gcgccatcgg  | tgccgggtatc | ggcgacggta | tcgcgggtaa | cgcgctgac  | 120 |
| tcgggtatcg  | cccgtcagcc  | cgaggcccag  | ggccggctgt | tcaccccggt | cttcatcacc | 180 |
| gtcgggtctgg | tggaaagccgc | gtacttcac   | aacctggcct | tcattggcgt | gttcgtcttc | 240 |
| gccactcctg  | gccttcagta  | a           |            |            |            | 261 |

# ES 2 636 980 T3

<210> 11

< 211> 753

< 212> ADN

<213> Mycobacterium tuberculosis

5 <400> 11

```
atgactgaga ccatacctggc cgcccaaatc gaggtcggcg agcaccacac ggccacctgg 60
ctcgggtatga cggtaaacac cgacaccgtg ttgtcgacgg cgatcgccgg gttgatcgtg 120
atcgcgttgg ccttttacct gcgcgccaaa gtgacttcga cggatgtgcc aggcggggtg 180
cagttgtttt ttgaggcgat caccattcag atgcgcaatc aggtcgaaag cgccatcggg 240
atgcgggatcg cacccttcgt gctgccgctg gcggtgacca tcttcgtgtt catcctgac 300
tccaactggc tggcagtcct cccggtgcag tacaccgata aacacgggca caccaccgag 360
ttgctcaaat cggcagcagc ggacatcaat tacgtgctgg cgctggcgct tttcgtgttc 420
gtctgtacc acacggccgg tatttgccgg cgcggtattg tcggacaccc gatcaagttg 480
ctgaaagggc acgtgacgct cctcgcgccg atcaaccttg tcgaagaagt cgccaagcca 540
atctcgttgt cgctccgact ttccggcaac attttcgccg gcggcattct ggtcgcactg 600
atcgcgctct ttcccccta catcatgtgg gcgcccaatg cgatctggaa agcatttgac 660
ctgttcgtcg gcgcaatcca ggccttcatt tttgcgctgc tgacaatttt gtacttcagc 720
caagcgatgg agctcgaaga ggaacaccac tag 753
```

<210> 12

< 211> 250

< 212> PRT

10 <213> Mycobacterium tuberculosis

<400> 12

```
Met Thr Glu Thr Ile Leu Ala Ala Gln Ile Glu Val Gly Glu His His
1          5          10          15
Thr Ala Thr Trp Leu Gly Met Thr Val Asn Thr Asp Thr Val Leu Ser
20          25          30
```

# ES 2 636 980 T3

Thr Ala Ile Ala Gly Leu Ile Val Ile Ala Leu Ala Phe Tyr Leu Arg  
 35 40 45  
 Ala Lys Val Thr Ser Thr Asp Val Pro Gly Gly Val Gln Leu Phe Phe  
 50 55 60  
 Glu Ala Ile Thr Ile Gln Met Arg Asn Gln Val Glu Ser Ala Ile Gly  
 65 70 75 80  
 Met Arg Ile Ala Pro Phe Val Leu Pro Leu Ala Val Thr Ile Phe Val  
 85 90 95  
 Phe Ile Leu Ile Ser Asn Trp Leu Ala Val Leu Pro Val Gln Tyr Thr  
 100 105 110  
 Asp Lys His Gly His Thr Thr Glu Leu Leu Lys Ser Ala Ala Ala Asp  
 115 120 125  
 Ile Asn Tyr Val Leu Ala Leu Ala Leu Phe Val Phe Val Cys Tyr His  
 130 135 140  
 Thr Ala Gly Ile Trp Arg Arg Gly Ile Val Gly His Pro Ile Lys Leu  
 145 150 155 160  
 Leu Lys Gly His Val Thr Leu Leu Ala Pro Ile Asn Leu Val Glu Glu  
 165 170 175  
 Val Ala Lys Pro Ile Ser Leu Ser Leu Arg Leu Phe Gly Asn Ile Phe  
 180 185 190  
 Ala Gly Gly Ile Leu Val Ala Leu Ile Ala Leu Phe Pro Pro Tyr Ile  
 195 200 205  
 Met Trp Ala Pro Asn Ala Ile Trp Lys Ala Phe Asp Leu Phe Val Gly  
 210 215 220  
 Ala Ile Gln Ala Phe Ile Phe Ala Leu Leu Thr Ile Leu Tyr Phe Ser  
 225 230 235 240  
 Gln Ala Met Glu Leu Glu Glu Glu His His  
 245 250

