

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 454 773**

51 Int. Cl.:

**C07K 14/11** (2006.01)

**C12Q 1/18** (2006.01)

**A61K 38/00** (2006.01)

**C07K 14/16** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **09.10.2008 E 08838119 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **11.12.2013 EP 2197901**

54 Título: **Fragmentos solubles de la proteína PB2 del virus influenza con capacidad para unirse a un casquete de ARN**

30 Prioridad:

**09.10.2007 US 998398 P**

**25.03.2008 US 70792 P**

**08.04.2008 US 123456 P**

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

**11.04.2014**

73 Titular/es:

**EUROPEAN MOLECULAR BIOLOGY  
LABORATORY (EMBL) (100.0%)  
MEYERHOFSTRASSE 1  
69117 HEIDELBERG, DE**

72 Inventor/es:

**CUSACK, STEPHEN;  
GUILLIGAY, DELPHINE;  
HART, DARREN y  
TARENDEAU, FRANCK**

74 Agente/Representante:

**CURELL AGUILÁ, Mireia**

ES 2 454 773 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

Fragmentos solubles de la proteína PB2 del virus influenza con capacidad para unirse a un casquete de ARN.

5 **Campo técnico de la invención**

La presente invención se refiere a fragmentos solubles de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe y variantes de los mismos, así como a complejos cristalizados de los mismos que comprenden un análogo del casquete (CAP) de ARN. Esta invención también se refiere a métodos informáticos que utilizan las coordenadas estructurales de dicho complejo para el cribado y el diseño de compuestos que interactúen con la cavidad de unión al casquete de ARN. Además, esta invención se refiere a métodos para identificar compuestos que se unan a fragmentos polipeptídicos de PB2 que comprendan la cavidad de unión al casquete de ARN, y que preferentemente inhiban la interacción con los casquetes de ARN o análogos de los mismos, mediante la utilización de dichos fragmentos polipeptídicos de PB2, preferentemente en un contexto de alto rendimiento. Los compuestos identificados de ese modo y las composiciones farmacéuticas que los contengan pueden ser utilizados para el tratamiento de enfermedades provocadas por infecciones víricas causadas por virus de ARN monocatenario de sentido negativo.

20 **Antecedentes de la invención**

La gripe es responsable de una notable morbilidad y mortalidad en el mundo y es considerada por muchos como una de las enfermedades víricas más importantes del ser humano. Las epidemias anuales de gripe azotan el globo y de vez en cuando surgen nuevas cepas virulentas que provocan pandemias de gran poder destructivo. Actualmente la vacunación es el principal método para controlar las epidemias de la gripe. Pero surgen con rapidez nuevos virus de la gripe mutantes que eluden los efectos de la vacunación. En vista de que la fabricación de una nueva vacuna antigripal exige cerca de seis meses se requieren tratamientos alternativos, esto es, fármacos antivirales, sobre todo como primera línea de defensa contra las pandemias de rápida propagación.

Un excelente punto de partida para el desarrollo de fármacos antivirales son los datos estructurales de las proteínas esenciales de los virus. Por eso, la determinación de la estructura cristalina de la neuraminidasa, un antígeno de superficie del virus de la gripe (von Itzstein et al., 1993) condujo enseguida al desarrollo de inhibidores de la neuraminidasa con actividad antivírica que impiden la liberación del virus por parte de las células infectadas, aunque no la producción del mismo. Estos compuestos y sus derivados se desarrollaron posteriormente hasta convertirse en los antigripales zanamivir (Glaxo) y oseltamivir (Roche), que muchos países están almacenando como primera línea de defensa contra una pandemia en el futuro. Con todo, estos medicamentos solo consiguen reducir la duración de la enfermedad clínica. Otros compuestos antigripales como la amantadina y la rimantadina tienen alternativamente como diana una proteína de los canales iónicos situada en la membrana del virus, la proteína M2, e interfieren en el proceso de descapsidación del virus en el interior de la célula. Pese a ello, no han sido utilizados ampliamente debido a sus efectos secundarios y la rápida aparición de virus mutantes resistentes (Magden et al., 2005). Asimismo, fármacos antivirales más inespecíficos como la ribavirina han demostrado su eficacia como tratamiento antigripal (Eriksson et al., 1977). No obstante, la ribavirina ha sido aprobada en pocos países, probablemente por la gravedad de los efectos secundarios (Furuta et al., 2005). Así pues, existe una clara necesidad de nuevos compuestos antivirales, que preferentemente estén dirigidos contra dianas de otra naturaleza.

45 Los virus de la gripe integran con los *Thogotovirus* la familia de los *Orthomyxoviridae* que, junto con la familia *Bunyaviridae*, la cual engloba los géneros *Hantavirus*, *Nairovirus*, *Orthobunyavirus* y *Phlebovirus*, son virus de ARN de polaridad negativa. Su genoma está segmentado y agrupado en partículas de ribonucleoproteínas que incluyen la ARN-polimerasa dependiente de ARN encargada de: (i) el copiado inicial del ARN monocatenario del virión (ARNv) en ARNm del virus y (ii) la replicación del ARNv. A fin de sintetizar el ARNm del virus la polimerasa utiliza el mecanismo denominado "robo del casquete" (Plotch et al., 1981; Kukkonen et al., 2005; Leahy et al., 1997; Noah and Krug, 2005). La enzima se une al casquete de ARN situado en el extremo 5' de las moléculas de ARNm de la célula y lo corta junto con un fragmento de nucleótidos. Los fragmentos de ARN dotados del casquete actúan como cebadores en la síntesis del ARNm del virus. La polimerasa está compuesta por tres subunidades: PB1 (proteína básica de la polimerasa), PB2 y PA. La PB1 alberga las actividades endonucleasa y polimerasa y la PB2 contiene el dominio de unión al casquete de ARN.

El complejo polimerasa parece ser una diana adecuada para los fármacos antivirales porque es esencial para la síntesis del ARNm del virus y su replicación y porque contiene varios sitios activos funcionales que probablemente son considerablemente distintos de los presentes en las proteínas de las células hospedadoras (Magden et al., 2005). Así, por ejemplo, ha habido intentos de interferir el ensamblaje de las subunidades de la polimerasa por medio de un péptido de 25 aminoácidos similar al dominio de unión a PA de la subunidad PB1 (Ghanem et al., 2007). Asimismo se ha intentado bloquear la actividad endonucleasa de la polimerasa y persiguiendo ese fin se han descubierto una serie de compuestos derivados 4-sustituídos del ácido 2,4-dioxobutanoico que actúan como inhibidores selectivos de la citada actividad en varios virus de la gripe (Tomassini et al., 1994). La flutimida, una 2,6-dicetopiperazina sustituida descubierta en extractos del hongo *Delitschia confertaspera*, también inhibe la endonucleasa del virus de la gripe (Tomassini et al., 1996). También se ha intentado interferir la transcripción vírica

con análogos de nucleósidos como la 2'-desoxi-2'-fluoroguanosina (Tisdale et al., 1995) y se ha demostrado que la T-705, una pirazina sustituida, puede actuar como inhibidor específico de la ARN-polimerasa del virus de la gripe (Furuta et al., 2005). Por último, estudios comparativos del modo de unión de la proteína de unión al casquete humana eIF4E a estructuras de casquete de ARN y de la interacción de las RNP del virus de la gripe con estructuras de casquete de ARN (Hooker et al., 2003) permitieron descubrir un nuevo análogo de casquete que interacciona de forma selectiva con el virus de la gripe pero no con la proteína de unión al casquete humana. No obstante, hasta ahora el principal obstáculo para encontrar compuestos que interaccionasen con la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 y que pudieran interferir con la unión a dicho casquete y, por ende, con la actividad de la ARN-polimerasa era que se ignoraba la estructura y la identidad de esa cavidad de unión.

Los intentos por dilucidar el sitio de unión al casquete de ARN se han saldado con resultados contradictorios. Ciertos experimentos de entrecruzamiento indicaban que el sitio de unión al casquete de ARN de la ARN-polimerasa del virus de la gripe lo constituían dos secuencias distintas, una N-terminal (242-282) y otra C-terminal (538-577) del segmento proximal de PB2 (Honda et al., 1999). Otros experimentos de entrecruzamiento hallaron una secuencia que abarcaba desde el aminoácido 533 al aminoácido 564 de la subunidad proteica PB2, en particular el residuo de aminoácido Trp552, como el sitio de interacción potencial con el casquete de ARN (Li et al., 2001). Por su parte, un análisis mutacional señaló como posible sitio de unión al casquete de ARN los residuos de aminoácidos Phe363 y Phe404 de PB2 (Fechter et al., 2003).

Uno de los objetos de la presente invención consiste en dar a conocer: (i) datos estructurales de alta resolución de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 obtenidos mediante cristalografía de rayos X, (ii) métodos informáticos y métodos *in vitro*, preferentemente en un contexto de alto rendimiento, para identificar compuestos que pueden unirse a la cavidad de unión al ARN de PB2, preferentemente compitiendo en la unión al casquete de ARN con la ARN-polimerasa e interfiriendo así con su actividad, y (iii) composiciones farmacológicas que comprenden tales compuestos para el tratamiento de enfermedades infecciosas causadas por virus que utilizan el mecanismo de robo del casquete para la síntesis del ARNm del virus.

La presente invención hace posible por primera vez la definición precisa del sitio de unión al casquete de ARN de PB2 dentro de un dominio plegado independientemente. Hasta ahora la ubicación exacta del sitio había generado una gran controversia. En general se creía que el sitio de unión al casquete necesitaba las tres subunidades de la polimerasa y posiblemente también el ARN vírico para ser funcional (Cianci et al., 1995; Li et al., 2001). El sorprendente logro de los inventores de la presente invención consiste en producir con técnicas de ADN recombinante fragmentos polipeptídicos solubles de PB2 que comprenden una cavidad de unión al casquete de ARN funcional que hacen posible el cribado ultrarrápido *in vitro* de inhibidores de un sitio funcional en la polimerasa del virus de la gripe, utilizando para ello un material fácilmente obtenible con un sistema de expresión sencillo. Trabajos anteriores con inhibidores de la unión al casquete habían utilizado, por ejemplo, partículas ribonucleoproteicas enteras purificadas a partir de viriones de la gripe (Hooker et al., 2003). Además, dando a conocer las coordenadas estructurales detalladas de la cavidad de unión al casquete de ARN que alberga la PB2, la presente invención permite utilizar estrategias basadas en la estructura para el diseño de inhibidores de la unión al casquete, esto es, el cribado y la optimización de prototipos con medios informáticos.

### Resumen de la invención

Un primer aspecto de la presente invención se refiere a un fragmento polipeptídico soluble de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe, o una variante del mismo, capaz de unirse a un casquete de ARN o a un análogo del mismo, tal y como se define en las reivindicaciones.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a un complejo que comprende los fragmentos polipeptídicos solubles de la presente invención y un casquete de ARN o un análogo del mismo, tal y como se define en las reivindicaciones.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a un polinucleótido aislado que codifica un fragmento polipeptídico soluble aislado de la presente invención.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a un vector recombinante que comprende un polinucleótido aislado de la presente invención.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a una célula hospedadora recombinante que comprende un polinucleótido aislado de la presente invención o el vector recombinante de la presente invención.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a un método para identificar compuestos que se asocian con toda o con parte de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a la cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2, que comprende los siguientes pasos:

- (a) construir un modelo informático de dicha cavidad de unión definido por las coordenadas estructurales del complejo de la presente invención tal y como se muestra en la Figura 18;

(b) selección de un potencial compuesto de unión mediante un método seleccionado del grupo consistente en:

- 5 (i) ensamblaje de fragmentos moleculares para formar dicho compuesto,  
 (ii) selección de un compuesto a partir de una base de datos de moléculas pequeñas, y  
 (iii) diseño *de novo* de ligandos de dicho compuesto;

10 (c) realizar con medios informáticos una operación de ajuste de los modelos por ordenador de dicho compuesto y de dicha cavidad de unión a fin de ofrecer una configuración de energía mínima de dicho compuesto en la cavidad de unión; y

15 (d) evaluar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación entre dicho compuesto y el modelo de la cavidad de unión, en la cual se evalúa la capacidad de dicho compuesto para asociarse con dicha cavidad de unión.

Otro aspecto más de la presente invención se refiere a un método para identificar compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o las cavidades de unión de variantes polipeptídicas de PB2, que comprende los siguientes pasos: (i) poner en contacto el fragmento polipeptídico de la presente invención o la célula hospedadora recombinante de la presente invención con un compuesto en estudio y (ii) analizar la capacidad de unión de dicho compuesto en estudio a la PB2.

20

Otro aspecto más de la presente invención se refiere a un anticuerpo dirigido contra el dominio de unión al casquete de ARN de PB2.

## 25 Breve descripción de los dibujos

La FIG. 1 ilustra la PB2 entera con los posibles sitios de unión para la subunidad PB1 de la polimerasa de la gripe y los posibles sitios de unión al casquete de ARN predichos por las investigaciones anteriores [Cap-N/Cap-C, véase Honda et al. (1999); Cap-C (Trp552), véase Li et al. (2001); Cap-M, véase Fechter et al. (2003)]. Además, se ha demostrado que es posible sintetizar varios fragmentos de PB2 en bacterias. Todos los constructos citados se expresan con abundancia y son solubles. La figura muestra en orden descendente la longitud de los fragmentos de PB2 codificados por 13 clones aislados que codifican siete fragmentos distintos de la PB2. Los clones aislados abarcan los nucleótidos: Clon 68: 886 a 1449, Clon 16: 871 a 1452, Clon 15: 871 a 1452, Clon 57: 844 a 1449, Clon 13: 844 a 1449, Clon 10: 832 a 1443, Clon 28: 805 a 1452, Clon 23: 805 a 1452, Clon 12: 723 a 1425, Clon 4: 706 a 1491, Clon 30: 706 a 1491, Clon 07: 706 a 1491, y Clon 05: 706 a 1491 de la SEQ ID N.º 25.

30

La FIG. 2A muestra una gráfica que ilustra la purificación del fragmento polipeptídico de PB2 que abarca los aminoácidos 318 a 483 en una columna de filtración con gel Superdex 75. La gráfica representa la absorción a 280 nm en unidades arbitrarias frente al tiempo de elución y el número de fracción.

40

La FIG. 2B muestra un gel de electroforesis PAGE con SDS y tinción de Coomassie donde aparecen las fracciones 24-34 del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) después de la filtración en gel. Los marcadores de peso molecular tienen los siguientes tamaños: 116 - 66,2 - 45 - 35 - 25 - 18,4 y 14,4 kD.

45

La FIG. 3A muestra los cristales naturales del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) acomplejados con  $m^7$ GTP (5 mM) formados con una solución de precipitación a base de formiato de sodio 1,6 M y ácido cítrico 0,1 M y pH 4,6.

La FIG. 3B muestra los cristales del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) con sustitución parcial con selenometioninas acomplejados con  $m^7$ GTP (5 mM) formados con una solución de precipitación a base de formiato de sodio 1,6 M y ácido cítrico 0,1 M y pH 4,6.

La FIG. 4 muestra el patrón de difracción de rayos X obtenido con un cristal natural en la línea BM 14 de las instalaciones de la European Synchrotron Radiation Facility. El patrón de difracción lo sitúa en el grupo espacial C222<sub>1</sub>, con unas dimensiones de celda a=92,2, b=94,4, c=220,4 Å. El recuadro de la esquina superior derecha muestra que la difracción se extiende hasta la resolución de 2,4 Å. El recuadro inferior derecho muestra el cristal congelado utilizado para la obtención de datos, de unas dimensiones aproximadas de 15 x 15 x 50  $\mu\text{m}^3$ .

55

La FIG. 5 presenta un diagrama de cintas de la estructura del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) acomplejado con  $m^7$ GTP. Los elementos de la estructura secundaria aparecen indicados según los cálculos con DSSP (Holm, L. and Sander, C, 1993), con las hélices alfa en gris oscuro y las láminas beta en gris claro. El GTP aparece representado como un modelo de esferas y barras al igual que las cadenas laterales de Phe323, Phe404 e His357. Los bucles significativos, centrados en los residuos 348 y 420 aparecen indicados, al igual que los residuos N- y C-terminales visibles en la estructura (320 y 483, respectivamente).

60

65

La FIG. 6 muestra una visión alternativa de la estructura del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) acomplejado con  $m^7$ GTP que revela que el bucle 420 se proyecta hacia el solvente.

5 La FIG. 7 muestra la conformación y la densidad electrónica experimental sin sesgo de el  $m^7$ GTP rodeada por algunos de los aminoácidos que forman la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2. La densidad de electrones corresponde a un mapa obtenido mediante RESOLVE utilizando las fases experimentales y una promediación de simetría no cristalográfica perfilada a un sigma de 0,95.

10 La FIG. 8 muestra el  $m^7$ GTP del análogo de casquete inserta en la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 con los átomos interactuantes potenciales. Los supuestos puentes de hidrógeno aparecen representados con líneas de puntos.

15 La FIG. 9 presenta una alineación de la secuencia de aminoácidos de los dominios de unión al casquete de ARN de PB2 de los virus de la gripe A (cepa A/Victoria/3/1975) y B (cepa B/Lee/40). La estructura secundaria de A/Victoria/3/1975 [calculada con DSSP (Holm and Sander, 1993)] se muestra sobre la alineación de la secuencia. Las alineaciones de la secuencia basadas en la estructura se representaron con ESPRIPT (<http://espript.ibcp.fr/ESPrpt/cgi-bin/ESPrpt.cgi>). Los residuos resaltados sobre un fondo negro son idénticos en ambas secuencias. Los triángulos indican los principales residuos que interactúan con el  $m^7$ GTP del análogo del casquete.

20 La FIG.10 presenta una alineación de la secuencia de aminoácidos de los dominios de unión al casquete de ARN de PB2 de los virus de la gripe A (cepa A/Victoria/3/1975), B (cepa B/Lee/40) y C (cepa Ann Arbor/1/50). La notación es la misma que la de la FIG. 9.

25 La FIG. 11 es una representación esquemática de las interacciones entre el  $m^7$ GTP del análogo del casquete de ARN y la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2. El  $m^7$ GTP (señalado como M7G) del análogo del casquete aparece dibujado con enlaces gris oscuro, los residuos de la proteína con enlaces gris intermedio y las moléculas de agua con esferas gris claro. Los puentes de hidrógeno se muestran como líneas de puntos con la distancia entre el donante y el aceptor indicada en amstrongs. Las partes sombreadas de las esferas en gris oscuro indican los residuos que mantienen enlaces de van der Waals con el ligando. El diagrama corresponde a la molécula con la designación de cadena B en el archivo de coordenadas. Las otras cuatro moléculas de la unidad asimétrica (cadenas A, B, D y F) arrojan diagramas similares con pequeñas diferencias en las distancias y las posiciones de las moléculas de agua. El dibujo se realizó con LIGPLOT (Wallace et al., 1995).

30 La FIG. 12 muestra un gel de electroforesis PAGE con SDS y tinción de Coomassie con los resultados de la elución de la forma natural y las formas mutantes con una sola mutación puntual en el dominio de unión al casquete de PB2, después de la unión a una resina de Sefarosa 4B con  $m^7$ GTP a 4°C. Las mutantes E361A, F404A, H357A y K376A no se unieron a la resina de Sefarosa 4B con  $m^7$ GTP en las condiciones en que la proteína natural se une, mientras que la mutante F323A presentó una débil actividad de unión residual y la F325A se unió a la resina casi tanto como la forma natural, aunque esta actividad de unión se redujo drásticamente a 37°C (véase la Tabla 3). También se fabricó una mutante H357W ya que los virus de la gripe B y C presentan ese residuo en esa posición. Esta mutante se purificó en forma soluble y mostró una unión ligeramente mayor a la resina de Sefarosa 4B con  $m^7$ GTP que la forma natural. La mutante  $\Delta$ VQ se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420) y presenta actividad de unión al casquete.

35 La FIG. 13 muestra la actividad de unión al casquete de complejos de la polimerasa naturales o recombinantes mutantes. Cultivos de células HEK293T se transfectaron simultáneamente con plásmidos que expresaban PB1 y PA ( $\Phi$ ) o con plásmidos que expresaban PB1, PB2-His o mutantes de las mismas y PA. Los extractos celulares se analizaron mediante la técnica de *pull-down* con Sefarosa- $m^7$ GTP a 4°C. Los complejos de polimerasa retenidos y eluidos con el  $m^7$ GTP se revelaron mediante transferencia Western con anticuerpos específicos contra PA. IN y E indican el extracto celular introducido y la proteína eluida, respectivamente. La posición de la banda de la PA aparece indicada a la derecha y la movilidad de los marcadores de masa molecular a la izquierda. La mutante  $\Delta$ VQ se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420).

40 La FIG. 14 es una gráfica que muestra la actividad de replicación de las polimerasas naturales y mutantes. Las mini-RNP naturales y mutantes se reconstituyeron *in vivo* y se purificaron con cromatografía de afinidad con agarosa  $Ni^{2+}$ -NTA. La acumulación de RNP derivadas se determinó mediante transferencia Western con anticuerpos anti-PA y anti-NP. Los datos se muestran en forma de porcentaje del valor natural y corresponden a las medias y los rangos de dos experimentos. La mutante  $\Delta$ VQ se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420).

45 La FIG. 15 es una gráfica que muestra la actividad de transcripción *in vitro* de las RNP purificadas naturales y mutantes utilizando ApG como cebador. Los datos se presentan en forma de medias y rangos de dos experimentos. La mutante  $\Delta$ VQ se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420).

La FIG. 16 es una gráfica que muestra la actividad de transcripción *in vitro* de las RNP purificadas naturales y mutantes con el ARNm de la  $\beta$ -globina como cebador. Los datos se presentan en forma de medias y rangos de dos experimentos. La mutante  $\Delta VQ$  se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420).

La FIG. 17 es una gráfica que muestra el cociente de la actividad de transcripción *in vitro* lograda con ApG y con ARNm de la  $\beta$ -globina de las RNP purificadas naturales y mutantes. Los datos se presentan en forma de medias y rangos de dos experimentos. La mutante  $\Delta VQ$  se generó sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (bucle 420).

La FIG. 18 enumera las coordenadas estructurales refinadas de los átomos correspondientes al fragmento polipeptídico de PB2 compuesto por los aminoácidos 318 a 483 de la SEQ ID N.º 1 con Lys389. El fragmento tiene una secuencia de aminoácidos conforme a la SEQ ID N.º 11 acomplejada con el análogo del casquete de ARN de 7-metil-guanosina trifosfato ( $m^7GTP$ ). La unidad asimétrica tiene cinco moléculas con cadenas A, B, D, E y F. El análogo de casquete de ARN  $m^7GTP$  es el residuo número 1 de cada cadena. Hay 293 moléculas de agua. El encabezado del archivo ofrece información sobre el afinamiento de la estructura. "Átomo" se refiere al elemento cuyas coordenadas son medidas. La primera letra de la columna define el elemento. Además, se muestra el código de tres letras de cada aminoácido y la posición en la secuencia de aminoácidos. Los tres primeros valores de la línea "Átomo" definen la posición atómica del elemento medida. El cuarto valor corresponde a la ocupación y el quinto y último es el factor de temperatura (factor B). El factor de ocupación se refiere a la fracción de las moléculas en las que cada átomo ocupa la posición especificada por las coordenadas. Un valor de "1" indica que cada átomo tiene la misma conformación, esto es, ocupa la misma posición, en todas las moléculas del cristal. B es un factor térmico que mide el movimiento del átomo alrededor de su centro atómico. Los factores de temperatura anisotrópicos aparecen indicados en líneas marcadas con "ANISOU". Esta nomenclatura corresponde al formato de archivo PDB.

### Descripción detallada de la invención

Antes de describir pormenorizadamente la presente invención es preciso entender que dicha invención no se limita a la metodología, protocolos y reactivos descritos concretamente en la presente memoria y que todos ellos pueden variar. También queda entendido que la terminología utilizada en la presente memoria se utiliza solo a efectos de descripción de formas de realización concretas, y no pretende limitar el campo de la presente invención que solo queda delimitado por las reivindicaciones adjuntas. Si no se indica de otro modo, todos los términos técnicos y científicos utilizados en la presente memoria tienen el mismo significado que se entiende habitualmente entre las personas versadas en la técnica.

Preferentemente, los términos utilizados en la presente memoria se definen tal y como se describen en "A multilingual glossary of biotechnological terms: (IUPAC Recommendations)", H.G.W. Leuenberger, B. Nagel, y H. Kölbl, Eds., Helvetica Chimica Acta, CH-4010 Basilea, Suiza, (1995).

A lo largo de esta especificación y las reivindicaciones que le siguen, a menos que el contexto requiera otra cosa, la palabra "comprender" y variaciones como "comprende" y "comprendiendo", se entenderán que implican la inclusión de un determinado número entero o intervalo o grupo de números enteros o intervalos pero no la exclusión de ningún otro número entero o intervalo o grupo de números enteros o intervalos.

El término "fragmento polipeptídico" se refiere a una parte de una proteína que está compuesta por una sola cadena de aminoácidos. El término "proteína" comprende fragmentos polipeptídicos que asumen una estructura secundaria y terciaria y además se refiere a proteínas que están constituidas por varias cadenas de aminoácidos, es decir, varias subunidades, que forman estructuras cuaternarias. El término "péptido" se refiere a cadenas cortas de aminoácidos de hasta 50 aminoácidos que no poseen necesariamente estructuras secundarias o terciarias. Un "peptoide" es un peptidomimético resultado del ensamblaje oligomérico de glicinas N-sustituidas.

Los residuos de dos o más polipéptidos se dice que "corresponden" entre sí si los residuos ocupan una posición análoga en las estructuras polipeptídicas. Como es bien conocido en la técnica, las posiciones análogas en dos o más polipéptidos pueden determinarse mediante la alineación de las secuencias polipeptídicas en función de la secuencia de aminoácidos o semejanzas estructurales. Las herramientas de alineación son conocidas por las personas versadas en la técnica y se pueden obtener por ejemplo en Internet, p. ej. ClustalW ([www.ebi.ac.uk/clustalw](http://www.ebi.ac.uk/clustalw)) o Align (<http://www.ebi.ac.uk/emboss/align/index.html>) utilizando los ajustes estándar, preferentemente en el caso de Align EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5. Las personas versadas en la técnica saben que a veces puede ser necesario introducir huecos en alguna de las secuencias para obtener una alineación satisfactoria. Por ejemplo, los residuos 220 a 510 de la subunidad PB2 del virus de la gripe A corresponden a los residuos 222 a 511 y 227 a 528 de las subunidades PB2 de los virus de la gripe B y C, respectivamente. En la Fig. 10 se muestra una alineación generada con las tres subunidades PB2. Se dice que los residuos de dos o más subunidades PB2 del virus de la gripe "corresponden" si los residuos están alineados conforme a la mejor alineación de secuencia. La "mejor alineación de secuencia" entre dos polipéptidos se define como la alineación que propicia el mayor número de residuos idénticos alineados. La "región de la mejor

alineación de secuencia" acaba y, por tanto, determina los límites y colindancias de la longitud de la secuencia comparativa a efectos de la determinación del porcentaje de similitud, si la similitud de secuencia, preferentemente la identidad, entre las dos secuencias alineadas es inferior al 30%, preferentemente menos del 20%, más preferentemente menos del 10% a lo largo de 10, 20 o 30 aminoácidos, más preferentemente menos del 30% a lo largo de 10, 20 o 30 aminoácidos. Una parte de la mejor alineación de secuencia correspondiente a las secuencias de aminoácidos de las subunidades PB2 del virus de la gripe A (aa 315 a 498), B (aa 317 a 499) y C (aa 327 a 516) se muestra en las Figuras 9 y 10.

La presente invención incluye fragmentos solubles de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe, que son capaces de unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo. El término "subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN" se refiere preferentemente a la PB2 del virus de la gripe A, B y C, que tiene preferentemente una secuencia de aminoácidos como las indicadas en las SEQ ID N.º 1, 2 o 3. Las "variantes de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN" presentan como mínimo un 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99% de similitud de la secuencia, preferentemente la identidad de secuencia en toda la longitud del fragmento con la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica como por ejemplo Align utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuestas en las SEQ ID N.º 1, 2 o 3. Se prefiere que cuando una variante natural de PB2 esté alineada con una subunidad PB2 de acuerdo a las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 esa alineación sea a todo lo largo de las dos proteínas y, por tanto, que el porcentaje de alineación se determine sobre esta base. No obstante, es posible que la variante natural pueda comprender delecciones o adiciones en los extremos C-terminal/N-terminal o internas, p. ej. debido a fusiones N- o C-terminales. En este caso solo se utilizará la región mejor alineada para la evaluación de la similitud y la identidad, respectivamente.

Preferentemente, y tal como se expone con más detalle abajo los fragmentos solubles derivados de estas variantes muestran la similitud y la identidad indicadas, respectivamente, preferentemente dentro de la región necesaria para la unión al casquete de ARN. De conformidad con lo anterior, cualquier alineación entre las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 y una variante de PB2 debería comprender preferentemente la cavidad de unión al casquete de ARN. Así pues, la susodicha similitud e identidad de secuencia, respectivamente, con las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 ocurre al menos a lo largo de una longitud de 100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 165, 170, 180, 190, 200, 210, 220, 230, 240, 250, 300 o más aminoácidos, preferentemente comprendiendo la cavidad de unión al casquete de ARN. En consecuencia, en una forma de realización preferida una variante de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN guarda una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 100 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 110 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 120 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 130 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 140 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 150 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 160 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 170 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 180 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 190 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 200 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 210 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la





identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 120 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 130 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 140 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 150 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 1 a lo largo de una longitud de 160 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 170 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 180 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 190 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 200 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 210 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 220 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 230 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 240 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 250 aminoácidos, una similitud de secuencia de al menos el 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia con la SEQ ID N.º 3 a lo largo de una longitud de 300 aminoácidos.