## REIVINDICACIONES

1. Una proteína atpE mutante aislada que comprende una secuencia polipeptídica seleccionada de SEQ ID N° 01 que comprende al menos una mutación puntual situada en uno cualquiera de los sitios de unión de ATPasa situados entre los aminoácidos 14 a 34 o entre los aminoácidos 54 a 69, y la SEQ ID N° 03 que comprende al menos una mutación puntual situada en uno cualquiera de los aminoácidos 20 a 40, o de los aminoácidos 60 a 75, en donde dicha proteína induce resistencia al compuesto antimicrobiano DARQ J de la Figura 1.
2. Una proteína atpE mutante aislada según la reivindicación 1, que comprende una secuencia polipeptídica seleccionada del grupo que consiste en SEQ ID N° 01 que comprende al menos una mutación puntual situada en el aminoácido 28 o en el aminoácido 63.
3. Una proteína atpE mutante aislada según la reivindicación 1 o 2, seleccionada de Mtb\_R según se muestra en SEQ ID N° 2, Msm\_R09 según se muestra en SEQ ID N° 4, Msm\_R10 según se muestra en SEQ ID N° 5.
4. Uso de un polipéptido según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en un método para identificar compuestos que interactúan con la parte F<sub>0</sub> de una ATPasa y a su potencial como compuestos antimicrobianos.
5. Un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE, comprendiendo dicho método;
  - técnicas de modelado molecular para generar la estructura tridimensional de un sitio de unión según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3;
  - emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre el compuesto de ensayo y la estructura tridimensional del sitio de unión; y
  - analizar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación del compuesto de ensayo con la estructura tridimensional del sitio de unión.
6. Un método según la reivindicación 5, en el que la estructura tridimensional se genera con al menos los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup> y Phe<sup>65</sup> de una subunidad C y los aminoácidos Ser<sup>182</sup>, Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup> y Arg<sup>186</sup> de una subunidad A, usando las coordenadas atómicas de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5 o las coordenadas estructurales homólogas que comprenden una desviación media cuadrática de átomos distintos de hidrógeno de menos de aproximadamente 1,5 Å.
7. Un método según la reivindicación 5, en el que la estructura tridimensional se genera usando las coordenadas atómicas de los aminoácidos Ala<sup>21</sup>, Gly<sup>25</sup> de la cadena A de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; los aminoácidos Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>27</sup>, Phe<sup>53</sup>, Phe<sup>54</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Glu<sup>61</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de la cadena K de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; los aminoácidos Met<sup>17</sup>, Gly<sup>19</sup>, Gly<sup>20</sup>, Ala<sup>21</sup>, Ile<sup>22</sup>, Gly<sup>23</sup>, Ala<sup>24</sup>, Gly<sup>25</sup>, Ile<sup>26</sup>, Gly<sup>27</sup>, Asp<sup>28</sup>, Gly<sup>29</sup>, Ala<sup>31</sup>, Phe<sup>53</sup>, Thr<sup>56</sup>, Val<sup>57</sup>, Gly<sup>58</sup>, Leu<sup>59</sup>, Val<sup>60</sup>, Glu<sup>61</sup>, Ala<sup>62</sup>, Ala<sup>63</sup>/Pro<sup>63</sup>, Tyr<sup>64</sup>, Phe<sup>65</sup> de la cadena L de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5; y de los aminoácidos Ser<sup>182</sup>, Leu<sup>183</sup>, Leu<sup>185</sup>, and Arg<sup>186</sup> de la cadena M de cualquiera de las Tablas 3, 4 o 5.
8. Una secuencia de ácido nucleico aislada que codifica una proteína atpE mutante aislada según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3.
9. Un vector que comprende la secuencia de ácido nucleico según la reivindicación 8.
10. Una célula hospedadora que porta el vector según la reivindicación 9.
11. Un método para identificar un compuesto antimicrobiano, comprendiendo dicho método
  - a) poner en contacto células que expresan una proteína atpE con un compuesto de ensayo bajo condiciones fisiológicas, y
  - b) determinar si el compuesto de ensayo interactúa con la proteína atpE
- en el que la proteína atpE es una proteína atpE mutante según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3.
12. Un método para evaluar el potencial de un compuesto de ensayo para interactuar con una proteína atpE mutante según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, comprendiendo dicho método;

a) usar técnicas de modelado molecular para formular una estructura tridimensional de la proteína atpE mutante según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3,

b) emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre el compuesto de ensayo y la estructura tridimensional de la proteína atpE mutante según las reivindicaciones 1 a 3, y

5 c) analizar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación del compuesto de ensayo con la estructura tridimensional de la proteína atpE mutante según las reivindicaciones 1 a 3.