Se conoce un gran número de variantes naturales de PB2 de secuencias conformes a las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 y han sido descritas en la bibliografía. Todas esas variantes de PB2 están comprendidas y pueden ser la base de los fragmentos solubles de la presente invención. Ejemplos preferentes del virus de la gripe A, si la SEQ ID N.º 1 se utiliza como secuencia de referencia, comprenden mutaciones en una o más de Val227, Arg251, Ile255, Ser271, Gln288, Ile338, Val344, Arg355, Ile373, Leu374, Asn456, Val 461 y/o Ser497. En una forma de realización preferida, dichas variantes comprenden una o más de las mutaciones siguientes: Val227Met, Arg251Lys, Ile255Val, Ile255Thr, Ser271Ala, Gln288Leu, Ile338Val, Ile338Thr, Val344Leu, Arg355Lys, Ile373Thr, Leu374Ile, Asn456Ser, Val461Ile y/o Ser497Asn. Variantes preferentes de la subunidad PB2 del virus de la gripe A comprenden una mutación en la posición 389 resultado del cambio de un aminoácido arginina por una lisina (p. ej., SEQ ID N.º 11), combinada opcionalmente con una o más de las mutaciones antes citadas. Variantes preferentes de la subunidad PB2 del virus de la gripe B, si se utiliza como secuencia de referencia la SEQ ID N.º 2, incluyen mutaciones en una o más de las siguientes posiciones de aminoácidos: Thr254, Met261, Ile269, Thr301, Ile303, Leu319, Ile346, Lys380, Arg382, Met383, Lys385, Lys397, Asn442, Ser456, Glu467, Leu468 y/o Thr494. En una forma de realización preferida la variante de la subunidad PB2 comprende una o más de las mutaciones siguientes: Thr254Ala, Met261Thr, Ile269Val, Thr301Ala, Ile303Leu, Leu319Gln, Ile346Val, Lys380Gln, Arg382Lys, Met383Leu, Lys385Arg, Lys397Arg, Asn442Ser, Ser456Pro, Glu467Gly, Leu468Ser y/o Thr494Ile. Variantes preferentes de la subunidad PB2 del virus de la gripe B, si se utiliza como secuencia de referencia la SEQ ID N.º 3, incluyen mutaciones en una o más de las siguientes posiciones de aminoácidos: Leu311, Pro330 y/o Ser436. En una forma de realización preferida, dichas mutaciones son las siguientes: Leu311Pro, Pro330Gln y/o Ser436Thr.

Los fragmentos solubles de la presente invención están, por tanto, basados en la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN o variantes de la misma como se define arriba. En consecuencia, en la siguiente especificación el término "fragmento(s) polipeptídico(s) soluble(s)" y "fragmentos polipeptídicos de PB2" siempre comprende dichos fragmentos derivados de las proteínas PB2 tal y como se exponen en las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 y fragmentos derivados de variantes proteínicas de PB2, tal y como se exponen arriba, que son capaces de unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo. No obstante, la especificación también utiliza el término "variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2" o "variantes de fragmentos de PB2" para referirse específicamente a fragmentos solubles de PB2", capaces de unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo que son derivados de variantes

de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN. Así pues, los fragmentos solubles de PB2 de la presente invención comprenden preferentemente, consisten básicamente o consisten de secuencias de la subunidad PB2 del virus de la gripe natural. No obstante, también se prevé que las variantes de fragmentos PB2 contengan además sustituciones de aminoácidos en 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 o más posiciones de aminoácidos, y tengan al menos una similitud de secuencia del 60%, 65%, 70%, 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente la identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencias se obtiene con herramientas conocidas en la técnica como por ejemplo Align utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en las SEQ ID N.º 1, 2 o 3. Se entiende que los fragmentos de PB2 de la presente invención pueden comprender otros aminoácidos adicionales que no proceden de PB2, como p. ej. etiquetas, enzimas etc., no considerándose dichos aminoácidos adicionales como parte de dicha alineación, esto es, quedan excluidos del cálculo del porcentaje de alineación. En una forma de realización preferida el susodicho porcentaje de alineación se obtiene cuando se alinea la secuencia del fragmento con las SEQ ID N.º 1, 2 o 3 al menos a lo largo de una longitud de 100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 165, 170, 180, 190, 200, 210, 220, 230, 240, 250, 260 o 270 aminoácidos, en el que la respectiva secuencia de la SEQ ID N.º 1, 2 o 3 comprende preferentemente la cavidad de unión al casquete de ARN.

En una forma de realización preferida, las variantes de fragmentos polipeptídicos solubles de PB2 comprenden al menos o consisten en los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 323 a 404 de PB2 del virus de la gripe A (SEQ ID N.º 13) y tienen al menos una similitud de secuencia 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencias se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS : needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 13, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos aminoácidos 318 a 483 de PB2 del virus de la gripe A (SEQ ID N.º 11) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 11, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 235 a 496 de PB2 del virus de la gripe A (SEQ ID N.º 4) y tienen una similitud de secuencia de al menos 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencias se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS::needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 4, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos aminoácidos 220 a 510 de PB2 del virus de la gripe A y tienen una similitud de secuencia de al menos 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: :needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 1. En formas de realización preferidas, las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 del virus de la gripe A de la presente invención comprenden mutaciones, preferentemente mutaciones naturales como las mutaciones en uno o más de los siguientes residuos de aminoácidos en comparación con la SEQ ID N.º 1: Val227, Arg251, Ile255, Sei271, Gln288, Ile338, Val344, Arg355, Ile373, Leu374, Lys389, Asn456, Val 461 y/o Ser497. En una forma de realización preferida, dichas mutaciones son las siguientes: Val227Met, Arg251Lys, Ile255Val, Ile255Thr, Ser271Ala, Gln288Leu, Ile338Val, Ile338Thr, Val344Leu, Arg355Lys, Ile373Thr, Leu374Ile, Lys389, Asn456Ser, Val461Ile y/o Ser497Asn. Una variante preferente de la subunidad PB2 del virus de la gripe A comprende una mutación en la posición 389 resultado de un cambio de un aminoácido arginina por una lisina (p. ej., SEQ ID N.º 11), combinada opcionalmente con una o más de las mutaciones antes citadas.

En una forma de realización preferida, las variantes de fragmentos polipeptídicos solubles de PB2 comprenden al menos o consisten de los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 325 a 406 de PB2 del virus de la gripe A (SEQ ID N.º 2) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente

identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0., Gap Extend 0.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 2, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos aminoácidos 320 a 484 de PB2 del virus de la gripe A (SEQ ID N.º 2) y tiene una similitud de secuencia de al menos el 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 2, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 237 a 497 de PB2 del virus de la gripe B (SEQ ID N.º 2) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 2, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 222 a 511 de PB2 del virus de la gripe B (derivada de la SEQ ID N.º 2) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, 81%, 82%, 83%, 84%, 85%, 86%, 87%, 88%, 89%, 90%, 91%, 92%, 93%, 94%, 95%, 96%, 97%, 98%, 99%, y preferentemente identidad de secuencia a lo largo de todo el fragmento utilizando la mejor alineación de secuencia y/o a lo largo de la región de la mejor alineación de secuencia, en el que la mejor alineación de secuencia se obtiene con herramientas conocidas en la técnica, como por ejemplo Align, utilizando ajustes estándar, preferentemente EMBOSS: :needle, Matrix: Blosum62, Gap Open 10.0, Gap Extend 0.5, con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 2. En formas de realización preferidas, las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 del virus de la gripe B comprenden mutaciones, preferentemente mutaciones naturales, en una o más de las siguientes posiciones de aminoácidos en comparación con la SEQ ID N.º 2: Thr254, Met261, Ile269, Thr301, Ile303, Leu319, Ile346, Lys380, Arg382, Met383, Lys385, Lys397, Asn442, Ser456, Glu467, Leu468 y/o Thr494. En una forma de realización preferida, dichas variantes de fragmentos comprenden una o más de las mutaciones siguientes: Thr254Ala, Met261Thr, Ile269Val, Thr301Ala, Ile303Leu, Leu319Gln, Ile346Val, Lys380Gln, Arg382Lys, Met383Leu, Lys385Arg, Lys397Arg, Asn442Ser, Ser456Pro, Glu467Gly, Leu468Ser y/o Thr494Ile.

En una forma de realización preferida, las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos o consisten en los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 335 a 416 de PB2 del virus de la gripe C (derivada de la SEQ ID N.º 3) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 80%, más preferentemente del 85%, más preferentemente del 90%, muy preferentemente del 95% a lo largo de todo el fragmento con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 3, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenderán al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 330 a 501 de PB2 del virus de la gripe C (derivada de la SEQ ID N.º 3) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, más preferentemente del 85%, muy preferentemente del 90% a lo largo de todo el fragmento con la secuencia de aminoácidos expuestas en la SEQ ID N.º 3, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 242 a 514 de PB2 del virus de la gripe C (derivada de la SEQ ID N.º 3) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, más preferentemente del 85%, muy preferentemente del 90% a lo largo de todo el fragmento con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 3, más preferentemente las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden al menos los residuos de aminoácidos correspondientes a los residuos de aminoácidos 227 a 528 de PB2 del virus de la gripe C (derivada de la SEQ ID N.º 3) y tienen una similitud de secuencia de al menos el 60%, más preferentemente del 65%, más preferentemente del 70%, más preferentemente del 75%, más preferentemente del 80%, más preferentemente del 85%, muy preferentemente del 90% a lo largo de todo el fragmento con la secuencia de aminoácidos expuesta en la SEQ ID N.º 2. En formas de realización preferidas, las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2 del virus de la gripe A de la presente invención comprenden mutaciones, preferentemente mutaciones naturales como las mutaciones en uno o más de los siguientes residuos de aminoácidos en comparación con la SEQ ID N.º 3: Leu311, Pro330 y/o Ser436. En una forma de realización preferida, las variantes de fragmentos comprenden una o más de las mutaciones siguientes: Leu311Pro, Pro330Gln y/o Ser436Thr.

El término "similitud de secuencia" significa que los aminoácidos que ocupan la misma posición en la mejor alineación de secuencia son idénticos o similares, preferentemente idénticos. Los "aminoácidos similares" poseen

características similares, tales como polaridad, solubilidad, hidrofilia, hidrofobia, carga o tamaño. Aminoácidos similares son preferentemente: leucina, isoleucina y valina; fenilalanina, triptófano y tirosina; lisina, arginina e histidina; ácido glutámico y ácido aspártico; glicina, alanina y serina; treonina, asparragina, glutamina y metionina. Las personas versadas en la técnica conocen bien las herramientas para la búsqueda de la similitud de secuencia, como por ejemplo las que se encuentran en Internet (e.g., [www.ebi.ac.uk/Tools/similarity.html](http://www.ebi.ac.uk/Tools/similarity.html)).

El término "soluble", tal y como se utiliza en la presente memoria, se refiere a un fragmento polipeptídico que permanece en el sobrenadante después de la centrifugación durante 30 min a 100 000 x g en una solución tampón acuosa en condiciones isotónicas fisiológicas, por ejemplo, cloruro de sodio o sacarosa 0,14 M, con una concentración de proteínas de hasta 5 mg/ml en ausencia de concentraciones efectivas de desnaturizantes como la guanidina o la urea. El fragmento de proteína cuya solubilidad se analiza, se expresa preferentemente en uno de los sistemas de expresión celular indicados a continuación. Se prefiere en particular que la expresión y, preferentemente, la purificación de cada fragmento de proteína se lleve a cabo tal y como se expone con más detalle en el Ejemplo 2.

El término "purificado" en referencia a un polipéptido, no significa necesariamente la pureza absoluta de una preparación homogénea, sino que es más bien un indicador de que el polipéptido es relativamente más puro que en el ambiente natural. En general, un polipéptido purificado está sustancialmente libre de otras proteínas, lípidos, carbohidratos y otros materiales con los que está asociado de forma natural, preferentemente a un nivel funcionalmente significativo, como por ejemplo, al menos un 85% puro, más preferentemente al menos un 95% puro, muy preferentemente al menos un 99% puro. La expresión "purificado en grado suficiente para ser apto para la cristalización" se refiere a una proteína cuya pureza es del 85% al 100%, preferentemente del 90% al 100%, más preferentemente del 95% al 100% y que puede concentrarse hasta una concentración superior a 3 mg/ml, preferentemente superior a 10 mg/ml, más preferentemente superior a 18 mg/ml sin precipitar. Una persona versada en la técnica puede purificar un polipéptido con las técnicas habituales de purificación de proteínas. Un polipéptido sustancialmente puro ofrecerá una sola banda grande en un gel de poliacrilamida no reductor.

El término "asociado" tal y como se utiliza en el contexto de la identificación de compuestos con los métodos de la presente invención se refiere a una condición de proximidad entre una parte (es decir, entidad o compuesto químico o porciones o fragmentos del mismo) y una cavidad de unión de PB2. La asociación puede ser no covalente, es decir, en que la yuxtaposición se ve favorecida energéticamente por, por ejemplo, puentes de hidrógeno, fuerzas de van der Waals, interacciones electrostáticas o hidrofóbicas, o puede ser covalente.

El término "casquete de ARN" se refiere a una estructura de capuchón situada en el extremo 5' de una molécula de ARNm y que consiste en un nucleótido de guanina conectado con el ARNm a través de un inusual enlace trifosfato 5'-5'. Dicha guanosina está metilada en la posición 7. Otras modificaciones incluyen la posible metilación de los grupos 2'-hidroxilo de los primeros tres azúcares ribosa del extremo 5' del ARNm. "Análogos del casquete de ARN" se refiere a estructuras que se parecen a la estructura del casquete de ARN. Ejemplos de análogos del casquete de ARN son: 7-metil-guanosina ( $m^7G$ ), 7-metil-guanosina monofosfato ( $m^7GMP$ ), 7-metil-guanosina trifosfato ( $m^7GTP$ ), 7-metil-guanosina unida a través de un puente trifosfato 5'-5' a una guanosina ( $m^7GpppG$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una guanosina metilada en la posición 2'-OH de la ribosa ( $m^7GpppGm$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una adenosina ( $m^7GpppA$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una adenosina metilada en la posición 2'-OH de la ribosa ( $m^7GpppAm$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una citidina ( $m^7GpppC$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una citidina metilada en la posición 2'-OH de la ribosa ( $m^7GpppCm$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una uridina ( $m^7GpppU$ ), 7-metil-guanosina unida por un puente trifosfato 5'-5' a una uridina metilada en la posición 2'-OH de la ribosa ( $m^7GpppUm$ ). Así pues, en una forma de realización preferida de la presente invención el análogo de casquete se selecciona entre el grupo consistente en  $m^7G$ ,  $m^7GMP$ ,  $m^7GTP$ ,  $m^7GpppN$ ,  $m^7GpppNm$ , donde N es un nucleótido, preferentemente G, A, U o C. En otra forma de realización preferida, los análogos del casquete de ARN pueden comprender nucleótidos adicionales, por ejemplo entre 1 y 15 nucleótidos, esto es, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14 o 15, seleccionándose preferentemente dichos nucleótidos de manera independiente del grupo consistente en A, C, G, U y/o T. Estos nucleótidos adicionales están preferentemente unidos con el primer nucleótido N de  $m^7GpppN$  o  $m^7GpppNm$  a través de un enlace fosfoéster, fosfodiéster o fosfortriéster o un análogo no hidrolizable de los mismos.

El término "nucleótido" tal y como se utiliza en la presente memoria se refiere a un compuesto que consiste en un nucleósido purínico, desazapurínico o pirimidínico, p. ej., adenina, guanina, citosina, uracilo, timina, desazaadenina, desazaguanosina y similares, unidos a una pentosa en la posición 1', incluidas las formas 2'-desoxi y 2'-hidroxilo, p. ej., , tal como aparecen descritos en Kornberg and Baker, DNA Replication, 2ª Ed. (Freeman, San Francisco, 1992) e incluyen además, entre otros, nucleósidos sintéticos que contienen bases modificadas y/o azúcares modificados, p. ej. los descritos en general por Scheit, Nucleotide Analogs (John Wiley, N. Y., 1980).

El término "cavidad de unión" se refiere a una estructura tridimensional formada por los fragmentos polipeptídicos de la invención, esto es, el dominio de unión al casquete de ARN de PB2, que está recubierta por los aminoácidos que contactan directamente con el casquete de ARN o los residuos de aminoácidos que posicionan los residuos de aminoácidos en contacto directo con el casquete de ARN (segunda capa de residuos de aminoácidos), p. ej. Arg332

y Ser337. En virtud de su forma, la cavidad de unión acoge el casquete de ARN o un análogo del mismo. La cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 queda definido por las coordenadas estructurales generadas por el análisis de los datos de la estructura cristalina del complejo formado entre un fragmento polipeptídico de PB2 que comprende el sitio de unión al casquete de ARN y un análogo del casquete de ARN. El término "cavidad de unión" también incluye las cavidades de unión de las variantes de fragmentos polipeptídicos de PB2.

El término "dominio de unión al casquete de ARN de PB2" se refiere a un fragmento polipeptídico mínimo de PB2 que comprende la cavidad de unión del ARN y su estructura tridimensional original.

El término "polinucleótido aislado" se refiere a polinucleótidos que han sido (i) aislados de su ambiente natural, (ii) amplificados mediante una reacción en cadena de la polimerasa, o (iii) sintetizados parcial o enteramente, y describe un polímero mono o bicatenario de desoxirribonucleótidos o ribonucleótidos e incluye moléculas de ADN y ARN, tanto hebras codificantes como no codificantes. El término comprende ADNc, ADN genómico y ADN recombinante. Un polinucleótido puede consistir en un gen entero o una porción del mismo.

El término "vector recombinante" tal y como se utiliza en la presente memoria incluye cualquier vector conocido por la persona versada en la técnica e incluye plásmidos, cósmidos, fagos vectores como el fago lambda, vectores virales de tipo adenovirus o baculovirus entre otros, o cromosomas artificiales como cromosomas artificiales bacterianos (BAC), cromosomas artificiales de levadura (YAC), o cromosomas artificiales P1 (PAC). Dichos vectores incluyen los vectores de expresión y los vectores de clonación. Los vectores de expresión comprenden plásmidos y vectores víricos y generalmente contienen una secuencia codificada deseada y secuencias de ADN apropiadas necesarias para la expresión de la secuencia codificada enlazada de forma funcional en un organismo hospedador concreto (bacteria, levadura, planta, insecto, mamífero, etc.) o en sistemas de expresión *in vitro*. Los vectores de clonación se utilizan generalmente para construir y amplificar un cierto fragmento de ADN deseado y pueden carecer de las secuencias funcionales necesarias para la expresión de dichos fragmentos de ADN deseados.

"Célula hospedadora recombinante", tal y como se utiliza en la presente memoria, se refiere a una célula hospedadora que comprende un polinucleótido que codifica un fragmento polipeptídico de interés, esto es, el fragmento polipeptídico de PB2 o variantes del mismo conforme con la invención. Este polinucleótido puede hallarse dentro de la célula hospedadora (i) disperso libremente tal cual, (ii) incorporado en un vector recombinante, o (iii) integrado en el ADN genómico o mitocondrial de la célula hospedadora. La célula recombinante se puede utilizar para la expresión de un polinucleótido de interés o para la amplificación del polinucleótido o del vector recombinante de la invención. El término "célula hospedadora recombinante" incluye la progenie de la célula original que ha sido transformada, re infectada o infectada con el polinucleótido o el vector recombinante de la invención. Una célula hospedadora recombinante puede ser una célula bacteriana como una célula de *E. coli*, una célula de levadura como *Saccharomyces cerevisiae* o *Pichia pastoris*, una célula vegetal, una célula de insecto como las células SF9 o Hi5, o una célula de mamífero. Ejemplos preferentes de células de mamífero son las células de ovario de hámster chino (CHO), células de riñón de macaco verde africano (COS), células de riñón de embrión humano (HEK293), células HELA, y similares.

Tal y como se utiliza en la presente memoria, el término "cristal" o "cristalino" denota una estructura (como un agregado sólido tridimensional) en la que las caras del plano intersectan a ángulos definidos y en la cual existe una estructura regular (como estructura interna) de la especie química constituyente. El término "cristal" puede incluir cualquiera de los siguientes: un forma cristalina física sólida como un cristal preparado experimentalmente, una estructura cristalina derivada del cristal (incluidos elementos estructurales secundarios y/o terciarios y/o cuaternarios), un modelo en 2D y/o 3D basado en la estructura cristalina, una representación esquemática de la misma o una representación diagramática de la misma, o un conjunto de datos de la misma para un ordenador. En un aspecto, el cristal puede utilizarse en técnicas de cristalografía por rayos X. En tal caso, los cristales deben soportar la exposición a los haces de rayos X y se utilizan para obtener datos del patrón de difracción necesarios para resolver la estructura cristalográfica con rayos X. Se puede caracterizar un cristal por su capacidad para difractar los rayos X con un patrón definido según alguna de las formas cristalinas representadas en T. L. Blundell and L. N. Johnson, "Protein Crystallography", Academic Press, New York (1976).

El término "celda unitaria" se refiere a un bloque paralelepípedo básico. Se puede construir el volumen entero de un cristal mediante el montaje regular de tales bloques. Cada celda unitaria comprende una representación completa de la unidad de patrón, cuya repetición da lugar al cristal.

El término "grupo espacial" se refiere a la disposición de los elementos de simetría de un cristal. En la designación de un grupo espacial la letra mayúscula indica el tipo de retícula y los otros símbolos representan las operaciones de simetría que pueden llevarse a cabo con los contenidos de la unidad asimétrica sin modificar su aspecto.

El término "coordenadas estructurales" se refiere a un conjunto de valores que definen la posición de uno o más residuos de aminoácidos con referencia a un sistema de ejes. El término se refiere a un conjunto de datos que define la estructura tridimensional de una o varias moléculas (p. ej., coordenadas cartesianas, factores de temperatura y ocupaciones). Las coordenadas estructurales pueden ser ligeramente modificadas y seguir ofreciendo estructuras tridimensionales casi idénticas. Una medida de un conjunto único de coordenadas estructurales es la

raíz cuadrada del error cuadrático medio de la estructura resultante. Las coordenadas estructurales que ofrecen estructuras tridimensionales (en concreto la estructura tridimensional de una cavidad de unión) que se diferencian entre sí en una raíz cuadrada del error cuadrático medio inferior a 3 Å, 2 Å, 1,5 Å, 1,0 Å o 0,5 Å pueden ser vistas por una persona versada en la técnica como muy similares.

5 El término "raíz cuadrada del error cuadrático medio" denota la raíz cuadrada de la media aritmética de los cuadrados de las desviaciones de la media. Es una forma de expresar la desviación o variación respecto a una tendencia o un objeto. A efectos de esta invención, la "raíz cuadrada del error cuadrático medio" define la variación en la estructura principal de una variante del fragmento polipeptídico de PB2 o de la cavidad de unión al casquete de ARN que contiene respecto a la estructura principal de PB2 o de la cavidad de unión al casquete de ARN que contiene definida por las coordenadas estructurales del complejo PB2-m<sup>7</sup>GTP de acuerdo con la Figura 18.

15 Tal y como se utiliza en la presente memoria, el término "construir un modelo informático" incluye el análisis cuantitativo y cualitativo de la estructura molecular y/o la función basado en información estructural atómica y modelos de interacción. El término "modelización" incluye modelos numéricos convencionales de minimización de energía y dinámica molecular, modelos gráficos interactivos por ordenador, modelos de mecánica molecular modificados, geometría de distancia, y otros modelos de restricciones estructurales.

20 El término "operación de ajuste" se refiere a una operación que utiliza las coordenadas estructurales de una entidad química, cavidad de unión, molécula o complejo molecular, o una parte del mismo o la misma, para asociar la entidad química con la cavidad de unión, molécula o complejo molecular, o una parte del mismo o la misma. Esto puede conseguirse mediante la colocación, rotación o traslación de la entidad química en la cavidad de unión para ajustarse a la forma y la complementariedad electrostática de la cavidad de unión. Se pueden optimizar las interacciones covalentes, las interacciones no covalentes como los puentes de hidrógeno, electrostáticas, hidrofóbicas, fuerzas de van der Waals y las interacciones electrostáticas no complementarias como interacciones de repulsión carga-carga, dipolo-dipolo y carga-dipolo. Otra alternativa consiste en minimizar la energía de deformación de la unión de la entidad química a la cavidad de unión.

30 Tal y como se utiliza la presente memoria, el término "compuesto en estudio" se refiere a un agente que comprende un compuesto, molécula o complejo que está siendo analizado por su capacidad para unirse al fragmento polipeptídico de interés, esto es, el fragmento polipeptídico de PB2 de la invención o variantes del mismo que comprenden la cavidad de unión al casquete de ARN. Los compuestos en estudios pueden ser cualquier tipo de agentes como, entre otros, péptidos, peptoides, polipéptidos, proteínas (también anticuerpos), lípidos, metales, nucleótidos, análogos de nucleótidos, nucleósidos, ácido nucleicos, moléculas pequeñas orgánicas o inorgánicas, compuestos químicos, elementos, sacáridos, isótopos, carbohidratos, agentes de imagen, lipoproteínas, glucoproteínas, enzimas, sondas analíticas, poliaminas, y combinaciones y derivados de todos los anteriores. El término "moléculas pequeñas" se refiere a moléculas dotadas de una masa molecular de entre 50 y aproximadamente 2500 Daltons, preferentemente en el intervalo de 200-800 Daltons. Además, un compuesto en estudio conforme a la presente invención puede comprender opcionalmente un marcador detectable. Dichos marcadores incluyen, entre otros, marcadores enzimáticos, radionúclidos o compuestos o elementos radioactivos, compuestos fluorescentes o metales, compuestos quimioluminiscentes y compuestos bioluminiscentes. Se pueden utilizar métodos bien conocidos para unir uno de tales marcadores detectable a un compuesto en estudio. El compuesto en estudio de la invención también puede comprender mezclas complejas de sustancias, tales como extractos que contengan productos naturales o productos procedentes de síntesis combinatorias mixtas. Éstos también pueden ser analizados y el componente que se una al fragmento polipeptídico diana puede ser purificado de la mezcla en un paso ulterior. Los compuestos en estudio pueden proceder o seleccionarse de quimiotecas de compuestos sintéticos o naturales. Por ejemplo, Maybridge Chemical Co. (Trevillet, Cornwall, Reino Unido), ChemBridge Corporation (San Diego, California, EE.UU.) o Aldrich (Milwaukee, Wisconsin, EE.UU.) ofrecen quimiotecas comerciales de compuestos sintéticos. Y, por ejemplo, TimTec LLC (Newark, Delaware, EE.UU.) ofrece una quimioteca de compuestos naturales. Otra alternativa consiste en utilizar quimiotecas de compuestos naturales en forma de extractos celulares o tisulares de bacterias, hongos, plantas o animales. Además, es posible producir sintéticamente compuestos de estudio por medio de química combinatoria en forma de compuestos individuales o de mezclas. La colección de compuestos elaborada con química combinatoria se denomina en la presente memoria quimioteca combinatoria.

55 El término "en un contexto de alto rendimiento" se refiere a pruebas y técnicas de cribado químico ultrarrápido de diversos tipos que se utilizan para cribar quimiotecas de compuestos en estudio en virtud de su capacidad para unirse al fragmento polipeptídico de interés. Normalmente las pruebas de cribado ultrarrápido se realizan en un formato multipocillo e incluyen tanto pruebas con células como sin ellas.

60 El término "anticuerpo" se refiere tanto a anticuerpos monoclonales como policlonales, es decir, cualquier proteína inmunoglobulina o porción de la misma que es capaz de reconocer un antígeno o hapteno, es decir, en el caso que nos ocupa el dominio de unión al casquete de ARN de PB2 o un péptido del mismo. Es posible producir porciones de unión al antígeno mediante técnicas de ADN recombinante o mediante la escisión enzimática o química de anticuerpos intactos. En ciertas formas de realización, las porciones que se unen al antígeno incluyen fragmentos Fab, Fab', F(ab')<sub>2</sub>, Fd, Fv, dAb, de región determinante de complementariedad (CDR), anticuerpos monocatenarios

65

(scFv), anticuerpos quiméricos como anticuerpos humanizados, diacuerpos y polipéptidos que contienen al menos una fracción del anticuerpo que es suficiente para conferir al polipéptido una unión específica al antígeno.

5 El término "sal farmacéuticamente aceptable" se refiere a una sal de un compuesto identificable con los métodos de la presente invención o a un compuesto de la presente invención. Las sales farmacéuticamente aceptables incluyen sales de adición ácida que pueden, por ejemplo, formarse mediante la mezcla de una solución de compuestos de la presente invención con una solución de un ácido farmacéuticamente aceptable como ácido clorhídrico, ácido sulfúrico, ácido fumárico, ácido maleico, ácido succínico, ácido acético, ácido benzoico, ácido cítrico, ácido tartárico, ácido carbónico o ácido fosfórico. Además, si el compuesto contiene un grupo ácido, sales farmacéuticamente  
10 aceptables adecuadas del mismo pueden incluir sales de metales alcalinos (p. ej. sales de sodio o potasio), sales de metales alcalinotérreos (p. ej. sales de calcio o magnesio) y sales formadas con ligandos orgánicos adecuados (p. ej. amonio, amonio cuaternario y cationes amino formados con contraaniones como haluros, hidróxidos, carboxilato, sulfato, fosfato, nitrato, sulfonato de alquilo y sulfonato de arilo). Ejemplos ilustrativos de sales farmacéuticamente aceptables incluyen, entre otros posibles, acetato, adipato, alginato, ascorbato, aspartato, benenosulfonato, benzoato, bicarbonato, bisulfato, bitartrato, borato, bromuro, butirato, edetato de calcio, canforato, canforsulfonato, camsilato, carbonato, cloruro, citrato, clavulanato, ciclopentanopropionato, digluconato, diclorhidrato, dodecilsulfato, edetato, edisilato, estolato, esilato, etanosulfonato, formiato, fumarato, gluceptato, glucoheptonato, gluconato, glutamato, glicerofosfato, glicolilarsanilato, hemisulfato, heptanoato, hexanoato, hexilresorcinato, hidrabamina, bromhidrato, clorhidrato, yodhidrato, 2-hidroxi-etanosulfonato, hidroxinaftoato, yoduro, isotionato, lactato, lactobionato, laurato, Laurilsulfato, malato, maleato, malonato, mandelato, mesilato, metanosulfonato, metilsulfato, mucato, 2-naftalenosulfonato, napsilato, nicotinato, nitrato, sal de amonio de N-metilglucamina, oleato, oxalato, pamoato (embonato), palmitato, pantotenato, pectinato, persulfato, 3-fenilpropionato, fosfato/difosfato, picrato, pivalato, poligalacturonato, propionato, salicilato, estearato, sulfato, subacetato, succinato, tannato, tartrato, teocloato, tosilato, trietyoduro, undecanoato, valerato, y similares (véase por ejemplo, S. M. Berge et al., "Pharmaceutical  
20 Salts", J. Pharm. Sci., 66, pp. 1-19 (1977)).

El término "excipiente" cuando se utiliza en la presente memoria pretende indicar todas las sustancias de una formulación farmacéutica que no son principios activos tales como portadores, aglutinantes, lubricantes, espesantes, tensioactivos, conservantes, emulsificantes, tampones, saborizantes o colorantes, entre otros.  
30

El término "portador farmacéuticamente aceptable" incluye, por ejemplo, carbonato de magnesio, estearato de magnesio, talco, azúcar, lactosa, pectina, dextrina, almidón, gelatina, tragacanto, metilcelulosa, carboximetilcelulosa de sodio, una cera de bajo punto de fusión, manteca de cacao, y similares.