13. Un método según la reivindicación 12, en el que la estructura tridimensional de la proteína atpE se genera usando las coordenadas atómicas de los Ile28, Glu61 e Ile63 de *E. coli* (Protein Database 1Q01) +/- una desviación media cuadrática de los átomos de esqueleto de dichos aminoácidos de no más de 10 Å.

10 14. Un método según la reivindicación 12, en el que la estructura tridimensional de la proteína atpE se genera usando las coordenadas atómicas según las tablas 6 o 7 +/- una desviación media cuadrática de los átomos de esqueleto de dichos aminoácidos de no más de 1,5 Å.

Fig 1

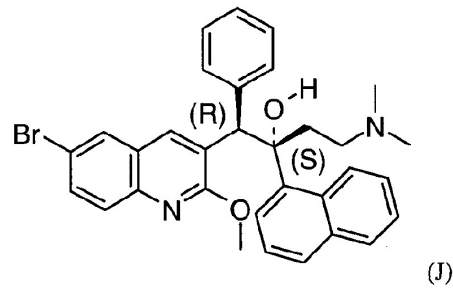
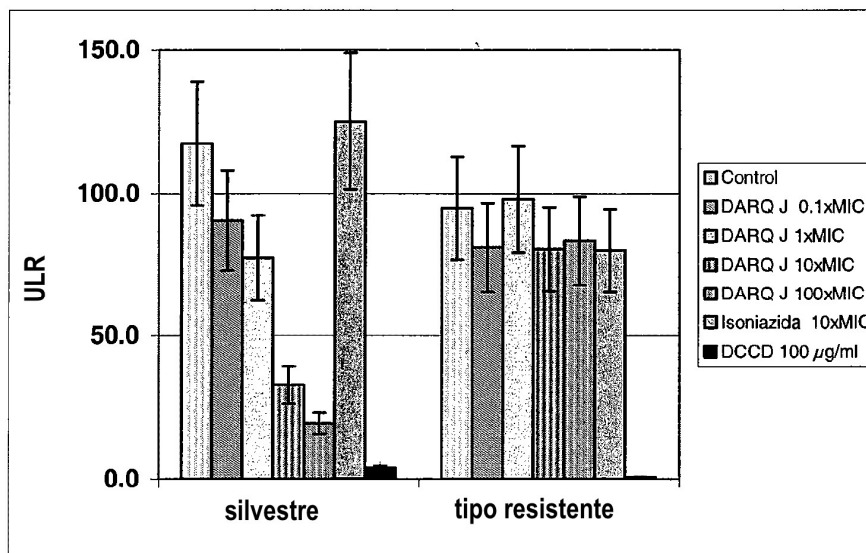


Fig 2

|         |   |                                   |     |                                                                |     |                                                            |     |   |     |
|---------|---|-----------------------------------|-----|----------------------------------------------------------------|-----|------------------------------------------------------------|-----|---|-----|
|         |   | *                                 | 20  | *                                                              | 40  | *                                                          | 60  | * | 80  |
| Mtb_S   | : | MDP                               | --- | TLAAGALICGGGLIMAGGAICGAGICGDCVAGNALISGVARQPEAQGRLETPFFITVGLVER | --- | YFINLAFMALFVFATPVK                                         | --- |   |     |
| Mtb_R   | : | MDP                               | --- | TLAAGALICGGGLIMAGGAICGAGICGDCVAGNALISGVARQPEAQGRLETPFFITVGLVER | --- | YFINLAFMALFVFATPVK                                         | --- |   |     |
| Msm_S   | : | MDLDPNAITTAGALICGGGLIMCGGAICGAGIC | --- | GIAGNALISGVARQPEAQGRLETPFFITVGLVER                             | --- | YFINLAFMALFVFATPVK                                         | --- |   |     |
| Msm_R09 | : | MDLDPNAITTAGALICGGGLIMCGGAICGAGIC | --- | GIAGNALISGVARQPEAQGRLETPFFITVGLVER                             | --- | YFINLAFMALFVFATPVK                                         | --- |   |     |
| Msm_R10 | : | MDLDPNAITTAGALICGGGLIMCGGAICGAGIC | --- | GIAGNALISGVARQPEAQGRLETPFFITVGLVER                             | --- | YFINLAFMALFVFATPVK                                         | --- |   |     |
| Humana  | : | SRD                               | --- | DDTAAKFTCAAGATVSWA                                             | --- | CSGAGICGTVFGSLITGMARNPSLKQQLFSYATLGFALSEAMGLFCLMVAFILILFAM | --- |   |     |
|         |   |                                   | 70  | *                                                              | 90  | *                                                          | 110 | * | 130 |

**Fig 3**



**Fig 4**