35 Los presentes inventores han descubierto que existen fragmentos derivados de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe que son solubles y son capaces de unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo y, de ese modo, pueden ser cristalizados para obtener información estructural y también para llevar a cabo estudios de unión con proteínas recombinantes. Un aspecto de la invención consiste en proporcionar un fragmento polipeptídico soluble que (i) deriva de la subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe y (ii) es capaz de unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo. La subunidad PB2 de la ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe de la que derivan los fragmentos solubles de la invención deriva preferentemente del virus de la gripe A, B o C. La longitud mínima del fragmento soluble de la presente invención se determina por su capacidad para unirse al casquete de ARN o a un análogo del mismo. En consecuencia, se prefiere que el fragmento polipeptídico de PB2 de la invención comprenda al menos o consista en los residuos de aminoácidos 323 a 404 o 320 a 483 de la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos, p. ej. en una variante de fragmento polipeptídico de PB2; o comprenda al menos o consista en los residuos de aminoácidos 325 a 406 o 320 a 484 de la SEQ ID N.º 2 o aminoácidos correspondientes a ellos, p. ej. en una variante de fragmento polipeptídico de PB2; o comprenda al menos o consista en los residuos de aminoácidos 335 a 416 o 330 a 501 de la SEQ ID N.º 3 o aminoácidos correspondientes a ellos, p. ej. en una variante de fragmento polipeptídico de PB2. Por otro lado, se ha observado que la solubilidad de los fragmentos disminuye cuando su longitud supera ciertos límites C- y/o N-terminales. En el caso de los fragmentos solubles derivados del virus de la gripe A estos límites corresponden con referencia a la SEQ ID N.º 1 preferentemente al aminoácido N-terminal 220 o un aminoácido correspondiente a él en una variante y al aminoácido C-terminal 510 o un aminoácido correspondiente a él en una variante. En el caso de los fragmentos solubles derivados del virus de la gripe B estos límites corresponden con referencia a la SEQ ID N.º 2 preferentemente al aminoácido N-terminal 222 o un aminoácido correspondiente a él en una variante y al aminoácido C-terminal 511 o un aminoácido correspondiente a él en una variante. En el caso de los fragmentos solubles derivados del virus de la gripe C estos límites corresponden con referencia a la SEQ ID N.º 3 preferentemente al aminoácido N-terminal 227 o un aminoácido correspondiente a él en una variante y al aminoácido C-terminal 528 o un aminoácido correspondiente a él en una variante. El término "soluble" en este contexto se refiere a fragmentos polipeptídicos que pueden disolverse a una concentración de al menos 0,1 mg/ml de solvente, más preferentemente al menos 0,5 mg/ml, más preferentemente al menos 1 mg/ml, más preferentemente a 5 mg/ml o más. Los solventes adecuados son sistemas tampón que comprenden Tris-HCl a concentraciones que oscilan entre 0,01 M a 3 M, preferentemente 0,05 M a 2 M, más preferentemente 0,1 M a 1 M, a pH 3 a pH 9, preferentemente pH 4 a pH 9, más preferentemente pH 7 a pH 9 y opcionalmente un agente reductor como ditioneitol (DTT) o TCEP-HCl (clorhidrato de Tris(2-carboxietil)fosfina) a una concentración de 1 mM a 20 mM.  
60  
65

En una forma de realización preferida, dicho fragmento polipeptídico se purifica hasta un grado adecuado para su cristalización. Preferentemente tiene una pureza de al menos 95%, 96%, 98%, 99%, 99,1%, 99,2%, 99,3%, 99,4%, 99,5%, 99,6%, 99,7%, 99,8%, 99,9%. La pureza de una proteína se puede evaluar con métodos ordinarios como electroforesis en gel de poli(acrilamida) con SDS y tinción con plata o HPLC y detección a 280 nm.

En otra forma de realización preferida, el

- (i) extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 220 o superior, p. ej. 225, 230, 235, 240, 245, 250, 255, 260, 265, 270, 275, 280, 285, 290, 295, 300, 305, 310, 315, 320 o 323, y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, p. ej. 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483, de la secuencia de aminoácidos de PB2 conforme a la SEQ ID N.º1, más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 220 y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510, 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 225 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 230 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 235 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 240 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 245 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 250 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 255 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 260 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 265 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 270 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 275 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 280 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 280 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 285 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 290 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 295 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 300 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 510 o inferior, en particular 505, 500, 495, 490, 489, 488, 487, 486, 485, 484 o 483; más







518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 275 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 280 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 285 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 290 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 295 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 300 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 305 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 227 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 310 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 315 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 320 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 325 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 330 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501; o más preferentemente el extremo N-terminal de dicho fragmento polipeptídico es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 335 o superior y el extremo C-terminal es idéntico o corresponde a la posición de aminoácido 528 o inferior, p. ej. 525, 520, 519, 518, 517, 516, 515, 514, 513, 512, 511, 510, 509, 508, 507, 506, 505, 504, 503, 502 o 501.

En otra forma de realización dicho fragmento polipeptídico consiste, consiste básicamente o corresponde a una secuencia de aminoácidos seleccionada entre el grupo de secuencias de aminoácidos conforme a las SEQ ID N.º 4 a 13 y variantes de las mismas, que conservan la capacidad para asociarse con un casquete de ARN o un análogo del mismo y son solubles. En formas de realización preferidas dichos fragmentos polipeptídicos comprenden sustituciones, inserciones o deleciones de aminoácidos, preferentemente mutaciones naturales como las que se han explicado antes. Preferentemente el fragmento polipeptídico de PB2 de la invención tiene o corresponde a los residuos de aminoácidos 235 a 496 (SEQ ID N.º 4), 241 a 483 (SEQ ID N.º 5), 268 a 483 (SEQ ID N.º 6), 277 a 480 (SEQ ID N.º 7), 281 a 482 (SEQ ID N.º 8), 290 a 483 (SEQ ID N.º 9), 295 a 482 (SEQ ID N.º 10), 318 a 483 (SEQ ID N.º 11), 320 a 483 (SEQ ID N.º 12), o 323 a 404 (SEQ ID N.º 13).

En otro aspecto, la invención proporciona un complejo que comprende el fragmento polipeptídico de PB2 tal y como se describe arriba y un casquete de ARN o un análogo del mismo. Preferentemente, el análogo del casquete se selecciona entre el grupo consistente en  $m^7G$ ,  $m^7GMP$ ,  $m^7GTP$ ,  $m^7GpppG$ ,  $m^7GpppGm$ ,  $m^7GpppA$ ,  $m^7GpppAm$ ,  $m^7GpppC$ ,  $m^7GpppCm$ ,  $m^7GpppU$  y  $m^7GpppUm$ . En una forma de realización de la presente invención el fragmento polipeptídico del complejo consiste de una secuencia de aminoácidos conforme a la SEQ ID N.º 11 y el análogo del casquete es  $m^7GTP$ , poseyendo el complejo la estructura definida por las coordenadas estructurales mostradas en la Figura 18. En una forma de realización preferida, cualquiera de los complejos de la invención comprende una forma cristalina, preferentemente con el grupo espacial  $C222_1$  y dimensiones de la celda unitaria de  $a = 9,2$  nm,  $b = 9,4$  nm;  $c = 22,0$  nm  $\pm$  0,3 nm. Preferentemente dicho cristal difracta los rayos X hasta una resolución de 3,0 Å o superior, preferentemente 2,8 Å o superior, más preferentemente 2,6 Å o superior, muy preferentemente 2,4 Å o superior.

superior.

En una forma de realización, la solución de proteína adecuada para la cristalización puede incluir en solución acuosa el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo a una concentración de 5 mg/ml a 20 mg/ml, preferentemente de 8 mg/ml a 18 mg/ml, más preferentemente de 11 mg/ml a 15 mg/ml, un análogo del casquete de ARN a una concentración entre 2 mM y 10 mM, preferentemente 3 mM y 8 mM, más preferentemente 4 mM y 6 mM, opcionalmente un sistema tampón como el formado por TrisHCl en concentraciones comprendidas entre 0,01 M y 3 M, preferentemente 0,05 M a 2 M, más preferentemente 0,1 M a 1 M, de pH 3 a pH 9, preferentemente de pH 4 a pH 9, más preferentemente de pH 7 a pH 9 y opcionalmente un agente reductor como el ditioneitol (DTT) o TCEP- HCl (Clorhidrato de Tris(2-carboxietil)fosfina) a una concentración de 1 mM a 20 mM. El fragmento polipeptídico de PB2 o la variante del mismo o el complejo que comprende el fragmento polipeptídico de PB2 o la variante del mismo y un casquete de ARN o un análogo del mismo tiene preferentemente una pureza del 85% al 100%, más preferentemente del 90% al 100%, incluso más preferentemente del 95% al 100% en la solución de cristalización. Para producir cristales, la solución de proteína adecuada para la cristalización se mezcla con un volumen igual de una solución precipitante compuesta por ejemplo de formiato de sodio, sulfato de amonio, polietilenglicol de diversos tamaños. En una forma de realización preferida, el medio de cristalización comprende 0,05 a 2  $\mu$ l, preferentemente 0,8 a 1,2  $\mu$ l, de una solución de proteína adecuada para la cristalización mezclada con un volumen similar, preferentemente igual, de solución precipitante que comprende formiato de sodio 1,5 a 2 M y ácido cítrico 0,05 a 0,15 M de pH 4 a pH 5. En otra forma de realización, la solución precipitante comprende PEG 6000 al 7%, LiCl 1 M, ácido cítrico 0,1 M pH 5,0, TCEP-HCl 10 mM.

Los cristales pueden hacerse crecer por cualquier método conocido por las personas versadas en la técnica, entre ellos, las técnicas de la gota colgante y posada, gota en sándwich, diálisis y dispositivos de microlote o lote de microtubos. Para cualquier persona versada en la técnica es obvio que se pueden modificar las susodichas condiciones de cristalización para hallar otras que produzcan cristales de fragmentos polipeptídicos de PB2 de las invenciones o variantes de las mismas solas o acomplexadas con un compuesto. Tales variaciones incluyen, entre otras, el ajuste del pH, la concentración de proteína y/o la temperatura de cristalización, cambiar la identidad o la concentración de sal y/o precipitante utilizados, utilizar otro método de cristalización distinto, o añadir aditivos como detergentes (p. ej., TWEEN 20 (monolaurato), LDOA, Brij 30 (4-lauriléter)), azúcares (p. ej. glucosa, maltosa), compuestos orgánicos (p. ej. dioxano, dimetilformamida), iones lantánidos, o compuestos poli-iónicos que faciliten la cristalización. Los ensayos de cristalización de alto rendimiento también se pueden utilizar para agilizar la búsqueda o la optimización de las condiciones de cristalización.

Se puede utilizar la microsiembra para aumentar el tamaño y la calidad de los cristales. En resumen, los microcristales se trituran para obtener una solución madre de siembra. La solución madre de siembra se diluye en serie. Con una aguja, una barra de vidrio o una hebra de cabello, se añade una pequeña muestra de cada solución diluida a un conjunto de gotas equilibradas que contienen una concentración de proteína igual o inferior a la concentración necesaria para crear los cristales sin la presencia de cristales de siembra. El objetivo es concluir con un solo cristal de siembra que nucleará el crecimiento del cristal en la gota.

La manera de obtener las coordenadas estructurales del modo indicado en la Figura 18, la interpretación de las coordenadas y su utilidad para entender la estructura de la proteína, tal y como se describe en la presente memoria, son conocidas por las personas versadas en la técnica y la consulta de textos de referencia como J. Drenth, "Principles of protein X-ray crystallography", 2<sup>nd</sup> Ed., Springer Advanced Texts in Chemistry, New York (1999); y G. E. Schulz and R. H. Schirmer, "Principles of Protein Structure", Springer Verlag, New York (1985). Por ejemplo, los datos de difracción de rayos X se suelen adquirir primero a partir de cristales crioprotectados (p. ej. con glicerol 20% al 30%) congelados a 100 K, p. ej., utilizando una línea de sincrotrón o un ánodo giratorio como fuente de rayos X. A continuación, la fase problema se resolvía con un método conocido, p. ej., difracción anómala múltiple (MAD), reemplazo isomorfo múltiple (MIR), difracción anómala simple (SAD) o reemplazo molecular (MR). La subestructura se puede resolver utilizando SHELXD (Schneider and Sheldrick, 2002), las fases se pueden calcular con SHARP (Vonrhein et al., 2006), y mejorar con aplanamiento del solvente y promediación de simetría no cristalográfica (p. ej. con RESOLVE (Terwilliger, 2000)). Se puede hacer una autoconstrucción del modelo, p. ej. con ARP/wARP (Perrakis et al., 1999) y el afinamiento p. ej. con REFMAC (Murshudov, 1997). Además, las coordenadas estructurales (Figura 18) del fragmento de PB2 facilitadas por la presente invención son útiles para la determinación de la estructura de los polipéptidos de PB2 de otros géneros de la familia *Orthomyxoviridae*, o variantes de polipéptidos de PB2 que son portadoras de sustituciones, deleciones y/o inserciones de aminoácidos utilizando el método de reemplazo molecular.

Existe otro aspecto de la presente invención que proporciona un polinucleótido aislado que codifica los citados fragmentos polipeptídicos de PB2 y variantes de los mismos. Los métodos de biología molecular aplicados para obtener esos fragmentos aislados de nucleótidos son conocidos generalmente por las personas versadas en la técnica (véanse los métodos habituales de biología molecular en Sambrook et al., Eds., "Molecular Cloning: A Laboratory Manual", Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, New York (1989), que se incorpora en la presente memoria como referencia). Así por ejemplo, se puede aislar ARN de células infectadas por el virus de la gripe y ADNc generado mediante una reacción en cadena de la polimerasa con transcriptasa inversa (RT-PCR) utilizando cebadores aleatorios (p. ej., hexámeros o decámeros aleatorios) o cebadores específicos para la síntesis

de los fragmentos de interés. A continuación, los fragmentos de interés se pueden amplificar con PCR convencional utilizando cebadores específicos del fragmento.

En una forma de realización preferida los polinucleótidos aislados que codifican las formas preferidas de los fragmentos polipeptídicos de PB2 solubles derivan de las SEQ. ID N.º 23 (gripe A), 26 (gripe B) o 27 (gripe C). En una forma de realización preferida, el polinucleótido aislado que codifica el fragmento polipeptídico soluble de PB2 del virus de la gripe A o la variante del mismo deriva de la SEQ. ID N.º 25 que comprende un cambio de aminoácido de arginina por lisina en la posición 389 en comparación con la SEQ ID N.º 1. En una forma de realización aún más preferida, el polinucleótido aislado que codifica el fragmento polipeptídico soluble de PB2 del virus de la gripe A o variantes del mismo deriva de la SEQ ID N.º 26 que es una secuencia de ADN optimizada para el uso de codones de *E. coli*. En ese contexto, derivados se refiere al hecho de que las SEQ ID N.º 23, 24, 25, 26 o 27 codifican los polipéptidos enteros de PB2 y, por tanto, los polinucleótidos que codifican los fragmentos polipeptídicos de PB2 comprenden deleciones en los extremos 5' y 3' del polinucleótido según lo requerido por el fragmento polipeptídico de PB2 codificado correspondiente.

En una forma de realización, la presente invención se refiere a un vector recombinante que comprende dicho polinucleótido aislado. Las personas versadas en la técnica conocen bien las técnicas para la incorporación de las secuencias de polinucleótidos de interés a los vectores (véase también Sambrook et al., 1989). Tales vectores incluyen cualquier vector recombinante conocido por las personas versadas en la técnica e incluyen plásmidos, cósmidos, fagos vectores como el fago lambda, vectores virales de tipo adenovirus o baculovirus entre otros, o cromosomas artificiales como cromosomas artificiales bacterianos (BAC), cromosomas artificiales de levadura (YAC), o cromosomas artificiales P1 (PAC). Dichos vectores pueden ser vectores de expresión adecuados para la expresión en procariontes o eucariotes. Dichos plásmidos pueden incluir un origen de replicación (*ori*), un sitio de clonación múltiple y secuencias reguladoras como promotores (constitutivos o inducibles), sitios de inicio de la transcripción, sitios de unión a ribosoma, sitios de terminación de transcripción, señal de poliadenilación, y marcadores de selección como marcadores de resistencia antibióticos o auxótrofos basados en la complementación de una mutación o deleción. En una forma de realización la secuencia polinucleotídica de interés está enlazada de forma funcional con las secuencias reguladoras.

En otra forma de realización, dicho vector incluye secuencias de nucleótidos que codifican etiquetas de epítopos, péptidos o proteínas que facilitan la purificación de los fragmentos polipeptídicos de interés. Tales etiquetas de epítopos, péptidos o proteínas incluyen, entre otras, etiquetas de hemaglutinina (HA), FLAG, myc, poli-His, glutatión-S-transferasa (GST), proteína de unión a maltosa (MBP), NusA y tiorredoxina, o etiquetas de proteínas fluorescentes como la proteína fluorescente verde (potenciada) ((E)GFP), proteína fluorescente amarilla (potenciada) ((E)YFP), proteína fluorescente roja (RFP) derivada de *Discosoma* (DsRed) o monomérica (mRFP), proteína fluorescente azul (CFP), y similares. En una forma de realización preferida, las etiquetas de epítopos, péptidos o proteínas pueden eliminarse del fragmento polipeptídico de interés utilizando por ejemplo una proteasa como trombina, Factor Xa, PreScission, proteasa TEV, y similares. Las dianas reconocidas por tales proteasas son bien conocidas por las personas versadas en la técnica. En otra forma de realización, el vector incluye secuencias funcionales que conducen a la secreción del fragmento polipeptídico de interés en el medio de cultivo de las células hospedadoras recombinantes o en el espacio periplasmático de las bacterias. El fragmento de la secuencia señal codifica normalmente un péptido señal que comprende aminoácidos hidrófobos que dirigen la secreción de la proteína de la célula. La proteína segregada acaba en el medio de crecimiento (bacterias grampositivas) o en el espacio periplasmático, localizado entre la membrana interna y externa de la célula bacteriana (bacterias gramnegativas). Preferentemente existen sitios de procesamiento codificados entre el fragmento del péptido señal y el gen extraño, que pueden escindirse *in vivo* o *in vitro*.

En otro aspecto, la presente invención proporciona una célula hospedadora recombinante que comprende dicho polinucleótido aislado o dicho vector recombinante. Las células hospedadoras recombinantes pueden ser células procariontes de arqueobacterias o bacterias o bien células eucariotas de levadura, planta, insecto o mamífero. En una forma de realización preferida la célula hospedadora es una célula bacteriana como una célula de *E. coli*. Las personas versadas en la técnica conocen bien los métodos para introducir dicho polinucleótido aislado o dicho vector recombinante en células hospedadoras de esos tipos. Así por ejemplo, las células bacterianas se pueden transformar fácilmente mediante electroporación o transformación química con el método del cloruro de calcio, por ejemplo. Las células de levadura se pueden transformar con electroporación o el método de transformación con acetato de litio. Otras células eucariotas se pueden transfectar, por ejemplo, con kits comerciales de transfección con lisosomas como Lipofectamine™ (Invitrogen), kits comerciales de transfección con lípidos como Fugene (Roche Diagnostics), transfección mediante polietilenglicol, precipitación con fosfato de calcio, pistola génica (biolística), electroporación o infección vírica. En una forma de realización preferida de la invención, la célula hospedadora recombinante expresa el fragmento polinucleotídico de interés. En una forma de realización más preferida, dicha expresión da lugar a fragmentos polipeptídicos solubles de la invención. Estos fragmentos polipeptídicos se pueden purificar con métodos de purificación de proteínas bien conocidos por las personas versadas en la técnica, opcionalmente utilizando las etiquetas de epítopos, péptidos o proteínas antes citadas.

En otro aspecto, la presente invención se refiere a un método para identificar compuestos que se asocian con toda o parte de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o una variante polipeptídica de la cavidad de unión de PB2,

que comprende los siguientes pasos (a) construir un modelo informático de dicha cavidad de unión definido por las coordenadas estructurales del complejo tal y como se muestra en la Figura 18; (b) selección de un compuesto de unión potencial mediante un método escogido entre los siguientes:

- 5 (i) ensamblaje de fragmentos moleculares para formar dicho compuesto,
- (ii) selección de un compuesto a partir de una base de datos de moléculas pequeñas, y
- 10 (iii) diseño *de novo* de ligandos de dicho compuesto;
- (c) emplear medios informáticos para realizar una operación de ajuste entre los modelos informáticos de dicho compuesto y dicha cavidad de unión con el fin de ofrecer una configuración de energía mínima de dicho compuesto en la cavidad de unión; y (d) evaluar los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación entre dicho compuesto y el modelo de cavidad de unión, en la cual se evalúa la capacidad de dicho compuesto para asociarse con dicha cavidad de unión.

Por primera vez, la presente invención permite la utilización de técnicas de diseño molecular para identificar, seleccionar o diseñar compuestos de unión potenciales para la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o variantes polipeptídicas de las cavidades de unión al casquete de ARN de PB2, preferentemente inhibidores de la unión al casquete de ARN, basándose en las coordenadas estructurales de dicha cavidad de unión conforme a la Figura 18. Un modelo predictivo de ese tipo es valioso si se tienen en cuenta los elevados costes que acarrea la preparación y el análisis de los numerosos compuestos diferentes que podrían unirse a dicha cavidad de unión. Para utilizar las coordenadas estructurales generadas por el fragmento polipeptídico de PB2 en el complejo con el análogo del casquete de ARN es necesario convertir las coordenadas estructurales en una forma tridimensional. Esto se consigue por medio de programas informáticos comerciales que son capaces de generar representaciones gráficas tridimensionales de moléculas o partes de las mismas a partir de un conjunto de coordenadas estructurales. Un ejemplo de tales programas informáticos es MODELER (A. Sali and T. L. Blundell, *J. Mol. Biol.*, 234, pp. 779-815 (1993) implementado en el paquete de software Insight II Homology (Insight II (97.0), Molecular Simulations Incorporated, San Diego, California, EE.UU.).

Una persona versada en la técnica puede utilizar varios métodos para cribar entidades químicas o fragmentos en función de su capacidad para unirse a la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o variantes polipeptídicas de PB2. Este proceso puede comenzar con una inspección visual de, por ejemplo, un modelo informático tridimensional de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 basado en las coordenadas estructurales conforme a la Figura 18. Los fragmentos o compuestos químicos seleccionados pueden entonces posicionarse con diversas orientaciones o acoplarse en el interior de la cavidad de unión. El acoplamiento se puede efectuar con programas informáticos como Cerius, Quanta y Sybyl (Tripos Associates, St. Louis, Missouri, EE.UU.), seguido por las operaciones de minimización de energía y dinámica molecular con campos de fuerza de dinámica molecular estándar con OPLS-AA, CHARMM y AMBER. Otros programas informáticos especializados que pueden ayudar a las personas versadas en la técnica en el proceso de selección de compuestos o fragmentos adecuados incluyen, por ejemplo: (i) AUTODOCK (D. S. Goodsell et al., "Automated Docking of Substrates to Proteins by Simulated Annealing", *Proteins: Struct., Funct., Genet.*, 8, pp. 195-202 (1990); AUTODOCK está disponible a través de The Scripps Research Institute, La Jolla, California, EE.UU.) y (ii) DOCK (I. D. Kuntz et al., "A Geometric Approach to Macromolecule-Ligand Interactions", *J. Mol. Biol.*, 161, pp. 269-288 (1982); DOCK está disponible a través de la Universidad de California, San Francisco, California, EE.UU.).

Una vez seleccionados los compuestos o fragmentos adecuados, estos se pueden diseñar o ensamblar para formar un solo compuesto o complejo. La construcción manual del modelo se lleva a cabo con programas informáticos como Quanta o Sybyl. Programas útiles para ayudar a las personas versadas en la técnica a conectar los compuestos o fragmentos individuales son, por ejemplo: (i) CAVEAT (P. A. Bartlett et al., "CAVEAT: A Program to Facilitate the Structure-Derived Design of Biologically Active Molecules", in *Molecular Recognition in Chemical and Biological Problems*, Special Publication, Royal Chem. Soc, 78, pp. 182-196 (1989); G. Lauri and P. A. Bartlett, "CAVEAT: A Program to Facilitate the Design of Organic Molecules", *J. Comp. Aid. Mol. Des.*, 8, pp. 51-66 (1994); CAVEAT está disponible a través de la Universidad de California, Berkeley, California, EE.UU.), (ii) sistemas de bases de datos 3D como ISIS (MDL Information Systems, San Leandro, California, EE.UU.; revisado en Y. C. Martin, "3D Database Searching in Drug Design", *J. Med. Chem.*, 35, pp. 2145-2154 (1992)), y (iii) HOOK (M. B. Eisen et al., "HOOK: A Program for Finding Novel Molecular Architectures that Satisfy the Chemical and Steric Requirements of a Macromolecule Binding Site", *Proteins: Struct., Funct., Genet.*, 19, pp. 199-221 (1994); HOOK está disponible a través de Molecular Simulations Incorporated, San Diego, California, EE.UU.).

Otra estrategia que permite esta invención consiste en el cribado informático de bases de datos de moléculas pequeñas de compuestos que podrán unirse a toda o a una parte de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a las cavidades de unión de las variantes polipeptídicas de PB2. En este cribado, la calidad del ajuste de tales compuestos a la cavidad de unión se puede juzgar por la complementariedad de la forma o estimando la energía de interacción (E. C. Meng et al., *J. Comp. Chem.*, 13, pp. 505-524 (1992)).

Otra alternativa consiste en diseñar *de novo* un compuesto de unión potencial para la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2, preferentemente un inhibidor de la unión a dicho casquete, partiendo de la estructura 3D del fragmento polipeptídico de PB2 acomplejado con el análogo del casquete de ARN conforme a la Figura 18. Las personas versadas en la técnica tienen a su disposición diversos métodos para el diseño de ligandos *de novo*. Tales métodos incluyen: (i) LUDI (H.-J. Bohm, "The Computer Program LUDI: A New Method for the De Novo Design of Enzyme Inhibitors", J. Comp. Aid. Mol. Des., 6, pp. 61-78 (1992); LUDI está disponible a través de Molecular Simulations Incorporated, San Diego, California, EE.UU.), (ii) LEGEND (Y. Nishibata and A. Itai, Tetrahedron, 47, pp. 8985-8990 (1991); LEGEND está disponible a través de Molecular Simulations Incorporated, San Diego, California, EE.UU.), (iii) LeapFrog (disponible a través de Tripos Associates, St. Louis, Missouri, EE.UU.), (iv) SPROUT (V. Gillet et al., "SPROUT: A Program for Structure Generation", J. Comp. Aid. Mol. Des., 7, pp. 127-153 (1993); SPROUT está disponible a través de la University of Leeds, Reino Unido), (v) GROUPEBUILD (S. H. Rotstein and M. A. Murcko "GroupBuild: A Fragment-Based Method for De Novo Drug Design", J. Med. Chem., 36, pp. 1700-1710 (1993)), y (vi) GROW (J. B. Moon and W. J. Howe, "Computer Design of Bioactive Molecules: A Method for Receptor-Based De Novo Ligand Design", Proteins, 11, pp 314-328 (1991)).

Asimismo se han descrito varias técnicas de modelización molecular que pueden servir de ayuda a la persona versada en la técnica en el diseño y la modelización *de novo* de compuestos que pueden interaccionar potencialmente con la cavidad de unión al casquete de ARN, y estas incluyen, por ejemplo, N. C. Cohen et al., "Molecular Modeling Software and Methods for Medicinal Chemistry", J. Med. Chem., 33, pp. 883-894 (1990); M. A. Navia and M. A. Murcko, "The Use of Structural Information in Drug Design", Curr. Opin.Struct. Biol., 2, pp. 202-210 (1992); L. M. Balbes et al., "A Perspective in Modern Methods in Computer-Aided Drug Design", Reviews in Computational Chemistry, Vol. 5, K. B. Lipkowitz and D. B. Boyd, Eds., VCH, New York, pp. 37-380 (1994); W. C. Guida, "Software for Structure-Based Drug Design", Curr. Opin.Struct.Biol., 4, pp. 777-781 (1994).

Una molécula diseñada o seleccionada para la unión a la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante de PB2 se puede optimizar con medios informáticos para que en su estado unido carezca preferentemente de la interacción de repulsión electrostática con la región diana. Tales interacciones no complementarias (p. ej., electrostáticas) incluyen las interacciones de repulsión carga-carga, dipolo-dipolo y carga-dipolo. Específicamente, la suma de todas las interacciones electrostáticas entre el compuesto de unión y la cavidad de unión en el estado unido contribuye preferentemente de forma neutral o favorable a la entalpía de unión. La técnica dispone de programas informáticos específicos para evaluar la energía de deformación del compuesto y la interacción electrostática. Ejemplos de programas adecuados son: (i) Gaussian 92, revisión C (M. J. Frisch, Gaussian, Incorporated, Pittsburgh, Filadelfia, EE.UU.), (ii) AMBER, versión 4.0 (P. A. Kollman, University of California, San Francisco, California, EE.UU.), (iii) QUANTA/CHARMM (Molecular Simulations Incorporated, San Diego, California, EE.UU.), (iv) OPLS-AA (W. L. Jorgensen, "OPLS Force Fields", Encyclopedia of Computational Chemistry, Schleyer, Ed., Wiley, New York (1998) Vol. 3, pp. 1986-1989), y (v) Insight II/Discover (Biosym Technologies Incorporated, San Diego, California, EE.UU.). Estos programas se pueden implementar, por ejemplo, con una estación de trabajo Silicon Graphics, IRIS 4D/35 o IBM RISC/6000 model 550. Las personas versadas en la técnica conocen otros sistemas de hardware y otros paquetes de programas informáticos.

Una vez seleccionada o diseñada una molécula de interés, según lo descrito arriba, es posible hacer sustituciones en algunos de sus átomos o grupos laterales con el fin de mejorar o modificar sus propiedades de unión. En general, las sustituciones iniciales son conservadoras, es decir, el grupo sustituto tiene aproximadamente el mismo tamaño, forma, hidrofobicidad y carga que el grupo original. Por supuesto, se entiende que conviene evitar los componentes que son conocidos en la técnica por alterar la conformación. Tales compuestos químicos sustituidos pueden entonces ser analizados en función de su eficiencia para encajar en la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o en una cavidad de unión de una variante de PB2 con los mismos métodos informáticos descritos antes en detalle.

En una forma de realización del susodicho método de la invención, la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o la cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2 comprende los aminoácidos Phe323, His357 y Phe404 de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, Phe404, Phe325, Phe330 y Phe363 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330 y Phe363 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361 y Lys376 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Lys339, Arg355, Asn429 e His432 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361 y Lys376 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma más de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma más de realización, dicha cavidad de unión comprende los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Lys339, Arg355, Asn429 y His432 conforme a la SEQ ID N.º 1 o aminoácidos correspondientes a ellos. En otra forma más de realización,







En un aspecto, la presente invención proporciona un método para el cribado informático según el método antes descrito de compuestos capaces de asociarse con una cavidad de unión que es una variante de la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 conforme a la Figura 18. En una forma de realización dicha variante de dicha cavidad de unión presenta una raíz cuadrada del error cuadrático medio de los átomos de la estructura principal de los aminoácidos Phe323, His357 y Phe404; de los aminoácidos Phe323, Phe404, Phe325, Phe330 y Phe363; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330 y Phe363; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361 y Lys376; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Ser 320, Arg332, Ser337 y Gln406; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361 y Lys376; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361, Lys376, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406, Lys339, Arg355, Asn429 y His432; de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406, Lys339, Arg355, Asn429 y His432, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404 y Met431, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363 y Met431, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376 y Met431, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406 y Met431, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe330, Phe363, Glu361, Lys376, Ser320, Arg332, Ser337, Gln406, Lys339, Arg355, Asn429, His432 y Met431, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Glu361 y Lys376, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe363, Glu361 y Lys376, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe363, Glu361 y Lys376, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325, Phe363, Glu361 y Ser337, de los aminoácidos His357, Phe404, Phe325, Glu361, Lys376, Arg332, Ser337 y Met431, de los aminoácidos His357, Phe404, Phe325, Glu361, Lys376, Arg332, Ser337, Met431, Lys339, Arg355, Asn429 y His432, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404 y Phe325, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404 y Glu361, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404 y Lys376, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Glu361 y Lys376, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325 y Glu361, de los aminoácidos Phe323, His357, Phe404, Phe325 y Lys376, las susodichas combinaciones de aminoácidos incluyen opcionalmente el aminoácido Met431 conforme a la Figura 18 de no más de 3 Å. En otra forma de realización, dicha raíz cuadrada del error cuadrático medio no supera los 2,5 Å. En otra forma de realización, dicha raíz cuadrada del error cuadrático medio no supera los 2 Å. En otra forma de realización, dicha raíz cuadrada del error cuadrático medio no supera los 1,5 Å. En otra forma de realización, dicha raíz cuadrada del error cuadrático medio no supera 1 Å. En otra forma de realización, dicha raíz cuadrada del error cuadrático medio no supera 0,5 Å.

En una forma de realización preferida,  $m^7$ GTP está flanqueada por la His357 en el lado del solvente y por un grupo de cinco fenilalaninas en el lado de la proteína, principalmente Phe323 y Phe404, pero también Phe325, Phe330 y Phe363. En esta forma de realización preferida, el reconocimiento específico de la base de guanosina se consigue principalmente mediante un puente de hidrógeno entre la Glu361 con las posiciones N2 y N1 de la guanina, que también ayuda a neutralizar la carga positiva deslocalizada de  $m^7$ GTP. También la Lys376 establece un largo puente de hidrógeno con la O6. Existen dos moléculas de agua bien ordenadas e internadas en la cavidad del ligando que interactúan con Glu361, Lys376 y Gln406 pero no directamente con el ligando. Residuos importantes de la segunda capa son preferentemente Arg332 y Ser337 que permanecen unidas por un puente de hidrógeno con la His357. Dentro de la distancia del puente de hidrógeno del N2 de la base se encuentra una molécula de agua o bien Ser320. El grupo metilo N7 mantiene un enlace de van der Waals con la cadena lateral de la Gln406 (3,4 Å) y el oxígeno del carbonilo de Phe404 (3,4 Å) está en contacto con la cadena lateral de la Met431 un poco más alejada. En esta forma de realización, el trifosfato está flexionado hacia la base. El alfa-fosfato interactúa con His432 y Asn429 y el gamma-fosfato interactúa con los residuos básicos His357, Lys339 y Arg355.

Si la modelización informática conforme a los susodichos métodos descritos en la presente memoria indica la unión de un compuesto a la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a la cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2, dicho compuesto puede sintetizarse y opcionalmente la capacidad de dicho compuesto para unirse a dicha cavidad de unión puede analizarse *in vitro* o *in vivo* comprendiendo el paso adicional de (e) sintetizar dicho compuesto, y opcionalmente (f) poner en contacto dicho compuesto con el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo o con la célula hospedadora recombinante de la invención y un casquete de ARN o un análogo del mismo para determinar la capacidad de dicho compuesto para inhibir la unión entre dicho fragmento polipeptídico de PB2 y dicho casquete de ARN o análogo del mismo. La calidad del ajuste de tales compuestos con la cavidad de unión se puede juzgar a través de la complementariedad de la forma o de la energía de interacción estimada (E. C. Meng et al., J. Comp. Chem., 13, pp. 505-524 (1992)). Los métodos para sintetizar dichos compuestos son bien conocidos por las personas versadas en la técnica, y tales compuestos también pueden adquirirse comercialmente. A continuación se describen ejemplos de métodos para determinar los efectos inhibitorios sobre la unión al casquete de ARN de los compuestos identificados.

Un compuesto es identificable por el susodicho método, con la condición de que dicho compuesto no sea ninguno de los análogos del casquete de ARN seleccionados del grupo consistente en: m<sup>7</sup>G, m<sup>7</sup>GMP, m<sup>7</sup>GTP, m<sup>7</sup>GpppG, m<sup>7</sup>GpppGm, m<sup>7</sup>GpppA, m<sup>7</sup>GpppAm, m<sup>7</sup>GpppC, y m<sup>7</sup>GpppCm, m<sup>7</sup>GpppU, y m<sup>7</sup>GpppUm o las moléculas pequeñas inhibitoras de la unión al casquete de ARN 2-amino-7-bencil-9-(4-hidroxi-butil)-1,9-dihidro-purín-6-ona (RO0794238, Hooker et al., 2003) o T-705 (Furuta et al., 2005) y sea capaz de unirse a la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2. Un compuesto es identificable por el susodicho método, con la condición de que dicho compuesto no sea ninguno de los análogos del casquete de ARN seleccionados del grupo consistente en: m<sup>7</sup>G, m<sup>7</sup>GMP, m<sup>7</sup>GTP, m<sup>7</sup>GpppG, m<sup>7</sup>GpppGm, m<sup>7</sup>GpppA, m<sup>7</sup>GpppAm, m<sup>7</sup>GpppC, y m<sup>7</sup>GpppCm, m<sup>7</sup>GpppU y m<sup>7</sup>GpppUm o las moléculas pequeñas inhibitoras de la unión al casquete de ARN 2-amino-7-bencil-9-(4-hidroxi-butil)-1,9-dihidro-purín-6-ona o T-705 y sea capaz de inhibir la unión entre el fragmento polipeptídico de PB2 y el casquete de ARN o un análogo del mismo. Los compuestos pueden ser cualquier tipo de agente como, entre otros, péptidos, peptoides, polipéptidos, proteínas (también anticuerpos), lípidos, metales, nucleótidos, nucleósidos, nucleósidos, ácido nucleicos, moléculas pequeñas orgánicas o inorgánicas, compuestos químicos, elementos, sacáridos, isótopos, carbohidratos, agentes de imagen, lipoproteínas, glucoproteínas, enzimas, sondas analíticas, poliaminas, y combinaciones y derivados de todos los anteriores. El término "moléculas pequeñas" se refiere a moléculas dotadas de una masa molecular de entre 50 y aproximadamente 2500 Daltons, preferentemente en el intervalo de 200-800 Daltons. Además, un compuesto en estudio puede comprender opcionalmente un marcador detectable. Dichos marcadores incluyen, entre otros, marcadores enzimáticos, radionúclidos o compuestos o elementos radioactivos, compuestos fluorescentes o metales, compuestos quimioluminiscentes y compuestos bioluminiscentes.

En otro aspecto, la presente invención proporciona un método para identificar compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2, que comprende los siguientes pasos: (i) poner en contacto el fragmento polipeptídico de PB2 o la célula hospedadora recombinante de la invención con un compuesto en estudio y (ii) analizar la capacidad de dicho compuesto en estudio para unirse al fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo.

En una forma de realización, la interacción entre el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo y un compuesto en estudio puede ser analizada mediante un ensayo de *pull-down*. Por ejemplo, el fragmento polipeptídico de PB2 puede ser purificado y puede ser inmovilizado en microperlas. En una forma de realización, el fragmento polipeptídico de PB2 inmovilizado en las microperlas se puede poner en contacto, por ejemplo, con (i) otra proteína, fragmento polipeptídico o péptido purificados, (ii) una mezcla de proteínas, fragmentos polipeptídicos o péptidos, o (iii) un extracto celular o tisular, y la unión de proteínas, fragmentos polipeptídicos o péptidos puede verificarse con una electroforesis en gel de poliacrilamida combinada con tinción de Coomassie o Western blot. Los compuestos de unión desconocidos se pueden identificar con análisis de espectrometría de masas.

En otra forma de realización, la interacción entre el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo y un compuesto en estudio puede ser analizada con un experimento basado en un ensayo de enzoinmunoanálisis de adsorción (ELISA). En una forma de realización, el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo conforme a la invención se pueden inmovilizar sobre la superficie de una placa de ELISA y ponerse en contacto con el compuesto en estudio. La unión del compuesto en estudio puede ser verificada, por ejemplo, en el caso de proteínas, polipéptidos, péptidos y epítomos etiquetados mediante anticuerpos específicos dirigidos contra el compuesto en estudio o la etiqueta de epítomo. Estos anticuerpos pueden acoplarse directamente con una enzima o detectarse con un anticuerpo secundario acoplado a dicha enzima que –en combinación con los sustratos adecuados– genera reacciones quimioluminiscentes (p. ej. peroxidasa de rábano picante) o colorimétricas (p. ej. fosfatasa alcalina). En otra forma de realización, la unión de compuestos que no pueden ser detectados con anticuerpos puede verificarse con marcadores acoplados directamente a los compuestos en estudio. Dichos marcadores pueden incluir marcadores enzimáticos, radionúclidos o compuestos o elementos radioactivos, compuestos fluorescentes o metales, compuestos quimioluminiscentes y compuestos bioluminiscentes. En otra forma de realización, los compuestos en estudio pueden ser inmovilizados sobre la placa de ELISA y ponerse en contacto con el fragmento polipeptídico soluble de PB2 o variantes del mismo conforme a la invención. La unión de dicho polipéptido puede verificarse con un anticuerpo específico contra el fragmento polipeptídico de PB2 y reacciones quimioluminiscentes o colorimétricas como las descritas arriba.

En otra forma de realización, se pueden incubar fragmentos polipeptídicos solubles y purificados de PB2 con una matriz de péptidos y se puede analizar la unión de los fragmentos polipeptídicos de PB2 a determinados círculos de péptidos (*spots*) que corresponden a una secuencia peptídica específica, por ejemplo, con anticuerpos específicos del polipéptido de PB2, anticuerpos que están dirigidos contra una etiqueta de epítomo fusionada con el fragmento polipeptídico de PB2, o mediante una señal fluorescente emitida por una etiqueta fluorescente acoplada al fragmento polipeptídico de PB2.

En otra forma de realización, la célula hospedadora recombinante conforme a la presente invención se pone en contacto con un compuesto en estudio. Esto se puede conseguir mediante la coexpresión de proteínas o polipéptidos en estudio y la verificación de la interacción, por ejemplo, mediante transferencia de energía de resonancia de fluorescencia (FRET) o co-inmunoprecipitación. En otra forma de realización pueden añadirse directamente compuestos en estudio marcados al medio que contiene las células hospedadoras recombinantes. El

potencial del compuesto en estudio para atravesar las membranas y unirse al fragmento polipeptídico de PB2 se puede verificar, por ejemplo, mediante inmunoprecipitación de dicho polipéptido y comprobando la presencia del marcador.

5 En una forma de realización preferida, el susodicho método para identificar compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2 comprende el paso adicional de añadir un casquete de ARN o un análogo del mismo. En otra forma de realización de dicho método, se analiza la capacidad de dicho compuesto en estudio para unirse a PB2 en presencia de dicho casquete de ARN o del análogo del mismo o la capacidad de dicho compuesto en estudio para inhibir la unión de dicho casquete de ARN o un análogo del mismo a PB2. Se considera que un compuesto inhibe la unión al casquete de ARN o a un análogo del mismo si dicho compuesto a la misma concentración molar que el casquete de ARN o el análogo del mismo reduce la unión más de un 20%, más de un 30%, más de un 40%, más de un 50%, preferentemente más de un 60%, preferentemente más de un 70%, preferentemente más de un 80%, preferentemente más de un 90%. En formas de realización preferidas, los susodichos experimentos de *pull-down*, ELISA, matriz de péptidos, FRET y co-inmunoprecipitación pueden llevarse a cabo en presencia de una estructura de casquete de ARN o un análogo del mismo, preferentemente una estructura de casquete de ARN marcada o un análogo del mismo marcado, en presencia o en ausencia de un compuesto en estudio. En una forma de realización, el casquete de ARN o un análogo del mismo se añaden antes de añadir dicho compuesto en estudio. En otra forma de realización, el casquete de ARN o un análogo del mismo se añaden al mismo tiempo que el compuesto en estudio. En otra forma de realización, el casquete de ARN o un análogo del mismo se añaden después de añadir dicho compuesto en estudio.

En una forma de realización preferida, se puede analizar la capacidad del compuesto en estudio identificable para interferir con la interacción de un fragmento polipeptídico de PB2 de la invención con un casquete de ARN o un análogo del mismo incubando dicho fragmento polipeptídico con resina de Sefarosa 4B con 7-metil-GTP (GE Healthcare) con y sin dicho compuesto y comparando, preferentemente de manera cuantitativa, la cantidad de fragmento polipeptídico de PB2 unida con y sin dicho compuesto, p. ej. con una electroforesis PAGE con SDS y tinción de Coomassie o con un Western blot.

30 Se evalúa la capacidad del casquete de ARN o de un análogo del mismo para asociarse con el fragmento de PB2 o una variante del mismo conforme a la presente invención en presencia o ausencia del compuesto en estudio. En una forma de realización, esto puede llevarse a cabo con un análogo del casquete de ARN marcado con fluoresceína, la 7-metil-guanosina monofosfato ( $m^7GMP$ ) marcada con fluoresceína, en un ensayo de polarización fluorescente como el descrito por Natarajan et al. (2004). En otra forma de realización se puede utilizar como alternativa un análogo de casquete fluorescente modificado con diol ribosa, antraniloil- $m^7GTP$ , en un ensayo de espectroscopía de fluorescencia como el expuesto por Ren et al. (1996). En otra forma de realización, casquetes de ARN marcados radioactivamente pueden incubarse con el fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo en presencia o ausencia de un compuesto en estudio, pudiéndose añadir el casquete de ARN antes, simultáneamente o después del compuesto en estudio. La reacción de unión al casquete se fija por entrecruzamiento por la acción de rayos UV, y después de procede a la desnaturalización y análisis con electroforesis en gel del modo descrito por Hooker et al. (2003). En otra forma de realización, los fragmentos polipeptídicos de PB2 de la invención se pueden inmovilizar sobre una placa de microtitulación, incubar con un casquete de ARN marcado o un análogo del mismo marcado en presencia o ausencia de un compuesto en estudio, pudiéndose añadir el casquete de ARN o el análogo del mismo antes, al mismo tiempo o después que el compuesto en estudio; la unión al casquete se analiza verificando la presencia del marcaje después del lavado a conciencia de la placa. La intensidad de las señales emitidas por el marcador del casquete de ARN o del análogo del mismo en los pocillos que contienen el compuesto en estudio se comparan con la intensidad de las señales de dicho marcador sin el compuesto en estudio y se considera que dicho compuesto inhibe la unión del casquete de ARN o del análogo del mismo si la unión se reduce más de un 50%, preferentemente más de un 60%, preferentemente más de un 70%, preferentemente más de un 80%, preferentemente más de un 90% tal y como se describe arriba.

En una forma de realización preferida, el método antes descrito para identificar compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2, y que preferentemente inhiben la unión de los casquetes de ARN o análogos de los mismos, se lleva a cabo en un contexto de alto rendimiento. En una forma de realización preferida, dicho método se lleva a cabo en una placa de microtitulación con múltiples pocillos tal y como se describe arriba utilizando fragmentos polipeptídicos de PB2 inmovilizados o variantes de los mismos conforme a la presente invención y casquetes de ARN marcados o análogos de los mismos marcados. En una forma de realización preferida, los compuestos en estudio proceden de quimiotecas de compuestos sintéticos o naturales. Por ejemplo, Maybridge Chemical Co. (Trevillet, Cornwall, Reino Unido), ChemBridge Corporation (San Diego, California, EE.UU.) o Aldrich (Milwaukee, Wisconsin, EE.UU.) ofrecen quimiotecas comerciales de compuestos sintéticos. Y, por ejemplo, TimTec LLC (Newark, Delaware, EE.UU.) ofrece una quimioteca de compuestos naturales. Otra alternativa consiste en utilizar quimiotecas de compuestos naturales en forma de extractos bacterianos, fúngicos, vegetales o animales. También es posible producir sintéticamente compuestos en estudio por medio de química combinatoria en forma de compuestos individuales o de mezclas. Los casquetes de ARN o los análogos de los mismos se pueden añadir antes, al mismo tiempo o después que el compuesto de la quimioteca. La capacidad del compuesto para inhibir la unión al casquete de ARN se puede evaluar

tal y como se describe arriba.

En otra forma de realización, el efecto inhibitorio del compuesto identificado sobre el ciclo vital del virus de la gripe se puede analizar en condiciones *in vivo*. Una línea celular que sea sensible a la infección por el virus de la gripe como las células renales embrionarias humanas 293T, células renales caninas Madin-Darby o fibroblastos de embrión de pollo pueden ser infectadas con el virus de la gripe en presencia o ausencia del compuesto identificado. En una forma de realización preferida, el compuesto identificado puede añadirse al medio de cultivo de las células en diversas concentraciones. La formación de calvas de lisis víricas se puede utilizar para interpretar la capacidad infecciosa del virus de la gripe y pueden compararse entre células que han sido tratadas con el compuesto identificado y células que no lo han sido.

En otra forma de realización de la invención, el compuesto en estudio aplicado en cualquiera de los susodichos métodos es una molécula pequeña. En una forma de realización preferida, dicha molécula pequeña procede de una quimioteca, p. ej., de una quimioteca de moléculas pequeñas inhibitorias. En otra forma de realización, dicho compuesto en estudio es un péptido o una proteína. En una forma de realización preferida, dicho péptido o proteína procede de una quimioteca de péptidos o proteínas.

En otra forma de realización de los susodichos métodos para la identificación por medios informáticos y también *in vitro* de compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN del fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo conforme a la invención y/o que inhiben la unión del casquete de ARN a dicha cavidad de unión, dichos métodos comprenden además el paso de formular el compuesto identificable o una sal farmacéuticamente aceptable del mismo con uno o más excipientes y/o un portador o portadores farmacéuticamente aceptables. En otro aspecto la presente invención proporciona una composición farmacéutica que se puede fabricar conforme al susodicho método. Un compuesto conforme a la presente invención se puede administrar solo pero, en terapéutica humana, en general se administrará mezclado con un excipiente, diluyente o portador farmacéutico adecuado y seleccionado en función de la vía de administración prevista y la práctica farmacéutica habitual (véase más adelante).

En el aspecto de la modelización o cribado informático de un compuesto de unión para la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante de PB2, puede ser posible introducir en la molécula de interés grupos químicos que puedan ser ventajosos para una molécula que va a ser administrada como un producto farmacéutico. Por ejemplo, es posible incorporar o eliminar de la molécula de interés grupos químicos que si bien pueden no afectar directamente a la unión de dicha molécula a la zona diana sí pueden contribuir, por ejemplo, a la solubilidad general de la molécula en un portador farmacéuticamente aceptable, a la biodisponibilidad de la molécula y/o su toxicidad. Se pueden hallar consideraciones y métodos para la optimización de la farmacología de las moléculas de interés por ejemplo en "Goodman and Gilman's The Pharmacological Basis of Therapeutics", 8<sup>th</sup> Edition, L. S. Goodman, A. Gilman, T. W. Rail, A. S. Nies, & P. Taylor, Eds., Pergamon Press (1985); W. L. Jorgensen & E. M. Duffy, Bioorg. Med. Chem. Lett, 10, pp. 1155-1158 (2000). Asimismo, se puede utilizar el programa informático "Qik Prop" para hacer predicciones rápidas sobre descripciones físicamente significativas y propiedades farmacéuticamente relevantes de una molécula orgánica de interés. Se puede utilizar un esquema de probabilidad del tipo 'Regla de los cinco' para estimar la absorción oral de los nuevos compuestos sintetizados (C. A. Lipinski et al., Adv. Drug Deliv. Rev., 23, pp. 3-25 (1997)). Los programas adecuados para la selección y el diseño de farmacóforos incluyen (i) DISCO (Abbot Laboratories, Abbot Park, Illinois, EE.UU.), (ii) Catalyst (Bio-CAD Corp., Mountain View, California, EE.UU.) y (iii) Chem DBS-3D (Chemical Design Ltd., Oxford, Reino Unido).

La composición farmacéutica se puede formular de diversos modos conocidos por una persona versada en la técnica. Por ejemplo, la composición farmacéutica puede ser una forma sólida como por ejemplo comprimidos, píldoras, cápsulas (incluidas cápsulas de gelatina blanda), sellos, pastillas para chupar, óvulos, polvo, granulados o supositorios, o una forma líquida como elixires, soluciones, emulsiones o suspensiones.

Las formas de administración sólidas pueden contener excipientes tales como celulosa microcristalina, lactosa, citrato de sodio, carbonato de calcio, fosfato de calcio dibásico, glicina y almidón (preferentemente de maíz, patata o mandioca), disgregantes como glicolato de sodio de almidón, croscarmelosa de sodio y ciertos silicatos complejos, y aglutinantes para granulación como polivinilpirrolidona, hidroxipropilmetilcelulosa (HPMC), hidroxipropilcelulosa (HPC), sacarosa, gelatina y goma arábiga. Además pueden añadirse lubricantes como estearato de magnesio, ácido esteárico, glicerilbehenato y talco. También se pueden emplear composiciones sólidas de un tipo similar como material de relleno para las cápsulas de gelatina. A este respecto los excipientes incluyen lactosa, almidón, una celulosa, azúcar de leche o polietilenglicoles de alto peso molecular.

En el caso de las suspensiones acuosas, soluciones, elixires y emulsiones adecuados para la administración oral, el compuesto se puede combinar con varios edulcorantes o saborizantes, colorantes o tintes, con emulsificantes y/o suspensores y con diluyentes como agua, etanol, propilenglicol o glicerina, y combinaciones de los mismos.

La composición farmacéutica puede contener modificadores de la velocidad de liberación como, por ejemplo, hidroxipropilmetilcelulosa, metilcelulosa, carboximetilcelulosa de sodio, etilcelulosa, acetato de celulosa, óxido de polietileno, goma xantana, carbómero, copolímero de metacrilato de amonio, aceite de ricino hidrogenado, cera

carnaúba, cera parafina, ftalato acetato de celulosa, ftalato de hidroxipropilmetilcelulosa, copolímero de ácido metacrílico y mezclas de los mismos.

5 La composición farmacéutica puede tener la forma de formulaciones de dosificación de dispersión o disolución rápida (FDDF) y puede contener los componentes siguientes: aspartamo, acesulfamo de potasio, ácido cítrico, croscarmelosa de sodio, crospovidona, ácido diascórbico, etilacrilato, etilcelulosa, gelatina, hidroxipropilmetilcelulosa, estearato de magnesio, manitol, metilmetacrilato, sabor de menta, polietilenglicol, sílice pirógena, dióxido de silicio, glicolato de sodio de almidón, estearilfumarato de sodio, sorbitol, xilitol.

10 Para la preparación de supositorios, primero se funde una cera de bajo punto de fusión, como una compuesta por una mezcla de glicéridos de ácidos grasos o manteca de cacao y el principio activo se dispersa homogéneamente en ella, por ejemplo con agitación. La mezcla homogénea derretida se vierte a continuación en moldes del tamaño adecuado y se deja enfriar y solidificar.

15 La composición farmacéutica más adecuada para la administración parenteral consiste en una solución acuosa estéril que puede contener otras sustancias, como por ejemplo, sales o glucosa suficientes para obtener una solución isotónica con la sangre. La solución acuosa debe tamponarse de manera adecuada (preferentemente a un pH de 3 a 9), si es necesario.

20 Las composiciones farmacéuticas más adecuadas para la administración por vía intranasal o inhalación consisten en un inhalador de polvo seco o un pulverizador de aerosol con un contenedor a presión, bomba, aerosol o nebulizador y un propelente adecuado, como por ejemplo diclorodifluorometano, triclorofluorometano, diclorotetrafluoroetano, o un hidrofluoroalcano como 1,1,1,2-tetrafluoroetano (HFA 134A.TM.) o 1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropano (HFA 227EA.TM.), dióxido de carbono u otro gas adecuado. El contenedor a presión, la bomba, el aerosol o el nebulizador  
25 pueden contener una solución o suspensión del principio activo, p. ej., utilizando una mezcla de etanol y el propelente como solvente, que además puede contener un lubricante, p. ej., trioleato de sorbitán.

Un compuesto es identificable por los susodichos métodos, que comprenden el paso de poner en contacto un fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del fragmento polipeptídico de PB2 de la presente invención o una  
30 célula hospedadora recombinante de la presente invención con un compuesto en estudio, el cual es diferente de los análogos de casquete de ARN del grupo consistente en m<sup>7</sup>G, m<sup>7</sup>GMP, m<sup>7</sup>GTP, m<sup>7</sup>GpppG, m<sup>7</sup>GpppGm, m<sup>7</sup>GpppA, m<sup>7</sup>GpppAm, m<sup>7</sup>GpppC, m<sup>7</sup>GpppCm, m<sup>7</sup>GpppU y m<sup>7</sup>GpppUm, y las moléculas pequeñas inhibitoras de la unión al casquete 2-amino-7-bencil-9-(4-hidroxi-butil)-1,9-dihidro-purín-6-ona (RO0794238, Hooker et al., 2003) y T-705 (Furuta et al., 2005) y es capaz de unirse a PB2. Un compuesto es identificable con los susodichos métodos, que  
35 comprenden el paso de poner en contacto un fragmento polipeptídico de PB2 o una variante del mismo o una célula hospedadora recombinante de la presente invención con un compuesto en estudio, el cual es diferente de los análogos de casquete de ARN seleccionados del grupo consistente en m<sup>7</sup>G, m<sup>7</sup>GMP, m<sup>7</sup>GTP, m<sup>7</sup>GpppG, m<sup>7</sup>GpppGm, m<sup>7</sup>GpppA, m<sup>7</sup>GpppAm, m<sup>7</sup>GpppC, m<sup>7</sup>GpppCm, m<sup>7</sup>GpppU y m<sup>7</sup>GpppUm, y las moléculas pequeñas inhibitoras de la unión al casquete 2-amino-7-bencil-9-(4-hidroxi-butil)-1,9-dihidro-purín-6-ona y T-705 y es capaz de  
40 inhibir la unión entre la PB2 y el casquete de ARN o un análogo del mismo.

En otro aspecto, la presente invención proporciona un anticuerpo dirigido contra el dominio de unión al casquete de ARN de PB2. En una forma de realización preferida, dicho anticuerpo reconoce el dominio de unión al casquete de  
45 ARN de un fragmento polipeptídico o una variante de un fragmento indicado arriba, en particular seleccionado entre el grupo de polipéptidos definidos por las SEQ ID N.º 14 a 22. En particular, dicho anticuerpo se une específicamente a un epítipo que comprende uno o más de los aminoácidos arriba indicados, los cuales definen la cavidad de unión. En ese contexto, el término epítipo tiene el significado reconocido en la técnica y preferentemente se refiere a segmentos de 4 a 20 aminoácidos, preferentemente 5 a 18, 6 a 16, o 7 a 14 aminoácidos. En consecuencia, los epítipos preferidos tienen una longitud de 4 a 20, 5 a 18, preferentemente 6 a 16 o 7 a 14 aminoácidos y comprenden uno o más de Ser320, Phe323, Phe325, Phe330, Arg332, Ser337, Lys339, Arg355, His357, Glu361, Phe363, Lys376, Phe404, Gln406, Met431 y/o His432 de la SEQ ID N.º 1 o un aminoácido correspondiente. El anticuerpo de la presente invención puede ser un anticuerpo monoclonal o policlonal o fracciones del mismo. Se pueden producir fracciones de unión al antígeno mediante técnicas de ADN recombinante o mediante la escisión enzimática o química de anticuerpos intactos. En ciertas formas de realización, las porciones  
55 de unión al antígeno incluyen fragmentos Fab, Fab', F(ab)<sub>2</sub>, Fd, Fv, dAb, de región determinante de complementariedad (CDR), anticuerpos monocatenarios (scFv), anticuerpos quiméricos como anticuerpos humanizados, diacuerpos y polipéptidos que contienen al menos una fracción del anticuerpo que es suficiente para conferir al polipéptido una unión específica al antígeno. El anticuerpo de la presente invención se sintetiza siguiendo protocolos estándar. Por ejemplo, se puede obtener un anticuerpo policlonal vacunando a un animal como un ratón, rata, conejo, cabra, oveja, cerdo, vaca o caballo con el antígeno de interés y combinándolo opcionalmente con un adyudante como el adyudante completo o incompleto de Freund, RIBI (muramildipéptidos) o ISCOM (complejos inmunoestimuladores) según métodos estándar conocidos por las personas versadas en la técnica. El antisuero policlonal dirigido contra el dominio de unión al casquete de ARN de la PB2 o fragmentos del mismo se obtienen de los animales extrayéndoles sangre o sacrificando a los animales inmunizados. El suero (i) se puede utilizar tal y como se obtiene del animal, (ii) se puede obtener la fracción de inmunoglobulinas del suero, o (iii) se pueden purificar los anticuerpos específicos del dominio de unión al casquete de ARN de PB2 o de fragmentos del mismo a  
65

partir del suero. Se pueden obtener anticuerpos monoclonales con métodos conocidos por las personas versadas en la técnica. En resumen, el animal se sacrifica después de la inmunización y se immortalizan linfocitos B del bazo y/o de los ganglios linfáticos mediante medios conocidos en la técnica. Los métodos para immortalizar células incluyen, entre otros, la transfección con oncogenes, la infección con virus oncógenos y el cultivo en condiciones que seleccionen a las células immortalizadas, sometiénolas a compuestos cancerígenos o mutágenos, fusionándolas con una célula immortalizada, p. ej. una célula de mieloma, y la inactivación de un gen supresor de tumores. Las células immortalizadas se seleccionan utilizando el dominio de unión al casquete de ARN de PB2 o un fragmento del mismo. Las células que producen anticuerpos dirigidos contra el dominio de unión al casquete de ARN de PB2 o fragmentos del mismo, p. ej., hibridomas, se seleccionan, clonan y se vuelven a seleccionar para encontrar las dotadas de características deseables como por ejemplo un crecimiento robusto, una elevada producción de anticuerpos y características deseables de los anticuerpos. Los hibridomas se pueden cultivar (i) en condiciones *in vivo* en animales singénicos, (ii) en animales que carecen de sistema inmunitario, p. ej., ratones atímicos, o (iii) en cultivos de células *in vitro*. Los métodos para la selección, clonación y cultivo de los hibridomas son bien conocidos por las personas versadas en la técnica. Las personas versadas pueden consultar textos de referencia como "Antibodies: A Laboratory Manual", E. Harlow and D. Lane, Eds., Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, New York (1990), que se incorpora en la presente memoria a modo de referencia, para obtener información sobre la síntesis de anticuerpos.

Se revela la utilización de un compuesto identificable por los susodichos métodos que es capaz de unirse a la cavidad de unión al casquete de ARN de PB2 o a una cavidad de unión de una variante polipeptídica de PB2 y/o es capaz de inhibir la unión de un casquete de ARN o un análogo del mismo a dicha cavidad de unión, la susodicha composición farmacéutica, o el anticuerpo de la presente invención para la fabricación de un medicamento para el tratamiento, la mejora o la prevención de enfermedades causadas por infecciones víricas provocadas por virus de ARN monocatenarios de polaridad negativa. Dichas enfermedades son causadas por infecciones víricas causadas por virus de ARN monocatenarios no segmentados de polaridad negativa, es decir, del orden de los *Mononegavirales*, que comprende las familias *Bornaviridae*, *Filoviridae*, *Paramyxoviridae* y *Rhabdoviridae*. Dicha enfermedad está causada por virus de ARN monocatenarios segmentados de polaridad negativa que comprenden la familia *Orthomyxoviridae*, incluidos los géneros de virus de la gripe A, virus de la gripe B, virus de la gripe C, *Thogotovirus* e *Isavirus*, las familias *Arenaviridae* y *Bunyaviridae*, incluidos los géneros *Hantavirus*, *Nairovirus*, *Orthobunyavirus*, *Phlebovirus* y *Tospovirus*. En una forma de realización aún más preferida dicha enfermedad está causada por una infección provocada por una especie de virus perteneciente al grupo consistente en el virus de la enfermedad de Borna, virus de Marburg, virus Ébola, virus Sendai, virus de la parotiditis, virus del sarampión, virus respiratorio sincitial humano, virus de la rinotraqueítis aviar, virus Indiana de la estomatitis vesicular, virus Nipah, virus Henda, virus de la rabia, virus de la fiebre bovina efímera, virus de la necrosis hematopoyética infecciosa, virus *Thogoto*, virus de la gripe A, virus de la gripe B, virus de la gripe C, virus *Hantaan*, virus de la fiebre hemorrágica de Crimea-Congo, virus de la fiebre del valle del Rift, virus *La Crosse*, preferentemente los virus de la gripe A, virus de la gripe B, virus de la gripe C, virus *Thogoto* o virus *Hantaan*, más preferentemente los virus de la gripe A, virus de la gripe B o virus de la gripe C, más preferentemente el virus de la gripe A.

Para el tratamiento, paliación o prevención de dichas enfermedades el medicamento de la presente invención se puede administrar a un paciente animal, preferentemente a un paciente mamífero, preferentemente a un paciente humano, por vía oral, yugal, sublingual, intranasal, por vía pulmonar por ejemplo por inhalación, por vía rectal o por vía parenteral, por ejemplo, intracavernosa, intravenosa, intraarterial, intraperitoneal, intratecal, intraventricular, intrauretral, intraesternal, intracraneal, intramuscular o subcutánea, se pueden administrar por infusión o con técnicas de inyección sin aguja.

Las composiciones farmacéuticas se pueden formular de diversos modos conocidos por una persona versada en la técnica. Por ejemplo, la composición farmacéutica de la presente invención puede ser una forma sólida como por ejemplo comprimidos, píldoras, cápsulas (incluidas cápsulas de gelatina blanda), sellos, pastillas para chupar, óvulos, polvo, granulados o supositorios, o una forma líquida como elixires, soluciones, emulsiones o suspensiones.

Las formas de administración sólidas pueden contener excipientes tales como celulosa microcristalina, lactosa, citrato de sodio, carbonato de calcio, fosfato de calcio dibásico, glicina y almidón (preferentemente de maíz, patata o tapioca), disgregantes como glicolato de sodio de almidón, croscarmelosa de sodio y ciertos silicatos complejos, y aglutinantes para granulación como polivinilpirrolidona, hidroxipropilmetilcelulosa (HPMC), hidroxipropilcelulosa (HPC), sacarosa, gelatina y goma arábiga. Además pueden añadirse lubricantes como estearato de magnesio, ácido esteárico, glicerilbehenato y talco. También se pueden emplear composiciones sólidas de un tipo similar como material de relleno para las cápsulas de gelatina. A este respecto los excipientes incluyen lactosa, almidón, una celulosa, azúcar de leche o polietilenglicoles de alto peso molecular.

En el caso de las suspensiones acuosas, soluciones, elixires y emulsiones adecuados para la administración oral el compuesto se puede combinar con varios edulcorantes o saborizantes, colorantes o tintes, con emulsificantes y/o suspensores y con diluyentes como agua, etanol, propilenglicol y glicerina, y combinaciones de los mismos.

La composición farmacéutica puede contener modificadores de la velocidad de liberación como, por ejemplo, hidroxipropilmetilcelulosa, metilcelulosa, carboximetilcelulosa de sodio, etilcelulosa, acetato de celulosa, óxido de

polietileno, goma xantana, carbómero, copolímero de metacrilato de amonio, aceite de ricino hidrogenado, cera carnaúba, cera parafina, ftalato acetato de celulosa, ftalato de hidroxipropilmetilcelulosa, copolímero de ácido metacrílico y mezclas de los mismos.

5 La composición farmacéutica puede tener la forma de formulaciones de dosificación de dispersión o disolución rápida (FDDF) y puede contener los componentes siguientes: aspartamo, acesulfamo de potasio, ácido cítrico, croscarmelosa de sodio, crospovidona, ácido diascórbico, etilacrilato, etilcelulosa, gelatina, hidroxipropilmetilcelulosa, estearato de magnesio, manitol, metilmetacrilato, sabor de menta, polietilenglicol, sílice pirógena, dióxido de silicio, glicolato de sodio de almidón, estearilfumarato de sodio, sorbitol, xilitol.

10 Para la preparación de supositorios, primero se funde una cera de bajo punto de fusión, como una compuesta por una mezcla de glicéridos de ácidos grasos o manteca de cacao y el principio activo se dispersa homogéneamente en ella, por ejemplo con agitación. La mezcla homogénea derretida se vierte a continuación en moldes del tamaño adecuado y se deja enfriar y solidificar.

15 La composición farmacéutica más adecuada para la administración parenteral consiste en una solución acuosa estéril que puede contener otras sustancias, como por ejemplo, sales o glucosa suficientes para obtener una solución isotónica con la sangre. La solución acuosa debe tamponarse de manera adecuada (preferentemente a un pH de 3 a 9), si es necesario.

20 Las composiciones farmacéuticas más adecuadas para la administración por vía intranasal o inhalación consisten en un inhalador de polvo seco o un pulverizador de aerosol con un contenedor a presión, bomba, boquilla o nebulizador y un propelente adecuado, como por ejemplo diclorodifluorometano, triclorofluorometano, diclorotetrafluoroetano, o un hidrofluoroalcano como 1,1,1,2-tetrafluoroetano (HFA 134A.TM.) o 1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropano (HFA 227EA.TM.), dióxido de carbono u otro gas adecuado. El contenedor a presión, la bomba, el aerosol o el nebulizador pueden contener una solución o suspensión del principio activo, p. ej., utilizando una mezcla de etanol y el propelente como solvente, que además puede contener un lubricante, p. ej., trioleato de sorbitán.

30 La preparación farmacéutica es una forma farmacéutica unitaria. En esta forma, la preparación se subdivide en dosis unitarias que contienen las cantidades adecuadas del principio activo. La forma farmacéutica unitaria puede ser una preparación envasada, y el envase contiene cantidades discretas de la preparación, como comprimidos, cápsulas y polvo en viales o ampollas. Asimismo, la forma farmacéutica unitaria puede ser una cápsula, comprimido, sello, o pastilla para chupar sola, o puede ser un número adecuado de cualquiera de ellas envasadas.

35 La cantidad de principio activo de una preparación de dosis unitaria administrada en la utilización de la presente invención se puede variar o ajustar desde aproximadamente 1 mg a aproximadamente 1000 mg por m<sup>2</sup>, preferentemente de aproximadamente 5 mg a aproximadamente 150 mg/m<sup>2</sup> según la aplicación particular y la potencia del principio activo.

40 Los compuestos empleados en la utilización médica de la invención se administran con una dosis inicial de aproximadamente 0,05 mg/kg a aproximadamente 20 mg/kg diarios. Se prefiere un intervalo de dosis diario de aproximadamente 0,05 mg/kg a aproximadamente 2 mg/kg, prefiriéndose mejor un intervalo de dosis diario de aproximadamente 0,05 mg/kg a aproximadamente 1 mg/kg. Las dosis, no obstante, pueden modificarse dependiendo de las necesidades del paciente, la gravedad de la enfermedad tratada y el compuesto empleado. La determinación de la dosis adecuada para una situación concreta es responsabilidad del médico. En general, el tratamiento se inicia con dosis pequeñas, inferiores a la dosis óptima del compuesto. Posteriormente, la dosis se aumenta poco a poco hasta alcanzar el efecto óptimo que permitan las circunstancias. Si conviene la dosis total diaria puede dividirse y administrarse en fracciones a lo largo del día.

## 50 Ejemplos

Los ejemplos han sido pensados a modo ilustrativo y para facilitar la comprensión de la presente invención. No pretenden limitar el campo de la invención en modo alguno.

### 55 Ejemplo 1: Generación de constructos de expresión de PB2

Un gen de PB2 con los codones optimizados para *E. coli* (Geneart) de SEQ ID N.º 25, basado en la secuencia de aminoácidos de la PB2 del virus de la gripe A Victoria/3/1975(H3N2) (de la Luna et al., 1989), se clonó en un vector pET9a (Novagen) modificado para introducir pares de sitios de restricción 5' AatII/AscI y 3' NsiI/NotI para el truncado direccional con exonucleasa III, y proporcionar una secuencia 3' que codifique el péptido aceptor de biotina C-terminal GLNDIFEAQKIEWHE. Se generó una primera biblioteca de plásmidos por truncado unidireccional desde el extremo 3' (Tarendeau et al., 2007), se agrupó y se usó como sustrato para una reacción de delección 5'. Los plásmidos linealizados que codificaban insertos de 150 a 250 aminoácidos se aislaron con un gel de agarosa, se religaron y se utilizaron para transformar *E. coli* BL21 AI portadoras del plásmido RIL (Stratagene) para el cribado de la expresión con hibridación de estreptoavidina Alexa488 (Invitrogen) en colonias transferidas a membranas (Tarendeau et al., 2007). Los clones se clasificaron según la señal de fluorescencia que emitían y en los primeros 36



se analizó la expresión de la proteína purificable mediante cromatografía de afinidad con Ni<sup>2+</sup>. De ese modo se identificaron y se secuenciaron 13 clones que revelaron siete constructos únicos en la región de interés (véase la Figura 1):

- 5        nt 703-1488 (aa 235-496),  
           nt 721 -1449 (aa 241-483),  
           nt 802-1449 (aa 268-483),  
           nt 829-1440 (aa 277-480),  
           nt 841-1446 (aa 281-482),  
 10        nt 868-1449 (aa 290-483),  
           nt 883-1446 (aa 295-482)

15        Estos fragmentos polinucleotídicos de PB2 se sintetizaron con la reacción en cadena de la polimerasa (PCR) utilizando el gen sintético como molde y se clonaron en el vector de expresión plasmídico pETM11 (EMBL) entre los sitios de NcoI y XhoI. El vector de expresión pETM11 permite la expresión de la proteína de fusión etiquetada con His<sub>6</sub>. La etiqueta de His<sub>6</sub> se puede eliminar de la proteína de fusión con la proteasa TEV.

### Ejemplo 2: Identificación de un fragmento mínimo de unión al casquete

20        Los fragmentos polipeptídicos de PB2 235-496, 241-483, 268-483 y 290-483 se expresaron en *E. coli* mediante los constructos plasmídicos descritos en el Ejemplo 1 y el protocolo general de expresión y purificación descrito en el Ejemplo 3. Se descubrió que el fragmento purificado de PB2 235-496 sólo es soluble a concentraciones bajas, mientras que los fragmentos 241-483, 268-483 y 290-483 son más solubles y pueden unirse específicamente a una columna de sefarosa con m<sup>7</sup>GTP, lo que indica actividad de unión al casquete. En estas pruebas se cargaron 0,2 mg de proteína en 50 µl de resina de Seфарosa 4B con 7-metil-GTP (GE Healthcare) y se incubaron durante 3 h a 4°C para permitir la unión. Después de lavar con un tampón de Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 200 mM, DTT 2 mM, las proteínas se eluyeron por centrifugación con el mismo tampón pero conteniendo m<sup>7</sup>GTP 1 mM y se analizaron con electroforesis SDS-PAGE. Durante el curso de estos experimentos se observó que un pequeño fragmento de degradación también podía unirse a m<sup>7</sup>GTP y este se identificó mediante secuenciación N-terminal y espectroscopia de masas como integrado por los residuos 318-483, resultando además estable a la proteólisis. El fragmento polinucleotídico correspondiente (nt 952-1449) se clonó en pETM11 del modo descrito en el Ejemplo 1.

### Ejemplo 3: Expresión y purificación de fragmentos de PB2

35        Dichos plásmidos se transformaron en células de *E. coli* mediante transformación química. La proteína se expresó en *E. coli* de la cepa BL21-CodonPlus-RIL (Stratagene) cultivadas en medio LB. Tras 16 a 20 h horas de inducción a 25°C con isopropil-β-tiogalactopiranosido (IPTG) 0,2 mM, las células se recolectaron y se resuspendieron en un tampón de lisis (TrisHCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 300 mM, 2-mercaptoetanol 5 mM) y se sonicaron. Una vez centrifugado, el lisado filtrado se cargó directamente en una columna de afinidad con níquel (sefarosa quelada de GE Healthcare, cargada con iones Ni<sup>2+</sup>). La resina de sefarosa-Ni se lavó a conciencia con un tampón de Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 1 M, imidazol 15 mM y 2-mercaptoetanol 5 mM, y después con otro tampón de Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 200 mM, imidazol 50 mM y 2-mercaptoetanol 5 mM. La proteína se eluyó a continuación con un tampón de Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 200 mM, imidazol 0,5 M y 2-mercaptoetanol 5 mM. La proteína purificada se incubó hasta el día siguiente con proteasa TEV a 10°C. Después de someterla a diálisis con un tampón de Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 200 mM, imidazol 15 mM y 2-mercaptoetanol 5 mM, se llevó a cabo un segundo paso por la columna de afinidad con níquel para eliminar la proteasa TEV marcada con la etiqueta de His. La proteína no unida se recuperó y se concentró a 5-8 mg/ml con filtración en gel en una columna Superdex 75 (GE Healthcare) para aumentar la pureza. El resultado de la filtración en gel del fragmento polipeptídico de PB2 (aminoácidos 318 a 483) se muestra en la FIG 2A. Este fragmento (aminoácidos 318 a 483) se puede concentrar hasta 24 mg/ml. La pureza de la proteína se evaluó con PAGE SDS y tinción de Coomassie (véase la FIG. 2B). Un rendimiento típico es de 120 mg de proteína pura por litro de cultivo bacteriano.

### Ejemplo 4: Co-cristalización de PB2 y m<sup>7</sup>GTP

55        En los ensayos de cristalización se utilizó una solución de proteína constituida por el fragmento de PB2 318-483 a 11-15 mg/ml en Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), NaCl 200 mM, ditiotreitól (DTT) 2 mM, m<sup>7</sup>GTP 5 mM (Sigma). Con la ayuda de un robot (cartesiano) se analizaron 576 condiciones de cristalización utilizando el método de difusión de vapor por gota posada, mediante la mezcla de 100 µl de la solución de proteína con 0,1 µl de diversas soluciones de precipitación. Se detectaron cristales en dos condiciones distintas. Estas condiciones se optimizaron manualmente mediante el método de difusión de vapor por gota colgante con 1 µl de solución de proteína mezclado con 1 µl de solución de precipitación. Los mejores cristales se obtuvieron con una solución de precipitación que comprendía ácido cítrico 0,1 M pH 4,6 y formiato de sodio 1,6-1,8 M. Estos cristales eran del grupo espacial C222<sub>1</sub>, con celda unitaria de las siguientes dimensiones: a = 9,2 nm, b = 9,4 nm; c = 22,0 nm ± 0,3 nm Å. Algunos de los cristales más pequeños difractoron los rayos X con una resolución de al menos 2,4 Å. Los cristales más grandes no se pudieron utilizar porque no eran monocristales. En la segunda condición de cristalización descubierta, la solución de

precipitación comprendía PEG 6000 al 7%, LiCl 1 M, ácido cítrico 0,1 M pH 5,0, TCEP HCl 10 mM. Esta condición ofrece cristales lamelares delgados, de grupo espacial indeterminado, con indicios de difracción de al menos una resolución de 3,3 Å, pero la calidad de la difracción era muy baja y se descartaron.

#### 5 Ejemplo 5: Preparación de proteína marcada con seleno-metionina.

Se sintetizó proteína seleno-metionada en medio mínimo M9 del modo descrito (Van Duyne, 1993). Como la proteína seleno-metionada por entero no cristalizó, se produjo proteína marcada con 50 mg/l de selenometionina y 5 mg/l de metionina, en lugar de 60 mg/l de selenometionina. Las condiciones de expresión, lisis y purificación fueron las mismas que las de la proteína original (Ejemplo 3). La espectroscopía de masas con electropulverización demostró que, mientras que la proteína seleno-metionada entera presentaba una masa molecular de 19654 Daltons, correspondientes a 11/11 metioninas sustituidas, la proteína parcialmente marcada presentaba una masa molecular media de 19578 (9,4/11, es decir, una sustitución del 85%) con picos individuales correspondientes a proteínas con 7-11 selenios.

#### 15 Ejemplo 6: Determinación de la estructura y afinamiento

La estructura se determinó con el método de la difracción anómala simple (SAD) utilizando proteína parcialmente seleno-metionilada del modo descrito en el Ejemplo 5. La proteína parcialmente seleno-metionilada generó monocristales más grandes que la proteína natural. Los datos de la proteína natural se obtuvieron a una resolución de 2,4 Å con un cristal pequeño (tamaño 15 x 15 x 50  $\mu\text{m}^3$ ) del grupo espacial C222<sub>1</sub> y unas dimensiones de celda a=92,2, b=94,4, c=220,4 Å en la línea BM 14 de las instalaciones de la ESRF (Figura 4). Los cristales de la proteína marcada parcialmente con seleno-metionina se midieron con la línea ID29 a una resolución de 2,9 Å para determinar la estructura y después a una resolución de 2,3 Å con la línea ID14-EH1 con un cristal más grande para el afinamiento de la estructura. La estructura se resolvió con el método SAD utilizando AUTOSHARP (Vonrhein et al., 2006). Se encontraron 50/55 posiciones de átomos de selenio. Las fases y el mapa se mejoraron con RESOLVE (Terwilliger, 2000) utilizando simetría no cristalográfica de orden 4 determinada a partir de las posiciones del selenio, aunque resultó que en realidad la unidad asimétrica contenía cinco moléculas (contenido de solvente 55%). Estaban dispuestas en una forma inusual. Cuatro moléculas bien ordenadas (factor B promedio aproximado de 30Å<sup>2</sup>), señaladas con A-D están organizadas siguiendo una simetría puntual de orden 4. La quinta molécula interviene en el empaquetamiento de los tetrámeros en la dirección cristalográfica c pero está parcialmente desordenada (factor B promedio aproximado de 51Å<sup>2</sup>). Después de transferir las fases a los datos originales, ARP/wARP (Perrakis et al., 1999) fue capaz de construir automáticamente la mayor parte de la estructura. Se observó una clara densidad electrónica residual del m<sup>7</sup>GTP unido a cada molécula. El afinamiento se llevó a cabo con REFMAC (Murshudov, 1997) utilizando restricciones rigurosas de simetría no cristalográfica (NCS) en la mayoría de los parámetros de cada molécula y los parámetros TLS correspondientes a cada molécula en conjunto. El factor R final (R-free) es 0,186 (0,235) con 293 moléculas de agua. Según MOLPROBITY (Lovell et al., 2003), la calidad de la estructura es excelente, tal y como indica la siguiente información del servidor:

```
40  REMARK 40
    REMARK 40 MOLPROBITY STRUCTURE VALIDATION
    REMARK 40 MOLPROBITY OUTPUT SCORES:
    REMARK 40 ALL-ATOM CLASHSCORE: 8,40
    REMARK 40 BAD ROTAMERS: 3,4% 24/708 (TARGET 0-1%)
45  REMARK 40 RAMACHANDRAN OUTLIERS: 0,0% 0/795 (TARGET 0,2%)
    REMARK 40 RAMACHANDRAN FAVORED: 97,7% 777/795 (TARGET 98,0%)
```

El dominio de unión al casquete de PB2 presenta un pliegue mixto alfa-beta, compacto y bien ordenado con una prominente lámina beta antiparalela que comprende las cadenas  $\beta 1$ ,  $\beta 2$ ,  $\beta 5$ ,  $\beta 6$  y  $\beta 7$  empaquetadas en un haz helicoidal que comprende  $\alpha 1$ ,  $\alpha 2$ ,  $\alpha 3$  y  $\alpha 4$ , con las hélices más largas  $\alpha 1$  y  $\alpha 3$  alineadas de forma más o menos antiparalela. La conexión entre  $\beta 2$  y  $\beta 5$  se prolonga en una larga horquilla beta, que comprende las cadenas  $\beta 3$  y  $\beta 4$  y el bucle 348, que cruza hacia el lado helicoidal de la molécula. Entre  $\alpha 2$  y  $\alpha 3$  se sitúa un bucle poco ordenado, llamado bucle 420, que se adentra en el solvente (Figuras 4 y 5). En el dominio de unión al casquete de la PB2 del virus de la gripe A, the m<sup>7</sup>G se asienta sobre una plataforma hidrófoba formada principalmente por Phe-323 (de  $\beta 1$ , más apilada contra la ribosa) y Phe-404 (del extremo C-terminal de la hélice  $\alpha 1$ , más apilada contra la base), pero ninguna está exactamente paralela a la base. Estos dos residuos aromáticos forman parte de una agrupación destacable de cinco fenilalaninas que también incluye a Phe-325, Phe-330 y Phe-363. En el lado del solvente del ligando, el sándwich se completa con la His-357 (del extremo C-terminal de  $\beta 4$ ), un tipo de residuo que no se había observado previamente en este papel. El residuo ácido clave es Glu-361 que mantiene puentes de hidrógeno con las posiciones N1 y N2 de la guanina, y la Lys-376 también está implicada en el reconocimiento específico de base a través de una interacción con O6 (Figuras 6, 7 y 10). Algo que resulta inusual en las proteínas de unión al casquete es que no existen interacciones directas con ningún hidroxilo de ribosa. El trifosfato está inclinado hacia la base. El alfa-fosfato interacciona con la His-432 y la Asn-429 y el gamma-fosfato interacciona con los residuos básicos His-357, Lys-339 y Arg-355.

65

**Ejemplo 7: Análisis mutacional del sitio de unión al casquete**

Para verificar que las interacciones proteína-ligando observadas estructuralmente son importantes para la unión del casquete *in vitro*, introdujimos mutaciones de alanina en siete residuos en contacto con m<sup>7</sup>GTP (F323, F325, E361, F363, F404, H357 y K376) utilizando el kit de mutagénesis dirigida QuickChange (Stratagene). Se esperaba que estas mutantes de un solo punto mostraran una actividad de unión al casquete reducida, lo que se evaluó analizando su capacidad de unión a una resina de m<sup>7</sup>GTP-Sefarosa a 4°C (Tabla 4, Figura 12). Las mutantes se purificaron del modo descrito en el Ejemplo 3 con PB2 natural. La mutante F363A se expresó poco y con una baja solubilidad en *E. coli*, presumiblemente por un plegamiento incorrecto, y se descartó proseguir con ella. Las mutantes H357A, E361A, K376A y F404A se expresaron satisfactoriamente en forma soluble pero no se unieron a la m<sup>7</sup>GTP-Sefarosa en las condiciones del ensayo, mientras que la F323A presentó una débil actividad de unión (Figura 12). Sorprendentemente, la mutante F325A, pese a su escasa expresión, se unió a la resina casi tan bien como la forma natural. Demostramos que esta actividad de la forma mutante depende fuertemente de la temperatura (Tabla 3). Asimismo se hizo una sustitución H357W que ofreció el resultado esperado al mejorar el apilamiento con la base, mostrando este dominio mutante mayor unión a m<sup>7</sup>GTP. Los resultados se muestran en la Figura 12 y la Tabla 4.

**Ejemplo 8: Análisis cuantitativo de la afinidad de unión al casquete por medio de mediciones de resonancia de plasmón superficial**

Para proporcionar una comparación de carácter más cuantitativo de la afinidad de unión de las diversas mutantes se llevaron a cabo mediciones de resonancia de plasmón superficial (SPR) con el dominio de unión al casquete inmovilizado y m<sup>7</sup>GTP como el analito. El análisis por SPR se llevó a cabo con un equipo BiacoreT100 equipado con chips sensores CM5 (Biacore AB, Uppsala, Suecia). Los dominios de unión al casquete de las PB2 natural y mutante se diluyeron hasta 50 µg/ml con acetato de sodio 10 mM, pH 6,0 y se inmovilizaron en la superficie del sensor por medio de química estándar de acoplamiento amínico. La superficie activada/desactivada del sensor sirvió como referencia. Diluciones seriadas con factor de dos de m<sup>7</sup>GTP, m<sup>7</sup>GpppG y GTP que abarcaron desde 0,47 hasta 1 mM se inyectaron sobre las superficies que contenían las proteínas PB2 inmovilizadas y la superficies de referencia con un caudal de 30 µl/min. El tampón de migración estaba compuesto por Hepes 10 mM, pH 7,4 y contenía NaCl 150 mM y DTT 1 mM. Para estudiar el efecto de la temperatura sobre la unión los experimentos se llevaron a cabo a 5, 15, 25 y 37°C. Todos los sensogramas adquiridos se procesaron con referenciamiento doble y las constantes de disociación en equilibrio se determinaron evaluando la afinidad en estado estacionario con el programa BiacoreT100 Evaluation Software. Estas se califican como constantes de disociación 'aparentes' ya que la naturaleza química de la superficie y la orientación molecular asociadas con la inmovilización podían afectar a los valores. Los errores son los asociados con el ajuste tal y como los indicó el programa informático. La variabilidad observada entre los experimentos con diferentes condiciones de inmovilización de las proteínas resultó < 25% (datos no mostrados). Los resultados correspondientes a la constante de disociación aparente en equilibrio K<sub>D</sub> obtenida a 25°C (Tabla 1) revelan una tendencia concordante con los resultados de unión a la m<sup>7</sup>GTP-Sefarosa, observándose la mayor afinidad en la mutante H357W (K<sub>D</sub> = 24 ± 3 µM), seguida por la forma natural (K<sub>D</sub> = 177 ± 34 µM), y las mutantes E361A y K376A con la afinidad más baja (K<sub>D</sub> > 1500 µM).

Tabla 1: Constantes de disociación aparentes en equilibrio (K<sub>D</sub>) correspondientes a la interacción entre m<sup>7</sup>GTP y diferentes mutantes puntuales del dominio de unión al casquete de PB2 determinadas mediante SPR a 25°C.

Proteína	K <sub>D</sub> (µM)
Natural	177 ± 34
H357W	24 ± 3
F323A	285 ± 45
F325A	418 ± 99
H357A	831 ± 45
F404A	1277 ± 120
E361A	>1500
K376A	> 1500

Considerados en conjunto, los datos anteriores confirman la importancia funcional de esos residuos que entran en contacto con m<sup>7</sup>GTP a través del dominio de PB2 *in vitro*. La Tabla 2 contiene resultados adicionales correspondientes al análogo de casquete dinucleotídico, m<sup>7</sup>GpppG, así como sobre la unión de GTP al dominio natural de unión al casquete.

Tabla 2: Constantes de disociación aparentes en equilibrio (K<sub>D</sub>) correspondientes a la interacción entre el dominio natural de unión al casquete de PB2 y diferentes análogos de casquete determinadas mediante SPR a 25°C, y comparadas con los valores de Cl<sub>50</sub> medidos mediante la inhibición del entrecruzamiento con ARN con casquete por análogos del casquete (Hooker *et al.* 2003)

Analito	K <sub>D</sub> (μM)	Cl <sub>50</sub> (μM)
m <sup>7</sup> GpppG	171±19	127
m <sup>7</sup> GTP	177±34	113
GTP	1019±100	550

Para investigar la dependencia de la temperatura de la unión entre el dominio de unión al casquete y m<sup>7</sup>GTP se hicieron mediciones con SPR de la K<sub>D</sub> con los dominios natural y mutantes seleccionados a varias temperaturas hasta los 37°C (Tabla 3). La afinidad de unión por el casquete de todas las proteínas analizadas disminuyó significativamente con el aumento de la temperatura. No obstante, mientras que la K<sub>D</sub> aparente de la forma natural se multiplicó por un factor de 2,7 entre los 5 y los 37°C, la de la mutante F325A aumentó más de 20 veces. Es más, a diferencia del dominio natural, la actividad de unión de la mutante F325A se pierde de modo irreversible con la incubación a 37°C (datos no mostrados), presumiblemente por desnaturalización térmica. Esta sensibilidad a la temperatura ofrece un motivo razonable para la actividad de unión al casquete casi normal observada con la mutante F325A a 4°C, tanto en el dominio como en el trímero, así como a la alteración funcional de la polimerasa mutante F325A observada a 37°C (véase Ejemplo 10).

Tabla 3: Dependencia de la temperatura de las constantes de disociación (K<sub>D</sub>) correspondientes a la interacción entre m<sup>7</sup>GTP y diferentes mutantes puntuales del dominio de unión al casquete.

Temperatura	K <sub>D</sub> (μM)				
	Natural	H357W	F323A	H357A	F325A
5°C	100 ± 20	12 ± 2	168 ± 29	394 ± 26	170 ± 44
15°C	133 ± 26	16 ± 3	215 ± 38	551 ± 42	223 ± 55
25°C	177 ± 34	24 ± 3	285 ± 45	831 ± 44	419 ± 99
37°C	268 ± 45	45 ± 6	884 ± 140	1123 ± 130	3787 ± 1700

#### Ejemplo 9: Actividad de unión al casquete de los complejos de la polimerasa natural y mutantes

Para investigar la relevancia del sitio de unión al casquete para la actividad biológica de las RNP de la gripe se introdujeron las mismas mutaciones en la PB2 entera de la cepa del virus de la gripe A/Victoria/3/75 y se analizó la actividad de la polimerasa trimérica resultante o las RNP recombinantes. Ninguna de las mutaciones alteró la acumulación de PB2 cuando esta se expresó en el contexto del complejo polimerasa, ni alteró la capacidad de PB2 para formar complejos triméricos de la polimerasa (Tabla 4).

Para analizar la unión al casquete de la polimerasa trimérica, se transfectaron células HEK293T simultáneamente con plásmidos pCMVPB1 que codificaban la subunidad PB1, con pCMVPB2His que codificaban la subunidad natural de PB2 o mutantes de la misma y con pCMVPA que codificaban la subunidad PA de la ARN-polimerasa del virus de la gripe; los extractos celulares se prepararon 24 horas después de la transfección. Los extractos se prepararon en un tampón que contenía Tris-HCl 50 mM, NaCl 100 mM, EDTA 5 mM, DTT 1 mM, NP40 0,2%, inhibidores de proteasas (Roche, cóctel completo) a pH 7,5 incubados con m<sup>7</sup>GTP-Sefarosa (GE Healthcare) durante 3 h a 4°C. Después del lavado con 100 volúmenes del mismo tampón, la proteína retenida se eluyó con el mismo tampón pero que esta vez contenía m<sup>7</sup>GTP 1 mM y se analizó con Western blot utilizando anticuerpos específicos contra la subunidad PA (Figura 13). En estas condiciones, la polimerasa natural no quedó retenida en una resina de Sefarosa de control. La mutante H357W se comportó como la natural, en tanto que todas las demás mutaciones impidieron la unión, excepto la F325A que siguió uniéndose, emulando los resultados obtenidos con el dominio aislado.

#### Ejemplo 10: Actividades de replicación y transcripción de las mini-RNP recombinantes natural y mutantes

La actividad de replicación de las polimerasas natural y mutantes se analizó midiendo la acumulación de RNP en un sistema recombinante *in vivo* (Ortega et al., 2000; Martin-Benito et al., 2001). Para la reconstitución de las RNP se transfectaron células HEK293T de manera simultánea con plásmidos pCMVPB1, pCMVPB2His, pCMVPA, pCMVNP y pHHclone23 utilizando un protocolo de precipitación con fosfato de calcio. Al cabo de 24 horas de la transfección, se prepararon los extractos y las RNP se purificaron mediante cromatografía con una resina de Ni<sup>2+</sup>-NTA-agarosa del modo descrito (Area et al., 2004). Y después se llevó a cabo un Western blot con anticuerpos específicos para PA y NP. Las RNP derivadas se extrajeron, purificaron y su acumulación se monitorizó mediante anticuerpos anti-PA y anti-NP. La mayoría de las mutaciones no alteraron sustancialmente la actividad de replicación de las RNP (Figura 14 y Tabla 4). Sólo las mutaciones F325A y K376A redujeron parcialmente la acumulación de RNP.

La actividad de transcripción de las RNP natural y mutantes purificadas se analizó *in vitro* con ApG y con ARNm de β-globina como cebadores con el objetivo de revelar la transcripción independiente y dependiente del casquete, respectivamente. Para la síntesis del ARN *in vitro* se incubaron cantidades iguales de RNP purificadas determinadas por Western blot en mezclas de reacción de 20 μl que contenían Tris-HCl 50 mM (pH 8,0), MgCl<sub>2</sub> 2 mM, KCl 100 mM, ditiotretol 1 mM, ATP, CTP y UTP 0,5 M cada uno, α-<sup>32</sup>P-GTP 10 μM (0,5 μCi/nmol), actinomicina D 10 μg/ml, inhibidor placentario humano de ARNasas 1 U/ml y o bien ApG 100 μM o bien ARNm de β-globina 10 μg/ml, durante 60 min a 30°C. El ARN sintetizado se precipitó con TCA y se recuperó filtrándolo en un aparato de transferencia

puntiforme (dot-blot). La incorporación se cuantificó con un *Phosphorimager*. La mayoría de las RNP mutantes presentaron una actividad plena con el cebador de ApG (Figura 15 y Tabla 4): las mutaciones H357A y F404A produjeron RNP transcripcionalmente más eficientes que la forma natural y solo la mutante F325A mostró una fuerte deficiencia.

En cambio, la transcripción dependiente del ARNm de la  $\beta$ -globina se vio gravemente afectada con la mayoría de las formas mutantes, excepto las mutaciones H357W y H357A que fueron plenamente y parcialmente activas, respectivamente (Figura 16 y Tabla 4). El cociente de la actividad transcripcional observada con cebadores de  $\beta$ -globina y con cebadores de ApG (Figura 17 y Tabla 4) revela que todas las mutantes excepto la H357W resultaron fuertemente afectadas por su capacidad para utilizar el ARNm de la  $\beta$ -globina como cebador para la transcripción.

Todas menos una de las mutaciones diseñadas para reducir la actividad de unión al casquete inhibieron la interacción con la  $m^7$ GTP-Sefarosa, tanto en lo que concierne a los dominios proteínicos como a los complejos polimerasa mutantes (Tabla 4, Figuras 12 y 13). La excepción, F325A, se expresó poco en el contexto del dominio y se vio severamente afectada en la mayoría de los ensayos funcionales a nivel de polimerasa o RNP a 37°C (Tabla 4). No obstante, conservó una relativa afinidad de unión al casquete a 4°C (Figuras 12 y 13), lo cual apunta a un posible fenotipo sensible a la temperatura.

Tabla 4: Resumen de la bioquímica y la actividad biológica de las formas mutantes del sitio de unión al casquete de PB2

	Solubilidad del dominio	Unión al casquete al dominio a 4°C	Unión al casquete a polimerasa a 4°C	Acumulación de RNP	Transcripción dependiente de ApG	Transcripción dependiente de la $\beta$ -globina	La relación de la actividad transcripcional de $\beta$ -globina / ApG
Tipo natural	+++	+++	+++	+++	+++	+++	+++
F323A	++	+	-	+++	+	-	-
F325A	+/-	++	++	++	-	-	-
H357A	+++	-	-	++++	++++	+	-
H357W	+++	++++	+++	++	+++	++++	+++
E361A	++	-	-	+++	+++	-	-
F363A	-	nd	nd	nd	nd	nd	nd
K376A	+++	-	-	+	+++	-	-
F404A	+++	-	-	++++	++++	-	-
$\Delta$ VQ	+++	+++	+	+++	++	-	-

nd: no determinado

#### Ejemplo 11: La transcripción dependiente del casquete exige que el bucle 424 permanezca íntegro

Nos intrigaba el bucle 420 visiblemente expuesto (Figuras 5 y 6), cuya secuencia se encuentra relativamente bien conservada en los virus de la gripe A y B (Figura 9). Y, a fin de investigar su posible función, lo acortamos sustituyendo los residuos Val421-Gln426 con tres glicinas (mutante  $\Delta$ VQ). El dominio de unión al casquete aislado portador de esta mutación se comportó como natural en términos de actividad de unión a  $m^7$ GTP-Sefarosa (Figura 12) y  $K_D$  aparente (datos no mostrados). En el contexto de la polimerasa trimérica y las RNP recombinantes, este mutante conservó la capacidad para unirse a las resinas con análogos del casquete, aunque en menor medida, y manifestó niveles de replicación y transcripción con el cebador de ApG similares a los de la forma natural (Figuras 14 y 15). En cambio, la mutante fue incapaz de llevar a cabo la transcripción dependiente de la  $\beta$ -globina en condiciones *in vitro* (Figuras 16 y 17 y Tabla 4). La mutante  $\Delta$ VQ resultó por tanto defectuosa en la transcripción dependiente del casquete pero no en la unión a éste. Especulamos con que este bucle podría desempeñar una función alostérica en la regulación de la actividad de la subunidad PB1.

#### Bibliografía citada

Area, E. et al., (2004), "3D structure of influenza virus polymerase complex: localization of subunit domains", PNAS USA, 101, pp. 308-313

Balbes, L. M. et al., (1994), "A Perspective in Modern Methods in Computer-Aided Drug Design", Reviews in Computational Chemistry, Vol. 5, K. B. Lipkowitz and D. B. Boyd, Eds., VCH, New York, pp. 37-380

Bartlett, P. A. et al., (1989), "CAVEAT: A Program to Facilitate the Structure-Derived Design of Biologically Active Molecules", in Molecular Recognition in Chemical and Biological Problems", Special Publication, Royal Chem. Soc, 78, pp. 182-196

- Berge, S. M. et al., (1977), "Pharmaceutical Salts", J. Pharm. Sci., 66, pp. 1-19
- 5 Blundell, T. L. and Johnson, L. N., (1976), "Protein Crystallography", Academic Press, New York
- Bohm, H.-J., (1992), "The Computer Program LUDI: A New Method for the *De Novo* Design of Enzyme Inhibitors", J. Comp. Aid. Mol. Des., 6, pp. 61-78
- 10 Cianci, C. et al., (1995), "Differential activation of the influenza virus polymerase via template RNA binding", J. Virol., 69, pp. 3995-3999.
- Cohen, N. C. et al., (1990), "Molecular Modeling Software and Methods for Medicinal Chemistry", J. Med. Chem., 33, pp. 883-894
- 15 Drenth, J., "Principles of protein X-ray crystallography", 2<sup>nd</sup> Ed., Springer Advanced Texts in Chemistry, New York (1999)
- Eisen, M. B. et al., (1994), "HOOK: A Program for Finding Novel Molecular Architectures that Satisfy the Chemical and Steric Requirements of a Macromolecule Binding Site", Proteins: Struct., Funct., Genet., 19, pp. 199-221.
- 20 Eriksson, B. et al., (1977), Inhibition of Influenza virus ribonucleic acid polymerase by ribavirin triphosphate. Antimicrob. Agents Chemother., 11, pp. 946-951
- Fechter, P. et al., (2003), "Two aromatic residues in the PB2 subunit of influenza A RNA polymerase are crucial for cap binding", J. Biol. Chem., 278, pp. 20381-20388
- 25 Furuta, Y. et al., (2005), "Mechanism of action of T-705 against influenza virus", Antimicrob. Agents Chemother., 49, pp. 981-986
- 30 Ghanem, A. et al., (2007), "Peptide-mediated interference with influenza A virus polymerase". J. Virol., 81, pp. 7801-7804
- Gillet, V. et al., (1993), "SPROUT: A Program for Structure Generation", J. Comp. Aid. Mol. Des., 7, pp. 127-153
- 35 Goodman, L. S. et al., Eds., (1985), "Goodman and Gilman's The Pharmacological Basis of Therapeutics", 8<sup>th</sup> Edition, Pergamon Press
- Goodsell, D. S. et al., (1990), "Automated Docking of Substrates to Proteins by Simulated Annealing", Proteins: Struct., Funct., Genet., 8, pp. 195-202
- 40 Guida, W. C. (1994), "Software for Structure-Based Drug Design", Curr. Opin. Struct. Biol., 4, pp. 777-781
- Harlow, E. and Lane, D., Eds., (1990), "Antibodies: A Laboratory Manual", Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, New York
- 45 Holm, L. and Sander, C. (1993), "Protein structure comparison by alignment of distance matrices", J. Mol. Biol., 233, pp. 123-138.
- Honda, A. et al., (1999), "Two separate sequences of PB2 subunit constitute the RNA cap-binding site of influenza virus RNA polymerase", Genes to Cells, 4, pp. 475-485
- 50 Hooker, L. et al., (2003), "Quantitative analysis of the influenza virus RNP interaction with RNA cap structures and comparison to human cap binding protein eIF4E", Biochemistry, 42, pp.6234-6240
- 55 Jorgensen, W. L., (1998), "OPLS Force Fields", Encyclopedia of Computational Chemistry, Schleyer, Ed., Wiley, New York, Vol. 3, pp. 1986-1989
- Kukkonen, S. K. et al (2005), "L protein, the RNA-dependent RNA polymerase of hantaviruses", Arch. Virol., 150, pp. 533-556
- 60 Kuntz, I. D. et al., (1982), "A Geometric Approach to Macromolecule-Ligand Interactions", J. Mol. Biol., 161, pp. 269-288
- Lauri, G. and Bartlett, P. A., (1994), "CAVEAT: A Program to Facilitate the Design of Organic Molecules", J. Comp. Aid. Mol. Des., 8, pp. 51-66
- 65

- Leahy, M. B. et al, (2005), "In Vitro Polymerase Activity of Thogoto Virus: Evidence for a Unique Cap-Snatching Mechanism in a Tick-Borne Orthomyxovirus", *J. Virol.*, 71, pp. 83478351
- 5 Leuenberger, H.G.W. et al., Eds., (1995), "A Multilingual Glossary of Biotechnological Terms: IUPAC Recommendations", *Helvetica Chimica Acta*, CH-4010 Basel, Switzerland,
- Li, M.-L. et al., (2001), "The active site of the influenza cap-dependent endonuclease are on different polymerase subunits", *EMBO J.*, 20, pp. 2078-2086
- 10 Lipinski, C. A. et al., (1997), "Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings", *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 23, pp. 3-25
- Lovell, S.C. et al., (2003), "Structure validation by C $\alpha$  geometry: phi,psi and C $\beta$  deviation", *Proteins*, 50, pp. 437-450.
- 15 Magden, J. et al., (2005), "Inhibitors of virus replication: recent developments and prospects", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 66, pp. 612-621
- Martin, Y. C, (1992), "3D Database Searching in Drug Design", *J. Med. Chem.*, 35, pp. 2145-2154
- 20 Martin-Benito, J et al., (2001), "Three-dimensional reconstruction of a recombinant influenza virus ribonucleoprotein particle", *EMBO Rep.*, 2, pp. 313-317
- Meng, E. C. et al., (1992), "Automated Docking with Grid-Based Energy Evaluation", *J. Comp. Chem.*, 13, pp. 505-524
- 25 Moon, J. B. and Howe, W. J., (1991), "Computer Design of Bioactive Molecules: A Method for Receptor-Based *De Novo* Ligand Design", *Proteins*, 11, pp. 314-328
- 30 Murshudov, G. N., (1997), "Refinement of macromolecular structures by the maximum-likelihood method", *Acta Crystallogr. D. Biol. Crystallogr.* 53, pp. 240-255.
- Natarajan, A. et al., (2004), Synthesis of fluorescein labeled 7-methylguanosinemono-phosphate. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 14, pp. 2657-2660
- 35 Navia, M. A. and Murcko, M. A., (1992), "The Use of Structural Information in Drug Design", *Curr. Opin. Struct. Biol.*, 2, pp. 202-210
- Nishibata, Y, and Itai, A., (1991), "Automatic creation of drug candidate structures based on receptor structure. Starting point for artificial lead generation", *Tetrahedron*, 47, pp. 89858990
- 40 Noah, D. L. and Krug, R. M., (2005), "Influenza virus virulence and its molecular determinants", *Adv. Virus Res.*, 65, pp. 121-145
- 45 Ortega, J. et al., (2000), "Ultrastructural and functional analyses of recombinant influenza virus ribonucleoproteins suggest dimerization of nucleoprotein during virus amplification", *J. Virol.*, 74, pp. 156-163
- Perrakis A. et al., (1999), "Automated protein model building combined with iterative structure refinement", *Nat. Struct. Biol.*, 6, pp. 458-63
- 50 Plotch, S. J. et al., (1981), "A unique cap(m<sup>7</sup>GpppXm)-dependent influenza virion endo-nuclease cleaves capped RNAs to generate the primers that initiate viral RNA transcription", *Cell*, 23, pp. 847-858
- Ren, J. et al., (1996), "Synthesis of a fluorescent 7-methylguanosine analog and a fluorescence spectroscopic study of its reaction with wheat germ cap binding proteins", *Nucleic Acids Res.*, 15, pp. 3629-3634
- 55 Rotstein, S. H. and Murcko, M. A., (1993), "GroupBuild: A Fragment-Based Method for *De Novo* Drug Design", *J. Med. Chem.*, 36, pp. 1700-1710
- 60 Ryder, S. P. and Strobel, S. A., (1999), "Nucleotide analog interference mapping", *Methods*, 18, pp. 38-50
- Sali, A. and Blundell, T. L., (1993), "Comparative protein modelling by satisfaction of spatial restraints", *J. Mol. Biol.*, 234, pp. 779-815
- 65 Sambrook, J. et al., Eds., (1989), "Molecular Cloning: A Laboratory Manual", Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor, New York

- Schneider T. R. and Sheldrick G. M., (2002), "Substructure solution with SHELXD", Acta Crystallogr. D. Biol. Crystallogr. (Pt 10 Pt 2), pp. 1772-1779
- 5 Schulz, G. E. and Schirmer, R. H., (1985), "Principles of Protein Structure", Springer Verlag, New York
- Tarendeau, F. et al., (2007), "Structure and nuclear import function of the C-terminal domain of influenza virus polymerase PB2 subunit", Nat. Struct. Mol. Biol., 14, pp. 229-233
- 10 Terwilliger, T. C. (2000), "Maximum likelihood density modification," Acta Cryst. D. Biol. Crystallogr., 56, pp. 965-972
- Tisdale, M. et al., (1995), "Inhibition of influenza virus transcription by 2'-deoxy-2'-fluoroguanosine", **Antimicrob. Agents Chemother.**, 39, pp. 2454-2458
- 15 Tomassini, J. et al., (1994), "Inhibition of cap (m<sup>7</sup>GpppXm)-dependent endonuclease of influenza virus by 4-substituted 2,4-dioctobutanic acid compounds", Antimicrob. Agents Chemother., 38, pp. 2827-2837
- Tomassini, J. et al., (1996), "A novel antiviral agent which inhibits the endonuclease of influenza viruses", Antimicrob. Agents Chemother., 40, pp. 1189-1193
- 20 Van Duyne, G. D. et al., (1993), "Atomic structures of the human immunophilin FKBP-12 complexes with FK506 and rapamycin", J. Mol. Biol., 229, pp. 105-124
- Von Itzstein, M. et al., (1993), "Rational design of potent sialidase-based inhibitors of influenza virus replication", Nature, 363, pp. 418-423
- 25 Vonrhein C. et al., (2006), "Automated Structure Solution With autoSHARP", Methods Mol. Biol., 364, pp. 215-30
- Wallace, A. C. et al., (1995). "LIGPLOT: A program to generate schematic diagrams of protein-ligand interactions", Prot. Eng., 8, pp. 127-134.
- 30

LISTADO DE SECUENCIAS

- 35 <110>European Molecular Biology Laboratory
- <120>FRAGMENTOS SOLUBLES CON CAPACIDAD PARA UNIRSE A UN CASQUETE DE ARN Y USO DE LOS MISMOS
- 40 <130>492-11 PCT
- <140>
- <141>2008/10/09
- 45 <160>27
- <170>PatentIn versión 3.4
- 50 <210>1  
<211>759  
<212>PRT  
<213>Virus de la gripe A
- 55 <220>  
<221>PB2  
<222>(1)..(759)
- <400>1
- 60 Met Glu Arg Ile Lys Glu Leu Arg Asn Leu Met Ser Gln Ser Arg Thr  
1 5 10 15
- 65 Arg Glu Ile Leu Thr Lys Thr Thr Val Asp His Met Ala Ile Ile Lys  
20 25 30



ES 2 454 773 T3

Lys Tyr Thr Ser Gly Arg Gln Glu Lys Asn Pro Ser Leu Arg Met Lys  
 35 40 45  
 5 Trp Met Met Ala Met Lys Tyr Pro Ile Thr Ala Asp Lys Arg Ile Thr  
 50 55 60  
 Glu Met Val Pro Glu Arg Asn Glu Gln Gly Gln Thr Leu Trp Ser Lys  
 65 70 75 80  
 10 Met Ser Asp Ala Gly Ser Asp Arg Val Met Val Ser Pro Leu Ala Val  
 85 90 95  
 Thr Trp Trp Asn Arg Asn Gly Pro Val Thr Ser Thr Val His Tyr Pro  
 100 105 110  
 15 Lys Val Tyr Lys Thr Tyr Phe Asp Lys Val Glu Arg Leu Lys His Gly  
 115 120 125  
 Thr Phe Gly Pro Val His Phe Arg Asn Gln Val Lys Ile Arg Arg Arg  
 130 135 140  
 Val Asp Ile Asn Pro Gly His Ala Asp Leu Ser Ala Lys Glu Ala Gln  
 145 150 155 160  
 25 Asp Val Ile Met Glu Val Val Phe Pro Asn Glu Val Gly Ala Arg Ile  
 165 170 175  
 Leu Thr Ser Glu Ser Gln Leu Thr Ile Thr Lys Glu Lys Lys Glu Glu  
 180 185 190  
 30 Leu Gln Asp Cys Lys Ile Ser Pro Leu Met Val Ala Tyr Met Leu Glu  
 195 200 205  
 Arg Glu Leu Val Arg Lys Thr Arg Phe Leu Pro Val Ala Gly Gly Thr  
 210 215 220  
 Ser Ser Val Tyr Ile Glu Val Leu His Leu Thr Gln Gly Thr Cys Trp  
 225 230 235 240  
 40 Glu Gln Met Tyr Thr Pro Gly Gly Glu Val Arg Asn Asp Asp Ile Asp  
 245 250 255  
 Gln Ser Leu Ile Ile Ala Ala Arg Asn Ile Val Arg Arg Ala Ser Val  
 260 265 270  
 45 Ser Ala Asp Pro Leu Ala Ser Leu Leu Glu Met Cys His Ser Thr Gln  
 275 280 285  
 Ile Gly Gly Thr Arg Met Val Asp Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu  
 290 295 300  
 50 Glu Gln Ala Val Asp Ile Cys Lys Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser  
 305 310 315 320  
 55 Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser  
 325 330 335  
 Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu  
 340 345 350  
 60 Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys  
 355 360 365  
 65 Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu  
 370 375 380  
 Ile Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val

ES 2 454 773 T3

	385				390					395					400	
	Ala	Met	Val	Phe	Ser	Gln	Glu	Asp	Cys	Met	Ile	Lys	Ala	Val	Arg	Gly
					405					410					415	
5	Asp	Leu	Asn	Phe	Val	Asn	Arg	Ala	Asn	Gln	Arg	Leu	Asn	Pro	Met	His
				420					425					430		
	Gln	Leu	Leu	Arg	His	Phe	Gln	Lys	Asp	Ala	Lys	Val	Leu	Phe	Gln	Asn
10			435					440					445			
	Trp	Gly	Ile	Glu	His	Ile	Asp	Asn	Val	Met	Gly	Met	Val	Gly	Val	Leu
		450					455					460				
15	Pro	Asp	Met	Thr	Pro	Ser	Thr	Glu	Met	Ser	Met	Arg	Gly	Ile	Arg	Val
	465					470					475					480
	Ser	Lys	Met	Gly	Val	Asp	Glu	Tyr	Ser	Ser	Thr	Glu	Arg	Val	Val	Val
20					485					490					495	
	Ser	Ile	Asp	Arg	Phe	Leu	Arg	Val	Arg	Asp	Gln	Arg	Gly	Asn	Val	Leu
				500					505					510		
25	Leu	Ser	Pro	Glu	Glu	Val	Ser	Glu	Thr	His	Gly	Thr	Glu	Arg	Leu	Thr
			515					520					525			
	Ile	Thr	Tyr	Ser	Ser	Ser	Met	Met	Trp	Glu	Ile	Asn	Gly	Pro	Glu	Ser
		530					535					540				
30	Val	Leu	Val	Asn	Thr	Tyr	Gln	Trp	Ile	Ile	Arg	Asn	Trp	Glu	Thr	Val
	545					550					555					560
	Lys	Ile	Gln	Trp	Ser	Gln	Asn	Pro	Thr	Met	Leu	Tyr	Asn	Lys	Met	Glu
35					565					570					575	
	Phe	Glu	Pro	Phe	Gln	Ser	Leu	Val	Pro	Lys	Ala	Ile	Arg	Gly	Gln	Tyr
				580					585					590		
40	Ser	Gly	Phe	Val	Arg	Thr	Leu	Phe	Gln	Gln	Met	Arg	Asp	Val	Leu	Gly
			595					600					605			
	Thr	Phe	Asp	Thr	Thr	Gln	Ile	Ile	Lys	Leu	Leu	Pro	Phe	Ala	Ala	Ala
		610					615					620				
45	Pro	Pro	Lys	Gln	Ser	Arg	Met	Gln	Phe	Ser	Ser	Leu	Thr	Val	Asn	Val
	625					630					635					640
	Arg	Gly	Ser	Gly	Met	Arg	Ile	Leu	Val	Arg	Gly	Asn	Ser	Pro	Val	Phe
50					645					650					655	
	Asn	Tyr	Asn	Lys	Thr	Thr	Lys	Arg	Leu	Thr	Ile	Leu	Gly	Lys	Asp	Ala
				660					665					670		
55	Gly	Thr	Leu	Ile	Glu	Asp	Pro	Asp	Glu	Ser	Thr	Ser	Gly	Val	Glu	Ser
			675					680					685			
	Ala	Val	Leu	Arg	Gly	Phe	Leu	Ile	Leu	Gly	Lys	Glu	Asp	Arg	Arg	Tyr
		690					695					700				
60	Gly	Pro	Ala	Leu	Ser	Ile	Asn	Glu	Leu	Ser	Asn	Leu	Ala	Lys	Gly	Glu
	705					710					715					720
	Lys	Ala	Asn	Val	Leu	Ile	Gly	Gln	Gly	Asp	Val	Val	Leu	Val	Met	Lys
					725					730					735	
65	Arg	Lys	Arg	Asp	Ser	Ser	Ile	Leu	Thr	Asp	Ser	Gln	Thr	Ala	Thr	Lys
				740						745				750		

ES 2 454 773 T3

Arg Ile Arg Met Ala Ile Asn  
755

5 <210> 2  
<211> 770  
<212> PRT  
<213> Virus de la gripe B

10 <220>  
<221> PB2  
<222> (1)..(770)

15 <400> 2

Met Thr Leu Ala Lys Ile Glu Leu Leu Lys Gln Leu Leu Arg Asp Asn  
1 5 10 15

Glu Ala Lys Thr Val Leu Lys Gln Thr Thr Val Asp Gln Tyr Asn Ile  
20 20 25 30

Ile Arg Lys Phe Asn Thr Ser Arg Ile Glu Lys Asn Pro Ser Leu Arg  
35 40 45

25 Met Lys Trp Ala Met Cys Ser Asn Phe Pro Leu Ala Leu Thr Lys Gly  
50 55 60

Asp Met Ala Asn Arg Ile Pro Leu Glu Tyr Lys Gly Ile Gln Leu Lys  
30 65 70 75 80

Thr Asn Ala Glu Asp Ile Gly Thr Lys Gly Gln Met Cys Ser Ile Ala  
85 90 95

35 Ala Val Thr Trp Trp Asn Thr Tyr Gly Pro Ile Gly Asp Thr Glu Gly  
100 105 110

Phe Glu Lys Val Tyr Glu Ser Phe Phe Leu Arg Lys Met Arg Leu Asp  
115 120 125

40 Asn Ala Thr Trp Gly Arg Ile Thr Phe Gly Pro Val Glu Arg Val Arg  
130 135 140

Lys Arg Val Leu Leu Asn Pro Leu Thr Lys Glu Met Pro Pro Asp Glu  
45 145 150 155 160

Ala Ser Asn Val Ile Met Glu Ile Leu Phe Pro Lys Glu Ala Gly Ile  
165 170 175

50 Pro Arg Glu Ser Thr Trp Ile His Arg Glu Leu Ile Lys Glu Lys Arg  
180 185 190

Glu Lys Leu Lys Gly Thr Met Ile Thr Pro Ile Val Leu Ala Tyr Met  
195 200 205

55 Leu Glu Arg Glu Leu Val Ala Arg Arg Arg Phe Leu Pro Val Ala Gly  
210 215 220

Ala Thr Ser Ala Glu Phe Ile Glu Met Leu His Cys Leu Gln Gly Glu  
225 230 235 240

60 Asn Trp Arg Gln Ile Tyr His Pro Gly Gly Asn Lys Leu Thr Glu Ser  
245 250 255

65 Arg Ser Gln Ser Met Ile Val Ala Cys Arg Lys Ile Ile Arg Arg Ser  
260 265 270

Ile Val Ala Ser Asn Pro Leu Glu Leu Ala Val Glu Ile Ala Asn Lys

ES 2 454 773 T3

		275				280						285					
	Thr	Val	Ile	Asp	Thr	Glu	Pro	Leu	Lys	Ser	Cys	Leu	Thr	Ala	Ile	Asp	
		290					295					300					
5	Gly	Gly	Asp	Val	Ala	Cys	Asp	Ile	Ile	Arg	Ala	Ala	Leu	Gly	Leu	Lys	
		305				310					315					320	
	Ile	Arg	Gln	Arg	Gln	Arg	Phe	Gly	Arg	Leu	Glu	Leu	Lys	Arg	Ile	Ser	
10					325					330					335		
	Gly	Arg	Gly	Phe	Lys	Asn	Asp	Glu	Glu	Ile	Leu	Ile	Gly	Asn	Gly	Thr	
				340						345				350			
15	Ile	Gln	Lys	Ile	Gly	Ile	Trp	Asp	Gly	Glu	Glu	Glu	Phe	His	Val	Arg	
			355					360					365				
	Cys	Gly	Glu	Cys	Arg	Gly	Ile	Leu	Lys	Lys	Ser	Lys	Met	Arg	Met	Glu	
20		370					375						380				
	Lys	Leu	Leu	Ile	Asn	Ser	Ala	Lys	Lys	Glu	Asp	Met	Lys	Asp	Leu	Ile	
		385				390					395				400		
	Ile	Leu	Cys	Met	Val	Phe	Ser	Gln	Asp	Thr	Arg	Met	Phe	Gln	Gly	Val	
25					405					410					415		
	Arg	Gly	Glu	Ile	Asn	Phe	Leu	Asn	Arg	Ala	Gly	Gln	Leu	Leu	Ser	Pro	
				420					425					430			
30	Met	Tyr	Gln	Leu	Gln	Arg	Tyr	Phe	Leu	Asn	Arg	Ser	Asn	Asp	Leu	Phe	
			435					440					445				
	Asp	Gln	Trp	Gly	Tyr	Glu	Glu	Ser	Pro	Lys	Ala	Ser	Glu	Leu	His	Gly	
		450					455						460				
35	Ile	Asn	Glu	Leu	Met	Asn	Ala	Ser	Asp	Tyr	Thr	Leu	Lys	Gly	Val	Val	
		465				470					475				480		
	Val	Thr	Lys	Asn	Val	Ile	Asp	Asp	Phe	Ser	Ser	Thr	Glu	Thr	Glu	Lys	
40					485					490					495		
	Val	Ser	Ile	Thr	Lys	Asn	Leu	Ser	Leu	Ile	Lys	Arg	Thr	Gly	Glu	Val	
				500					505					510			
45	Ile	Met	Gly	Ala	Asn	Asp	Val	Ser	Glu	Leu	Glu	Ser	Gln	Ala	Gln	Leu	
			515					520					525				
	Met	Ile	Thr	Tyr	Asp	Thr	Pro	Lys	Met	Trp	Glu	Met	Gly	Thr	Thr	Lys	
50		530					535						540				
	Glu	Leu	Val	Gln	Asn	Thr	Tyr	Gln	Trp	Val	Leu	Lys	Asn	Leu	Val	Thr	
		545				550					555				560		
	Leu	Lys	Ala	Gln	Phe	Leu	Leu	Gly	Lys	Glu	Asp	Met	Phe	Gln	Trp	Asp	
55					565					570					575		
	Ala	Phe	Glu	Ala	Phe	Glu	Ser	Ile	Ile	Pro	Gln	Lys	Met	Ala	Gly	Gln	
			580						585					590			
60	Tyr	Ser	Gly	Phe	Ala	Arg	Ala	Val	Leu	Lys	Gln	Met	Arg	Asp	Gln	Glu	
			595					600					605				
	Val	Met	Lys	Thr	Asp	Gln	Phe	Ile	Lys	Leu	Leu	Pro	Phe	Cys	Phe	Ser	
		610					615					620					
65	Pro	Pro	Lys	Leu	Arg	Ser	Asn	Gly	Glu	Pro	Tyr	Gln	Phe	Leu	Arg	Leu	
					630						635					640	

ES 2 454 773 T3

Val Leu Lys Gly Gly Gly Glu Asn Phe Ile Glu Val Arg Lys Gly Ser  
645 650 655

5 Pro Leu Phe Ser Tyr Asn Pro Gln Thr Glu Val Leu Thr Ile Cys Gly  
660 665 670

Arg Met Met Ser Leu Lys Gly Lys Ile Glu Asp Glu Glu Arg Asn Arg  
675 680 685

10 Ser Met Gly Asn Ala Val Leu Ala Gly Phe Leu Val Ser Gly Lys Tyr  
690 695 700

15 Asp Pro Asp Leu Gly Asp Phe Lys Thr Ile Glu Glu Leu Glu Lys Leu  
705 710 715 720

Lys Pro Gly Glu Lys Ala Asn Ile Leu Leu Tyr Gln Gly Lys Pro Val  
725 730 735

20 Lys Val Val Lys Arg Lys Arg Tyr Ser Ala Leu Ser Asn Asp Ile Ser  
740 745 750

Gln Gly Ile Lys Arg Gln Arg Met Thr Val Glu Ser Met Gly Trp Ala  
755 760 765

25 Leu Ser  
770

<210> 3  
30 <211> 774  
<212> PRT  
<213> Virus de la gripe C

<220>  
35 <221> PB2  
<222> (1)..(774)

<400> 3

40 Met Ser Phe Leu Leu Thr Ile Ala Lys Glu Tyr Lys Arg Leu Cys Gln  
1 5 10 15

Asp Ala Lys Ala Ala Gln Met Met Thr Val Gly Thr Val Ser Asn Tyr  
20 25 30

45 Thr Thr Phe Lys Lys Trp Thr Thr Ser Arg Lys Glu Lys Asn Pro Ser  
35 40 45

50 Leu Arg Met Arg Trp Ala Met Ser Ser Lys Phe Pro Ile Ile Ala Asn  
50 55 60

Lys Arg Met Leu Glu Glu Ala Gln Ile Pro Lys Glu His Asn Asn Val  
65 70 75 80

55 Ala Leu Trp Glu Asp Thr Glu Asp Val Ser Lys Arg Asp His Val Leu  
85 90 95

Ala Ser Ala Ser Cys Ile Asn Tyr Trp Asn Phe Cys Gly Pro Cys Val  
100 105 110

60 Asn Asn Ser Glu Val Ile Lys Glu Val Tyr Lys Ser Arg Phe Gly Arg  
115 120 125

65 Leu Glu Arg Arg Lys Glu Ile Met Trp Lys Glu Leu Arg Phe Thr Leu  
130 135 140

Val Asp Arg Gln Arg Arg Arg Val Asp Thr Gln Pro Val Glu Gln Arg

# ES 2 454 773 T3

	145	150	155	160
	Leu Arg Thr Gly	Glu Ile Lys Asp Leu Gln Met Trp Thr Leu Phe Glu		
5		165	170	175
	Asp Glu Ala Pro	Leu Ala Ser Lys Phe Ile Leu Asp Asn Tyr Gly Leu		
		180	185	190
10	Val Lys Glu Met	Arg Ser Lys Phe Ala Asn Lys Pro Leu Asn Lys Glu		
		195	200	205
	Val Val Ala His	Met Leu Glu Lys Gln Phe Asn Pro Glu Ser Arg Phe		
		210	215	220
15	Leu Pro Val Phe	Gly Ala Ile Arg Pro Glu Arg Met Glu Leu Ile His		
		225	230	235
	Ala Leu Gly Gly	Glu Thr Trp Ile Gln Glu Ala Asn Thr Ala Gly Ile		
20		245	250	255
	Ser Asn Val Asp	Gln Arg Lys Asn Asp Met Arg Ala Val Cys Arg Lys		
		260	265	270
25	Val Cys Leu Ala	Ala Asn Ala Ser Ile Met Asn Ala Lys Ser Lys Leu		
		275	280	285
	Val Glu Tyr Ile	Lys Ser Thr Ser Met Arg Ile Gly Glu Thr Glu Arg		
		290	295	300
30	Lys Leu Glu Glu	Leu Ile Leu Glu Thr Asp Asp Val Ser Pro Glu Val		
		305	310	315
	Thr Leu Cys Lys	Ser Ala Leu Gly Gly Pro Leu Gly Lys Thr Leu Ser		
35		325	330	335
	Phe Gly Pro Met	Leu Leu Lys Lys Ile Ser Gly Ser Gly Val Lys Val		
		340	345	350
40	Lys Asp Thr Val	Tyr Ile Gln Gly Val Arg Ala Val Gln Phe Glu Tyr		
		355	360	365
	Trp Ser Glu Gln	Glu Glu Phe Tyr Gly Glu Tyr Lys Ser Ala Thr Ala		
		370	375	380
45	Leu Phe Ser Arg	Lys Glu Arg Ser Leu Glu Trp Ile Thr Ile Gly Gly		
		385	390	395
	Gly Ile Asn Glu	Asp Arg Lys Arg Leu Leu Ala Met Cys Met Ile Phe		
50		405	410	415
	Cys Arg Asp Gly	Asp Tyr Phe Lys Asp Ala Pro Ala Thr Ile Thr Met		
		420	425	430
55	Ala Asp Leu Ser	Thr Lys Leu Gly Arg Glu Ile Pro Tyr Gln Tyr Val		
		435	440	445
	Met Met Asn Trp	Ile Gln Lys Ser Glu Asp Asn Leu Glu Ala Leu Leu		
		450	455	460
60	Tyr Ser Arg Gly	Ile Val Glu Thr Asn Pro Gly Lys Met Gly Ser Ser		
		465	470	475
	Met Gly Ile Asp	Gly Ser Lys Arg Ala Ile Lys Ser Leu Arg Ala Val		
65		485	490	495
	Thr Ile Gln Ser	Gly Lys Ile Asp Met Pro Glu Ser Lys Glu Lys Ile		
		500	505	510

ES 2 454 773 T3

His Leu Glu Leu Ser Asp Asn Leu Glu Ala Phe Asp Ser Ser Gly Arg  
 515 520 525  
 5 Ile Val Ala Thr Ile Leu Asp Leu Pro Ser Asp Lys Lys Val Thr Phe  
 530 535 540  
 Gln Asp Val Ser Phe Gln His Pro Asp Leu Ala Val Leu Arg Asp Glu  
 545 550 555 560  
 10 Lys Thr Ala Ile Thr Lys Gly Tyr Glu Ala Leu Ile Lys Arg Leu Gly  
 565 570 575  
 Thr Gly Asp Asn Asp Ile Pro Ser Leu Ile Ala Lys Lys Asp Tyr Leu  
 580 585 590  
 Ser Leu Tyr Asn Leu Pro Glu Val Lys Leu Met Ala Pro Leu Ile Arg  
 595 600 605  
 20 Pro Asn Arg Lys Gly Val Tyr Ser Arg Val Ala Arg Lys Leu Val Ser  
 610 615 620  
 Thr Gln Val Thr Thr Gly His Tyr Ser Leu His Glu Leu Ile Lys Val  
 625 630 635 640  
 25 Leu Pro Phe Thr Tyr Phe Ala Pro Lys Gln Gly Met Phe Glu Gly Arg  
 645 650 655  
 Leu Phe Phe Ser Asn Asp Ser Phe Val Glu Pro Gly Val Asn Asn Asn  
 660 665 670  
 Val Phe Ser Trp Ser Lys Ala Asp Ser Ser Lys Ile Tyr Cys His Gly  
 675 680 685  
 35 Ile Ala Ile Arg Val Pro Leu Val Val Gly Asp Glu His Met Asp Thr  
 690 695 700  
 Ser Leu Ala Leu Leu Glu Gly Phe Ser Val Cys Glu Asn Asp Pro Arg  
 705 710 715 720  
 40 Ala Pro Met Val Thr Arg Gln Asp Leu Ile Asp Val Gly Phe Gly Gln  
 725 730 735  
 Lys Val Arg Leu Phe Val Gly Gln Gly Ser Val Arg Thr Phe Lys Arg  
 740 745 750  
 45 Thr Ala Ser Gln Arg Ala Ala Ser Ser Asp Val Asn Lys Asn Val Lys  
 755 760 765  
 50 Lys Ile Lys Met Ser Asn  
 770  
 <210> 4  
 <211> 262  
 55 <212> PRT  
 <213> Virus de la gripe A  
 <220>  
 <221> PB2 235 to 496  
 60 <222> (1)..(262)  
 <400> 4  
 Thr Gln Gly Thr Cys Trp Glu Gln Met Tyr Thr Pro Gly Gly Glu Val  
 65 1 5 10 15  
 Arg Asn Asp Asp Ile Asp Gln Ser Leu Ile Ile Ala Ala Arg Asn Ile





ES 2 454 773 T3

Ile Gly Gly Thr Arg Met Val Asp Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu  
50 55 60

5 Glu Gln Ala Val Asp Ile Cys Lys Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser  
65 70 75 80

Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser  
85 90 95

10 Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu  
100 105 110

Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys  
115 120 125

15 Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu  
130 135 140

20 Ile Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val  
145 150 155 160

Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala Val Arg Gly  
165 170 175

25 Asp Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met His  
180 185 190

Gln Leu Leu Arg His Phe Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln Asn  
195 200 205

30 Trp Gly Ile Glu His Ile Asp Asn Val Met Gly Met Val Gly Val Leu  
210 215 220

35 Pro Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu Met Ser Met Arg Gly Ile Arg Val  
225 230 235 240

Ser Lys Met

40 <210> 6  
<211> 216  
<212> PRT  
<213> Virus de la grippe A

45 <220>  
<221> PB2 268 to 483  
<222> (1)..(216)

50 <400> 6

Arg Arg Ala Ser Val Ser Ala Asp Pro Leu Ala Ser Leu Leu Glu Met  
1 5 10 15

55 Cys His Ser Thr Gln Ile Gly Gly Thr Arg Met Val Asp Ile Leu Arg  
20 25 30

Gln Asn Pro Thr Glu Glu Gln Ala Val Asp Ile Cys Lys Ala Ala Met  
35 40 45

60 Gly Leu Arg Ile Ser Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys  
50 55 60

Arg Thr Ser Gly Ser Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly  
65 70 75 80

65 Asn Leu Gln Thr Leu Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe  
85 90 95

ES 2 454 773 T3

Thr Met Val Gly Lys Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg  
100 105 110

5 Arg Leu Val Gln Leu Ile Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala  
115 120 125

Glu Ala Ile Ile Val Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile  
130 135 140

10 Lys Ala Val Arg Gly Asp Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg  
145 150 155 160

15 Leu Asn Pro Met His Gln Leu Leu Arg His Phe Gln Lys Asp Ala Lys  
165 170 175

Val Leu Phe Gln Asn Trp Gly Ile Glu His Ile Asp Asn Val Met Gly  
180 185 190

20 Met Val Gly Val Leu Pro Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu Met Ser Met  
195 200 205

Arg Gly Ile Arg Val Ser Lys Met  
210 215

25 <210> 7  
<211> 204  
<212> PRT  
<213> Virus de la grippe A

30 <220>  
<221> PB2 277 to 480  
<222> (1)..(204)

35 <400> 7

Leu Ala Ser Leu Leu Glu Met Cys His Ser Thr Gln Ile Gly Gly Thr  
1 5 10 15

40 Arg Met Val Asp Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu Glu Gln Ala Val  
20 25 30

Asp Ile Cys Lys Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser Ser Ser Phe Ser  
35 40 45

45 Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser Ser Ile Lys Arg  
50 55 60

Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu Lys Ile Arg Val  
65 70 75 80

His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg Ala Thr Ala  
85 90 95

55 Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu Ile Val Ser Gly  
100 105 110

Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val Ala Met Val Phe  
115 120 125

60 Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala Val Arg Gly Asp Leu Asn Phe  
130 135 140

Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met His Gln Leu Leu Arg  
145 150 155 160

65 His Phe Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln Asn Trp Gly Ile Glu

# ES 2 454 773 T3

```

                165                170                175
His Ile Asp Asn Val Met Gly Met Val Gly Val Leu Pro Asp Met Thr
      180                185                190
5  Pro Ser Thr Glu Met Ser Met Arg Gly Ile Arg Val
      195                200

<210> 8
10 <211> 202
    <212> PRT
    <213> Virus de la gripe A

<220>
15 <221> PB2 281 to 482
    <222> (1)..(202)

<400> 8
20 Leu Glu Met Cys His Ser Thr Gln Ile Gly Gly Thr Arg Met Val Asp
    1                5                10                15

    Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu Glu Gln Ala Val Asp Ile Cys Lys
    20                25                30
25 Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe
    35                40                45

    Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val
    50                55                60
30 Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr
    65                70                75                80

    Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys
    85                90                95
35 Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu Ile Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln
    100                105                110
40 Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp
    115                120                125

    Cys Met Ile Lys Ala Val Arg Gly Asp Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala
    130                135                140
45 Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met His Gln Leu Leu Arg His Phe Gln Lys
    145                150                155                160

    Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln Asn Trp Gly Ile Glu His Ile Asp Asn
    165                170                175
50 Val Met Gly Met Val Gly Val Leu Pro Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu
    180                185                190
55 Met Ser Met Arg Gly Ile Arg Val Ser Lys
    195                200

<210> 9
60 <211> 194
    <212> PRT
    <213> Virus de la gripe A

<220>
65 <221> PB2 290 to 483
    <222> (1)..(194)

```

ES 2 454 773 T3

<400> 9

5 Gly Gly Thr Arg Met Val Asp Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu Glu  
1 5 10 15

Gln Ala Val Asp Ile Cys Lys Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser Ser  
20 25 30

10 Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser Ser  
35 40 45

Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu Lys  
50 55 60

15 Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg  
65 70 75 80

Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu Ile  
85 90 95

20 Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val Ala  
100 105 110

25 Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala Val Arg Gly Asp  
115 120 125

Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met His Gln  
130 135 140

30 Leu Leu Arg His Phe Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln Asn Trp  
145 150 155 160

Gly Ile Glu His Ile Asp Asn Val Met Gly Met Val Gly Val Leu Pro  
165 170 175

35 Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu Met Ser Met Arg Gly Ile Arg Val Ser  
180 185 190

40 Lys Met

<210> 10  
<211> 188  
<212> PRT  
45 <213> Virus de la gripe A

<220>  
<221> PB2 295 to 482  
<222> (1)..(188)

50 <400> 10

55 Val Asp Ile Leu Arg Gln Asn Pro Thr Glu Glu Gln Ala Val Asp Ile  
1 5 10 15

Cys Lys Ala Ala Met Gly Leu Arg Ile Ser Ser Ser Phe Ser Phe Gly  
20 25 30

60 Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser Ser Ile Lys Arg Glu Glu  
35 40 45

Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu Lys Ile Arg Val His Glu  
50 55 60

65 Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg Ala Thr Ala Ile Leu  
65 70 75 80

ES 2 454 773 T3

Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu Ile Val Ser Gly Arg Asp  
 85 90 95  
 5 Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val Ala Met Val Phe Ser Gln  
 100 105 110  
 Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala Val Arg Gly Asp Leu Asn Phe Val Asn  
 115 120 125  
 10 Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met His Gln Leu Leu Arg His Phe  
 130 135 140  
 Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln Asn Trp Gly Ile Glu His Ile  
 145 150 155 160  
 15 Asp Asn Val Met Gly Met Val Gly Val Leu Pro Asp Met Thr Pro Ser  
 165 170 175  
 20 Thr Glu Met Ser Met Arg Gly Ile Arg Val Ser Lys  
 180 185  
 <210> 11  
 <211> 166  
 <212> PRT  
 25 <213> Virus de la gripe A  
 <220>  
 <221> PB2 318 to 483 R389K  
 <222> (1)..(166)  
 30 <400> 11  
 Arg Ile Ser Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr  
 1 5 10 15  
 35 Ser Gly Ser Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu  
 20 25 30  
 40 Gln Thr Leu Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met  
 35 40 45  
 Val Gly Lys Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu  
 50 55  
 45 Val Gln Leu Ile Val Ser Gly Lys Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala  
 65 70 75 80  
 Ile Ile Val Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala  
 85 90 95  
 50 Val Arg Gly Asp Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn  
 100 105 110  
 55 Pro Met His Gln Leu Leu Arg His Phe Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu  
 115 120 125  
 Phe Gln Asn Trp Gly Ile Glu His Ile Asp Asn Val Met Gly Met Val  
 130 135 140  
 60 Gly Val Leu Pro Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu Met Ser Met Arg Gly  
 145 150 155 160  
 Ile Arg Val Ser Lys Met  
 165  
 65 <210> 12  
 <211> 164

ES 2 454 773 T3

<212>PRT  
<213>Virus de la gripe A

<220>  
<221>PB2 320 to 483  
<222>(1)..(164)

<400>12

10 Ser Ser Ser Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly  
1 5 10 15

Ser Ser Ile Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr  
20 25 30

15 Leu Lys Ile Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly  
35 40 45

20 Lys Arg Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln  
50 55 60

Leu Ile Val Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile  
65 70 75 80

25 Val Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met Ile Lys Ala Val Arg  
85 90 95

Gly Asp Leu Asn Phe Val Asn Arg Ala Asn Gln Arg Leu Asn Pro Met  
100 105 110

30 His Gln Leu Leu Arg His Phe Gln Lys Asp Ala Lys Val Leu Phe Gln  
115 120 125

35 Asn Trp Gly Ile Glu His Ile Asp Asn Val Met Gly Met Val Gly Val  
130 135 140

Leu Pro Asp Met Thr Pro Ser Thr Glu Met Ser Met Arg Gly Ile Arg  
145 150 155 160

40 Val Ser Lys Met

<210>13  
<211>82  
<212>PRT  
<213>Virus de la gripe A

<220>  
<221>PB2 323 to 404  
<222>(1)..(82)

<400>13

55 Phe Ser Phe Gly Gly Phe Thr Phe Lys Arg Thr Ser Gly Ser Ser Ile  
1 5 10 15

Lys Arg Glu Glu Glu Val Leu Thr Gly Asn Leu Gln Thr Leu Lys Ile  
20 25 30

60 Arg Val His Glu Gly Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg Ala  
35 40 45

Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg Leu Val Gln Leu Ile Val  
50 55 60

65 Ser Gly Arg Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val Ala Met

ES 2 454 773 T3

	65		70		75		80
--	----	--	----	--	----	--	----

Val Phe

5

<210>14  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A

10

<220>  
 <221>PB2 320 to 330  
 <222>(1)..(11)

15

<400>14

	Ser	Ser	Ser	Phe	Ser	Phe	Gly	Gly	Phe	Thr	Phe
	1				5					10	

20

<210>15  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A

25

<220>  
 <221>PB2 330 to 340  
 <222>(1)..(11)

<400>15

30

	Phe	Lys	Arg	Thr	Ser	Gly	Ser	Ser	Ile	Lys	Arg
	1				5					10	

35

<210>16  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A

40

<220>  
 <221>PB2 340 to 350  
 <222>(1)..(11)

<400>16

45

	Arg	Glu	Glu	Glu	Val	Leu	Thr	Gly	Asn	Leu	Gln
	1				5					10	

50

<210>17  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A

55

<220>  
 <221>PB2 350 to 360  
 <222>(1)..(11)

<400>17

	Gln	Thr	Leu	Lys	Ile	Arg	Val	His	Glu	Gly	Tyr
	1				5					10	

65

<210>18  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A

<220>

# ES 2 454 773 T3

<221>PB2 360 to 370  
 <222> (1)..(11)  
  
 <400>18  
 5 Tyr Glu Glu Phe Thr Met Val Gly Lys Arg Ala  
   1                  5                  10  
  
 <210>19  
 10 <211>11  
   <212>PRT  
   <213>Virus de la gripe A  
  
 <220>  
 15 <221>PB2 370 to 380  
   <222> (1)..(11)  
  
 <400>19  
 20 Ala Thr Ala Ile Leu Arg Lys Ala Thr Arg Arg  
   1                  5                  10  
  
 <210>20  
 <211>11  
 25 <212>PRT  
   <213>Virus de la gripe A  
  
 <220>  
 <221>PB2 380 to 390  
 30 <222> (1)..(11)  
  
 <400>20  
 Arg Leu Val Gln Leu Ile Val Ser Gly Arg Asp  
 35 1                  5                  10  
  
 <210>21  
 <211>11  
 <212>PRT  
 40 <213>Virus de la gripe A  
  
 <220>  
 <221>PB2 390 to 400  
 <222> (1)..(11)  
 45 <400>21  
  
 Asp Glu Gln Ser Ile Ala Glu Ala Ile Ile Val  
 50 1                  5                  10  
  
 <210>22  
 <211>11  
 <212>PRT  
 <213>Virus de la gripe A  
 55  
 <220>  
 <221>PB2 400 to 410  
 <222> (1)..(11)  
 60 <400>22  
  
 Val Ala Met Val Phe Ser Gln Glu Asp Cys Met  
   1                  5                  10  
 65 <210>23  
   <211>2277  
   <212>ADN



# ES 2 454 773 T3

<213>Virus de la gripe A

<220>

<221>PB2 WT

5 <222> (1)..(2277)

<400> 23

	atggaaagaa	taaaagaact	acggaacctg	atgtcacagt	ctcgactcg	cgagatacta	60
10	acaaaaacca	cagtggacca	catggccata	attaagaaat	acacatcagg	gagacaggaa	120
	aagaaccogt	cacttaggat	gaaatggatg	atggcaatga	aatatccaat	tacagctgac	180
15	aagaggataa	cagaaatggt	tcctgagaga	aatgagcaag	gacaaacct	atggagtaaa	240
	atgagtgatg	ccgggtcaga	tcgagtgatg	gtatcacctt	tggcagtgac	atggtggaat	300
	agaaatggac	cagtgacaag	tacggttcat	tatccaaaag	tctacaagac	ttattttgat	360
20	aaagtcgaaa	ggttaaaaca	tggaaccttt	ggccctgtcc	attttagaaa	ccaagtcaaa	420
	atagccgaa	gagttgacat	aaacctggt	catgcagacc	tcagtgccaa	ggaggcacia	480
25	gatgtaatca	tggaagtgt	tttcccaat	gaagtggggg	ccaggatact	aacgtcggaa	540
	tcacaattga	caataaccaa	agagaaaaaa	gaagaactcc	aagattgcaa	aatttctcct	600
	ttgatggttg	catacatggt	agagagagaa	cttgtccgaa	aaacgagatt	tctcccagtt	660
30	gctggtggaa	caagcagtgt	gtacattgaa	gtgttacact	tgactcaagg	aacgtggtgg	720
	gaacagatgt	acactccagg	tggagaagtg	aggaatgacg	atattgacca	aagcctaatt	780
35	attgcagcca	ggaacatagt	gagaagagca	tcagtatcag	cagatccact	agcatcttta	840
	ttggagatgt	gccacagcac	acaaattggc	gggacaagga	tgggtggacat	tcttagacag	900
	aacccgacgg	aagaacaagc	tgtggatata	tgcaaggctg	caatgggact	gagaatcagc	960
40	tcaticttca	gttttggtgg	gttcacattt	aagagaacaa	gcgggtcatc	aatcaaaaaga	1020
	gaggaagaag	tgcttacggg	caatctccaa	acattgaaaa	taagggtgca	tgaagggtag	1080
45	gaggagtcca	caatggtggg	gaaaagggca	acagctatac	tcagaaaagc	aaccaggaga	1140
	ttggttcagc	ttatagtgag	tggaagggac	gagcagtcaa	tagccgaagc	gataattgta	1200
	gccatggtgt	tttcacaaga	ggattgcatg	ataaaagcag	ttagaggtga	cctgaatttc	1260
50	gttaacaggg	caaatcagcg	gttgaatccc	atgcaccaac	ttttaaggca	ttttcagaaa	1320
	gatgcgaaag	tgctttttca	gaattgggga	attgaacata	ttgacaatgt	gatgggaatg	1380
55	gttgagat	taccagacat	gactccaagc	acagagatgt	caatgagagg	aataagagtc	1440
	agcaaatgg	gcgtggatga	atactccagc	acagagaggg	tagtgggttag	cattgatcgg	1500
	tttttgagag	ttcgagacca	acgtgggaat	gtattactat	ctcctgagga	ggtcagtgaa	1560
60	acacatggga	cagagagact	gacaataact	tactcatcgt	caatgatgtg	ggagattaat	1620
	ggccctgagt	cagtgttggt	caatacctat	caatggatca	tcagaaattg	ggaaactggt	1680
65	aaaattcaat	ggtctcagaa	tcctacaatg	ttgtacaaca	aatggaatt	tgagccattt	1740
	cagtcttttag	ttcctaaggc	cattagaggc	caatacagtg	gatttgtcag	aactctattc	1800

# ES 2 454 773 T3

	caacaaatga gggatgtact tgggacattt gataccaccc agataataaa gcttctcccc	1860
	tttgcagccg ccccaacaaa gcaaagtaga atgcagttct cttcattgac tgtgaatgtg	1920
5	aggggatcag ggatgagaat acttctaagg ggcaattctc ctgtattcaa ctacaacaag	1980
	accactaaaa gactaacaat tctcggaaaa gatgctggca ctttaattga agaccagat	2040
10	gaaagcacat ccggagtgga gtccgctggt ttgagaggat ttctcattct aggtaaggaa	2100
	gatagaagat acggaccagc attaagcatc aatgaactga gcaaccttgc aaaaggagaa	2160
	aaggctaattg tgctaattgg gcaaggagac gtggtggtgg taatgaaacg aaaacgggac	2220
15	tctagcatac ttactgacag ccagacagcg accaaaagaa ttcggatggc catcaat	2277
	<210> 24 <211> 2277 <212> ADN <213> Virus de la gripe A	
20	<220> <221> PB2 Arg389Lys <222> (1)..(2277)	
25	<400> 24 atggaagaa taaaagaact acggaacctg atgtcacagt ctcgactcg cgagatacta	
	60	
	acaaaaacca cagtggacca catggcata attaagaaat acacatcagg gagacaggaa	120
30	aagaaccogt cacttaggat gaaatggatg atggcaatga aatatccaat tacagctgac	180
	aagaggataa cagaaatggt tcctgagaga aatgagcaag gacaaacct atggagtaaa	240
35	atgagtgatg ccgggtcaga tcgagtgatg gtatcacctt tggcagtgac atggtggaat	300
	agaaatggac cagtgacaag tacggttcat tatccaaaag tctacaagac ttattttgat	360
40	aaagtcgaaa ggtaaaaaca tggaaacctt gccctgtcc attttagaaa ccaagtcaaa	420
	atagccgaa gagttgacat aaacctggt catgcagacc tcagtgccaa ggaggcacia	480
	gatgtaatca tggaaattgt tttcccaat gaagtggggg ccaggatact aacgtcggaa	540
45	tcacaattga caataaccaa agagaaaaaa gaagaactcc aagattgcaa aatttctcct	600
	ttgatggttg catacatggt agagagagaa cttgtccgaa aaacgagatt tctcccagtt	660
50	gctggtggaa caagcagtgt gtacattgaa gtgttacact tgactcaagg aacgtggtgg	720
	gaacagatgt aactccagg tggagaagtg aggaatgacg atattgacca aagcctaatt	780
	attgcagcca ggaacatagt gagaagagca tcagtatcag cagatccact agcatcttta	840
55	ttggagatgt gccacagcac acaaatggc gggacaagga tgggtggacat tcttagacag	900
	aacctgacgg aagaacaagc tgtggatata tgcaaggctg caatgggact gagaatcagc	960
60	tcaccttca gttttggtgg gttcacattt aagagaacaa gcgggtcatc aatcaaaaga	1020
	gaggaagaag tgcttacggg caatctccaa acattgaaaa taagggtgca tgaagggtac	1080
	gaggagtcca caatggtggg gaaaagggca acagctatac tcagaaaagc aaccaggaga	1140
65	ttggttcagc ttatagtgag tggaaaggac gagcagtcaa tagccgaagc gataattgta	1200
	gccatggtgt tttcacaaga ggattgcatg ataaaagcag ttagaggtga cctgaatttc	1260

# ES 2 454 773 T3

```

gttaacaggg caaatcagcg gttgaatccc atgcaccaac ttttaaggca ttttcagaaa 1320
gatgcgaaaag tgctttttca gaattgggga attgaacata ttgacaatgt gatgggaatg 1380
5 gttggagtat taccagacat gactccaagc acagagatgt caatgagagg aataagagtc 1440
agcaaaatgg gcgtaggatga atactccagc acagagaggg tagtggttag cattgatcgg 1500
10 tttttgagag ttcgagacca acgtgggaat gtattactat ctctgagga ggtagtgaa 1560
acacatggga cagagagact gacaataact tactcatcgt caatgatgtg ggagattaat 1620
ggccctgagt cagtgttggt caatacctat caatggatca tcagaaattg ggaaactggt 1680
15 aaaatcaat ggtctcagaa tctacaatg ttgtacaaca aaatggaatt tgagccattt 1740
cagtctttag ttctaaggc cattagaggc caatacagtg gatttgtcag aactctattc 1800
20 caacaaatga gggatgtact tgggacattt gataccacc agataataaa gcttctcccc 1860
tttgagccg ccccaacaaa gcaaagtaga atgcagttct cttcattgac tgtgaatgtg 1920
aggggatcag ggatgagaat acttgaagg ggcaattctc ctgtattcaa ctacaacaag 1980
25 accactaaaa gactaacaat tctcggaaaa gatgctggca ctttaattga agaccagat 2040
gaaagcacat ccggagtgga gtccgctggt ttgagaggat ttctcattct aggtaaggaa 2100
30 gatagaagat acggaccagc attaagcatc aatgaactga gcaaccttgc aaaaggagaa 2160
aaggctaatg tgctaattgg gcaaggagac gtggtgttgg taatgaaacg aaaacgggac 2220
tctagcatac ttactgacag ccagacagcg accaaaagaa ttcggatggc catcaat 2277
35
<210> 25
<211> 2277
<212> ADN
<213> Virus de la gripe A
40
<220>
<221> PB2 synthetic gene, optimized for E.coli codon usage
<222> (1)..(2274)
45
<400> 25
atggaacgca ttaaagaact gcgcaacctg atgagccaga gccgtaccg tgaattctg 60
acaaaaacca ccgtggatca catggcgatc atcaaaaaat ataccagcgg ccgtcaggaa 120
50
aaaaatccga gcttgcgcat gaaatggatg atggcgatga aatatccgat caccgcggat 180
aaacgcatta ccgaaatggt gccggaacgt aatgaacagg gccagaccct gtggagcaaa 240
atgagcgatg cgggtagcga tcgtgttatg gttagcccgc tggcggttac ctggtggaat 300
55
cgtaatggtc cggttaccag caccgtgcat tatccgaaag tgtacaaaac ctatttogat 360
aaagtggaac gcctgaaaca tggcaccttt ggcccgggtg attttcgtaa ccaggtgaaa 420
60
attcgtcgtc gcgtaggatat taatccgggt catgctggatc tgagcgcgaa agaagcgcga 480
gacgttatca tggaagtgt tttcccgaac gaagttggtg cgcgtattct gaccagcgaa 540
agccagctga ccatcaccaa agaaaaaaaa gaagaactgc aggattgcaa aattagcccg 600
65
ctgatggtgg cgtatatgct ggaacgtgaa ctggttogta aaaccggtt tctgccggtt 660

```

# ES 2 454 773 T3

```

gcggggtggca ccagcagcgt gtatatgaa gtgctgcac tgaccaggg cacctggtgg 720
gaacagatgt atacccggg tgggaagtg cgtaacgatg atacgatca gagcctgatt 780
5 attgcggcgc gtaacattgt tcgtcgtgcg agcgttagcg cggatccgct ggcgagcctg 840
ctggaaatgt gtcatagcac ccagattggt ggcacccgta tggttgatat tctgcgtcag 900
aaccgcaccg aagaacaggc ggtggatatt tgtaaagcgg cgatgggtct gcgtattagc 960
10 agcagcttta gctttggcgg ctttaccttt aaacgtacca gcggcagcag cattaaacgt 1020
gaagaagaag tgctgaccgg taatctgcag accctgaaaa ttcgtgtgca cgaaggctat 1080
15 gaagaattca cgatggttgg caaacgtgcg acccgcgattc tgcgtaaagc gaccctgctg 1140
ctggttcagc tgattgtgag cggcaaagat gaacagagca ttgcggaagc gattatcgtt 1200
gcatggttt tcagccagga agattgcatg attaaagcgg ttcgtggcga tctgaacttt 1260
20 gtgaaccgtg cgaaccagcg tctgaatccg atgcaccagc tgctgcgcca ttttcagaaa 1320
gatgcgaaag tgctgtttca gaactggggc atcgaaacata tcgataacgt gatgggcatg 1380
25 gttggtgttc tgccggatat gaccccgagc accgaaatga gcatgcgtgg tattcgtgtg 1440
agcaaatgg gcgtggatga atacagcagc accgaacgtg tggttgtgag cattgatcgt 1500
tttctgcgtg tcgctgatca gcgtggtaat gttctgctga gcccgagga ggttagcgaa 1560
30 acgcacggca ccgaacgtct gaccattacc tatagcagca gcatgatgtg ggagattaac 1620
ggtccgaaa gcgtgctggt gaacacctat cagtggatca ttcgcaactg gaaaccgtg 1680
35 aaaattcagt ggagccagaa tccgaccatg ctgtacaaca aaatggaatt cgaaccgttt 1740
cagagcctgg ttccgaaagc gattcgtggt cagtatagcg gttttgtgcg taccctgttt 1800
cagcagatgc gtgatgttct gggcaccttt gataccacc agatcattaa actgctgccg 1860
40 tttgcggcgg caccgccgaa acagagccgt atgcagttta gcagcctgac cgtgaatggt 1920
cgtggtagcg gcatgcgtat tctggttcgt ggtaacagcc cgggtttcaa ctataacaaa 1980
45 accaccaaac gcctgacat tctgggtaaa gatgcgggca ccctgattga agatccggat 2040
gaaagcacca gcggcgttga aagcgcgggt ctgcgcgggt ttctgattct gggcaaggag 2100
gatcgtcgtt acggtccggc gctgagcatt aacgaactga gcaatctggc gaaaggcgaa 2160
50 aaagcgaacg ttctgattgg tcagggtgat gtggtgctgg tgatgaaacg taaacgcgat 2220
agcagcatte tgaccgatag ccagaccgcg accaaacgta ttcgtatggc gattaat 2277
55 <210> 26
<211> 2313
<212> ADN
<213> Virus de la gripe B
60 <220>
<221> PB2
<222> (1)..(2313)
<400> 26
65 atgacattgg ctaaaattga attgttaaaa caactgttaa gggacaatga agccaaaaca 60
gtattgaaac aaacaacggt agaccaatat aacataataa gaaaattcaa tacatcaaga 120

```

# ES 2 454 773 T3

	attgaaaaga acccttcatt aaggatgaag tgggcaatgt gttctaattt tcccttggtc	180
5	ttgaccaagg gtgacatggc aaacagaatc cccttggaat acaagggaaat acaacttaaa	240
	acaaatgctg aagacatagg aaccaaaggc caaatgtgct caatagcagc agttacctgg	300
	tggaaatacat atggaccaat aggagatact gaaggtttcg aaaaagtcta cgaaagcttt	360
10	tttctcagaa agatgagact tgacaatgcc acttggggcc gaataacttt tggcccagtt	420
	gaaagagtaa gaaaaagggc actgctaaac cctctcacta aggaaatgcc tccagatgaa	480
15	gcaagtaatg tgataatgga aatattgttc cctaaggaag caggaatacc aagagaatct	540
	acttggatc atagggaaact gataaaagaa aaaagagaaa aattgaaagg aacgatgata	600
	actcccattg tactggcata catgcttgag agggaattgg ttgccaggag aaggttctcg	660
20	ccggtggcag gagcaacatc agctgagttc atagaaatgc tacactgctt acaaggtgaa	720
	aattggagac aaatatacca cccgggaggg aataaactaa ctgaatctag gtctcaatcg	780
25	atgattgtgg cttgtagaaa gataatcaga agatcaatag tcgcatcaaa cccattggag	840
	ctggctgtag aaattgcaaa caagactgtg atagatactg aacctttaaa atcatgtctg	900
	acagccatag acggagggtga tgtcgctgtg gacataataa gagctgcatt aggactaaag	960
30	atcagacaaa gacaaagatt tggacgactt gaactaaaaa ggatatcagg aagaggattc	1020
	aaaaatgatg aagaaatatt aatcgggaac ggaacaatac agaagattgg aatatgggac	1080
35	ggagaagagg agttccatgt aagatgtggt gaatgcaggg gaatattaaa aaagagcaaa	1140
	atgagaatgg aaaaactact aataaattca gctaaaaagg aagacatgaa agatttaata	1200
	atcttgtgca tggtattttc tcaagacact aggatgttcc aaggagtaag gggagaaata	1260
40	aattttctta atagagcagg ccaactttta tctccaatgt accaactcca aagatatttt	1320
	ttgaatagaa gtaacgatct ctttgatcaa tgggggtatg aggaatcacc caaagcaagt	1380
45	gagctacatg ggataaatga attaatgaat gcatctgact acactttgaa aggggttgta	1440
	gtaacaaaaa atgtgattga tgattttagt tctactgaaa cagaaaaagt atctataaca	1500
	aaaaatctta gtttaataaa aagaactggg gaagtcataa tgggggcca tgacgtaagt	1560
50	gaattagaat cacaagctca gctaatgata acatatgata cacctaagat gtgggagatg	1620
	ggaacaacca aggaactggt gcaaacacc tatcaatggg tgctaaaaaa tttggtaaca	1680
55	ctgaaggctc agtttcttct aggaaaagaa gacatgttcc aatgggatgc atttgaagca	1740
	tttgaagca taatccccca gaagatggct ggccaatata gtggatttgc aagagcagtg	1800
	ctcaaacaaa tgagagacca agaggtcatg aaaactgacc agttcataaa gttgttgccc	1860
60	ttttgtttct caccaccaaa gttaaggagc aatggggagc cttatcagtt cttgaggctt	1920
	gtattgaagg gaggaggaga aaatttcacg gaagtaagga aagggtctcc tctattctct	1980
65	tacaatccac aaacagaagt cctaactata tgcggcagaa tgatgtcatt aaaagggaaa	2040
	attgaagatg aagaaaggaa tagatcaatg gggaaatgcag tgttggcggg ttttcttgtt	2100

# ES 2 454 773 T3

```

    agtggcaagt atgaccacaga tcttggagat ttcaaaacta ttgaagaact tgaaaagcta 2160
    aaaccggggg agaaagcaaa catcttactt tatcaaggaa agcccgttaa agtagttaa 2220
5   aggaaaagat atagtgcttt atccaatgac atttcacaag gaattaagag acaaagaatg 2280
    acagttgagt ccatgggggtg ggccttgagc taa 2313
10  <210> 27
    <211> 2325
    <212> ADN
    <213> Virus de la gripe C
15  <220>
    <221> PB2
    <222> (1)..(2325)
20  <400> 27
    atgtcttttc tattgacaat agcaaaggaa taaaaagac tatgccaaga tgctaaggca 60
    gctcaaatga tgacagtagg aactgtatca aactacacta cgttcaagaa atggactaca 120
    tcaaggaagg aaaagaatcc ttcactaaga atgagatggg caatgagcag caaattocca 180
25  ataatagcta acaagagaat gctggaagaa gctcaaattc ctaaagaaca caacaatgta 240
    gccctttggg aagacacaga agatgtttca aaaagggatc atgttcttgc aagcgcctct 300
    tgtataaatt attggaattt ttgtggacct tgtgtcaaca attcagaagt gatcaaagaa 360
30  gtttataaat ctagatttgg aagattagaa agaaggaaag aaataatgtg gaaagaactt 420
    agatttcat tagttgatag acaacgaaga agagttgaca ctcagcctgt agaacaaaga 480
35  ttgagaactg gagaaattaa agacttgcaa atgtggactt tgttcgaaga tgaagctcct 540
    cttgctagca aatttatttt agacaattat ggtctagtca aagaaatgag atcaaagttt 600
    gcaaacaac ctctgaataa agaagtagtt gcacacatgt tagaaaaaca attcaatccg 660
40  gaaagtagat tcttgctgt tttcggagct ataaggccag aaagaatgga attgatccat 720
    gcattaggag gagaaacttg gatacaagaa gctaactctg cagggatttc caatgttgat 780
45  caaaggaaaa atgatatgag agcagtatgt aggaaagttt gtcttgcagc aatgcaagt 840
    ataatgaacg ccaaaagcaa actggttgag tatataaaaa gtacaagtat gagaattgga 900
    gaaacagaaa gaaagcttga agaacttata cttgaaaccg atgatgtctc acctgaagta 960
50  acattatgta aatctgcttt aggaggacca ttaggaaaaa ctctatcttt tgggcccatg 1020
    ctactcaaga aaatttctgg ttccggagta aaagttaaag atacagtata tatccaaggt 1080
55  gtcagagcag tacaatttga atactggagt gagcaagaag aattctatgg agaataaag 1140
    tcagccaccg ctttattcag cagaaaggaa agatcactag aatggattac aataggagga 1200
    ggaataaatg aagacagaaa gagacttcta gctatgtgca tgatattttg cagagatgga 1260
60  gattatttta aagacgcccc tgcaacaata acaatggcag atttaagtac gaagttagga 1320
    agagaaatc catatcaata tgtgatgatg aattggatac aaaaatcaga agataatctc 1380
65  gaagccttat tatacagtag gggaaattgta gaaaccaatc caggaaaaat ggggagctca 1440
    atgggaattg atggttccaa aagagcaatt aaatctttaa gggctgtcac aatacaatca 1500

```

## ES 2 454 773 T3

	ggaaagattg acatgccaga atcaaaagaa aaaattcacc ttgagctctc tgataatctt	1560
5	gaagcatttg attcatcagg aagaattggt gcaacaattt tagaccttcc tagtgacaaa	1620
	aaghtaacat ttcaggatgt aagctttcaa catcctgatc tggcagtatt gagagatgag	1680
	aaaacggcca taacaaaagg gtatgaagcg ctaatcaaaa ggctaggaac aggggacaat	1740
10	gatattcctt ccttaattgc aaagaaggat tatttgtctc tttataattt accagaagta	1800
	aaattaatgg ctcccttaat cagacccaat agaaaaggag tttattccag agttgctaga	1860
15	aaattagtgt ctacacaagt tactactgga cattattcat tacatgaatt gataaaggtc	1920
	ttacccttta cttatctcgc cccaaaacag ggaatgtttg aaggaaggct tttctttagc	1980
	aacgatagct ttgttgagcc tggagtaaat aacaatgtat tttcttggag taaggctgac	2040
20	agttctaata tatattgtca tggaaatagcg ataagggtag ctttagttgt tggagatgaa	2100
	cacatggaca cttcgttagc actattagaa gggtttagtg tttgtgaaaa cgaccccaga	2160
25	gcaccaatgg taacaagaca agatttaatt gatgtgggat ttgggcaaaa agttagactc	2220
	ttcgtaggcc aaggagcgt tagaaccttc aagcgaactg cctcacaag ggctgcatca	2280
	agcgatgtaa ataagaatgt gaaaaagata aagatgtcta actaa	2325

## REIVINDICACIONES

1. Fragmento polipeptídico soluble de una subunidad PB2 de ARN-polimerasa dependiente de ARN del virus de la gripe, en que dicho fragmento polipeptídico soluble es seleccionado del grupo consistente en:

(i) un fragmento polipeptídico cuyo extremo N-terminal está localizado en la posición de aminoácido 220 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o una posición de aminoácido superior; y cuyo extremo C-terminal está localizado en la posición de aminoácido 510 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o en una posición de aminoácido inferior; o

(ii) un fragmento polipeptídico cuyo extremo N-terminal está localizado en la posición de aminoácido 222 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 2 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o una posición de aminoácido superior; y cuyo extremo C-terminal está localizado en la posición de aminoácido 511 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 2 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o en una posición de aminoácido inferior; o

(iii) un fragmento polipeptídico cuyo extremo N-terminal está localizado en la posición de aminoácido 227 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 3 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o una posición de aminoácido superior; y cuyo extremo C-terminal está localizado en la posición de aminoácido 528 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 3 o en un residuo de aminoácido que ocupa una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella o en una posición de aminoácido inferior; o

(iv) un variante de fragmento polipeptídico, la cual mantiene una identidad de secuencia de como mínimo el 80% con el fragmento polipeptídico conforme a (i), (ii) o (iii)

y en la cual el fragmento polipeptídico conforme a (i), (ii) o (iii) o la variante de fragmento polipeptídico conforme a (iv) conserva la capacidad para asociarse con un casquete de ARN o un análogo de éste; en que el análogo del casquete de ARN se selecciona del grupo consistente en  $m^7G$ ,  $m^7GMP$ ,  $m^7GTP$ ,  $m^7GpppN$ ,  $m^7GpppNm$ .

2. Fragmento polipeptídico de la reivindicación 1, en que dicho fragmento polipeptídico se selecciona del grupo consistente en:

(i) un fragmento polipeptídico con una secuencia de aminoácidos conforme a una de las SEQ ID N.º 4 a 13;

(ii) un fragmento polipeptídico con una secuencia de aminoácidos que abarca posiciones análogas en un polipéptido de PB2 alineado con una de las SEQ ID N.º 4 a 13; o

(iii) un variante de fragmento polipeptídico, que mantiene una identidad de secuencia de como mínimo el 80% con el fragmento polipeptídico de PB2 conforme a (i) o (ii);

y en la cual el fragmento polipeptídico conforme a (i) o (ii) o la variante de fragmento polipeptídico conforme a (iii) conserva la capacidad para asociarse con un casquete de ARN o un análogo de éste, en que el análogo del casquete de ARN se selecciona del grupo consistente en  $m^7G$ ,  $m^7GMP$ ,  $m^7GTP$ ,  $m^7GpppN$  y  $m^7GpppNm$ .

3. Complejo que comprende el fragmento polipeptídico de la reivindicación 1 o 2 y un casquete de ARN o un análogo de éste, en que el análogo del casquete de ARN se selecciona del grupo consistente en  $m^7G$ ,  $m^7GMP$ ,  $m^7GTP$ ,  $m^7GpppN$  y  $m^7GpppNm$ .

4. Complejo de la reivindicación 3, en que el análogo del casquete de ARN se selecciona del grupo consistente en  $m^7GpppG$ ,  $m^7GpppGm$ ,  $m^7GpppA$ ,  $m^7GpppAm$ ,  $m^7GpppC$ ,  $m^7GpppCm$ ,  $m^7GpppU$  y  $m^7GpppUm$ .

5. Complejo de la reivindicación 4, en que dicho fragmento polipeptídico consiste de una secuencia de aminoácidos conforme a la SEQ ID N.º 11 y dicho análogo de casquete de ARN es  $m^7GTP$ , poseedor de la estructura definida por las coordenadas estructurales mostradas en la Figura 18.

6. Polinucleótido aislado que codifica un polipéptido aislado de la reivindicación 1 o 2.

7. Vector recombinante que comprende el polinucleótido aislado de la reivindicación 6.

8. Célula hospedadora recombinante que comprende el polinucleótido aislado de la reivindicación 6 o el vector recombinante de la reivindicación 7.



9. Método para identificar compuestos que se asocian con toda o con parte de la cavidad de unión al casquete de ARN de un polipéptido de PB2 tal y como se define en las reivindicaciones 1 o 2, que comprende los siguientes pasos:

- 5 (a) construcción de un modelo informático de dicha cavidad de unión definido por las coordenadas estructurales del complejo de la reivindicación 5 tal y como se muestra en la Figura 18;
- (b) selección de un compuesto de unión potencial mediante un método seleccionado del grupo consistente en:
- 10 (i) ensamblaje de fragmentos moleculares para formar dicho compuesto,
- (ii) selección de un compuesto a partir de una base de datos de moléculas pequeñas, y
- 15 (iii) diseño *de novo* de ligandos de dicho compuesto;
- (c) empleo de medios informáticos para llevar a cabo una operación de ajuste entre los modelos informáticos de dicho compuesto y dicha cavidad de unión con el fin de ofrecer una configuración de energía mínima de dicho compuesto en la cavidad de unión; y
- 20 (d) evaluación de los resultados de dicha operación de ajuste para cuantificar la asociación entre dicho compuesto y el modelo de cavidad de unión, en la cual se evalúa la capacidad de dicho compuesto para asociarse con dicha cavidad de unión, que es la estructura tridimensional formada por dicho polipéptido de PB2.

25 10. Método de la reivindicación 9, en que dicha cavidad de unión comprende: aminoácidos Phe323, His357 y Phe404 de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o los residuos de aminoácidos que ocupan una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella.

30 11. Método de la reivindicación 10, en que dicha cavidad de unión comprende además opcionalmente:

- (i) aminoácidos Phe325, Phe330 y Phe363 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o los residuos de aminoácidos que ocupan una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella; y/o
- 35 (ii) aminoácidos Glu361 y Lys376 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o los residuos de aminoácidos que ocupan una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella; y/o
- (iii) aminoácidos Ser320, Arg332, Ser337 y Gln406 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o los residuos de aminoácidos que ocupan una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella; y/o
- 40 (iv) aminoácidos Lys339, Arg355, Asn429 e His432 del polipéptido de PB2 conforme a la SEQ ID N.º 1 o los residuos de aminoácidos que ocupan una posición análoga en un polipéptido de PB2 alineado con ella.

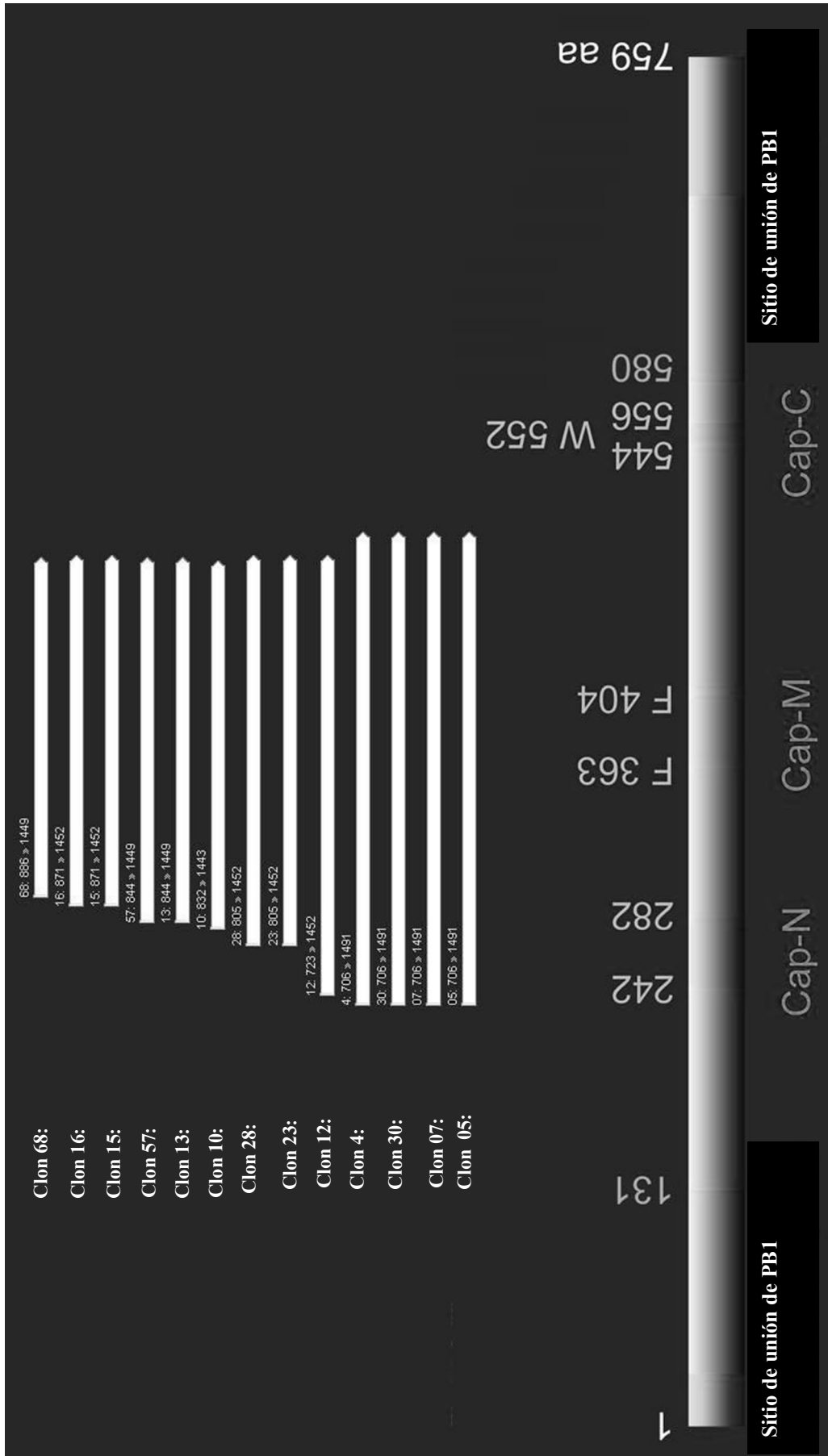
45 12. Método para identificar compuestos que se asocian con la cavidad de unión al casquete de ARN del polipéptido PB2 tal y como se define en las reivindicaciones 1 o 2, que comprende los pasos consistentes en (i) poner en contacto dicho fragmento polipeptídico de la reivindicación 1 o 2 o dicha célula hospedadora recombinante conforme a la reivindicación 8 con un compuesto en estudio y (ii) analizar la capacidad de dicho compuesto en estudio para unirse a PB2.

50 13. Método de la reivindicación 12, que comprende el paso adicional de añadir un casquete de ARN o un análogo de éste.

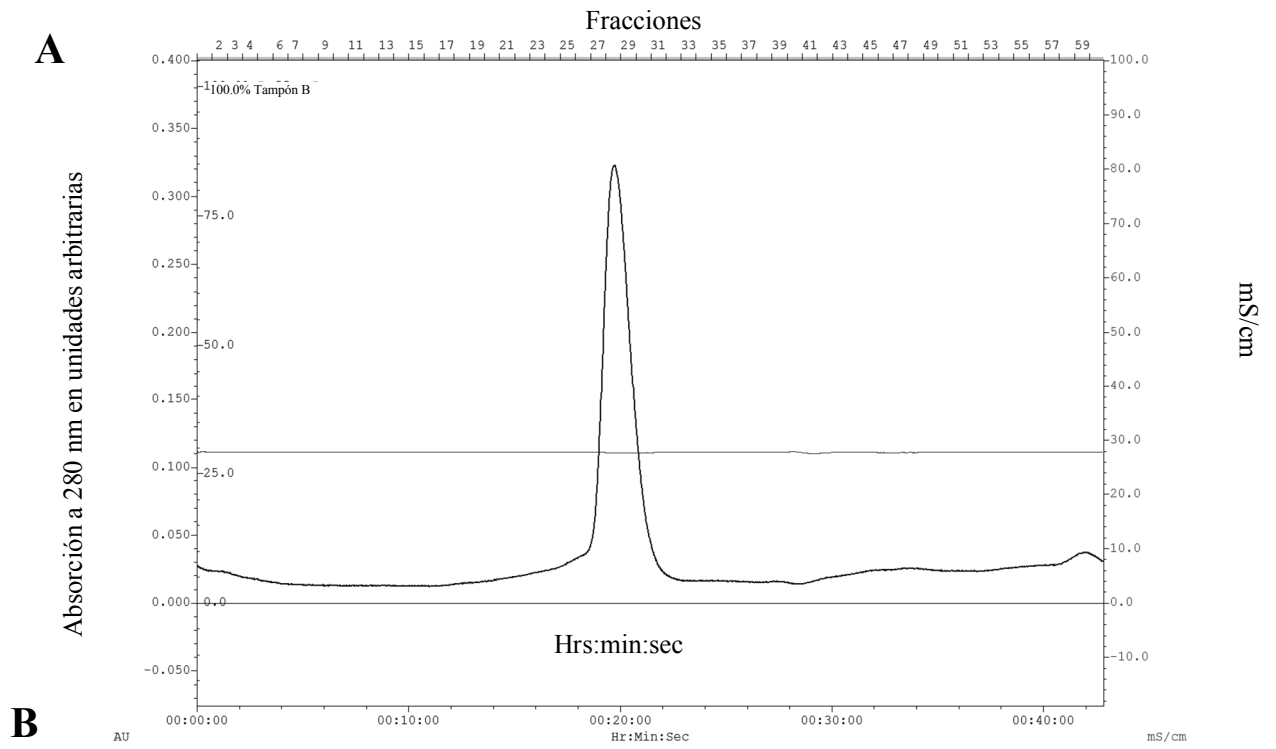
14. Anticuerpo dirigido contra el dominio de unión al casquete de ARN de PB2, que es el polipéptido mínimo de PB2 que comprende la cavidad de unión al ARN y su estructura tridimensional original.

55 15. Anticuerpo de la reivindicación 14, en que dicho anticuerpo reconoce un fragmento polipeptídico seleccionado del grupo de polipéptidos definido por las SEQ ID N.º 14 a 22.

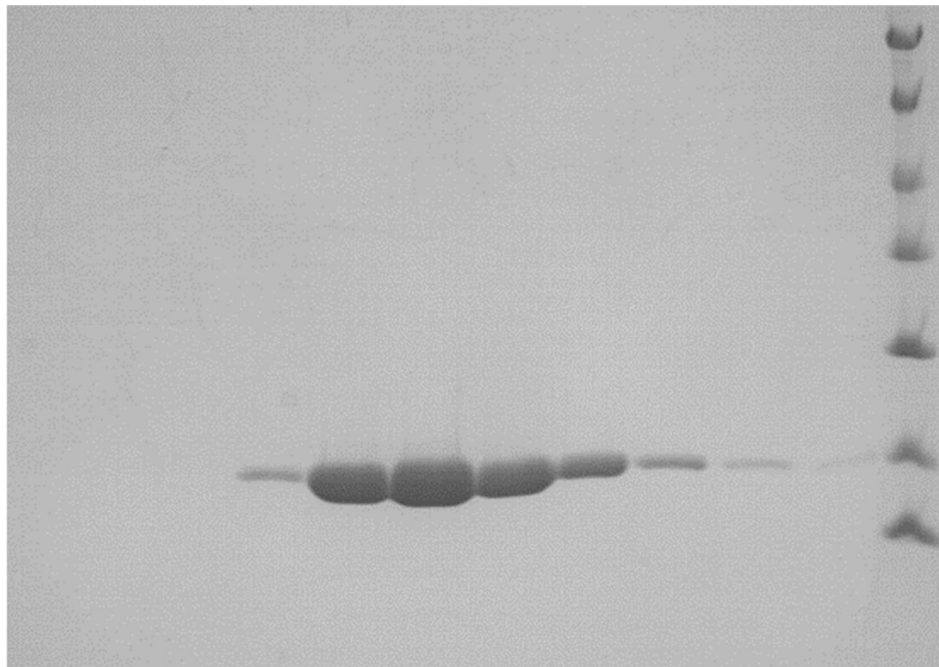
Figura 1



**Figura 2**



**B**

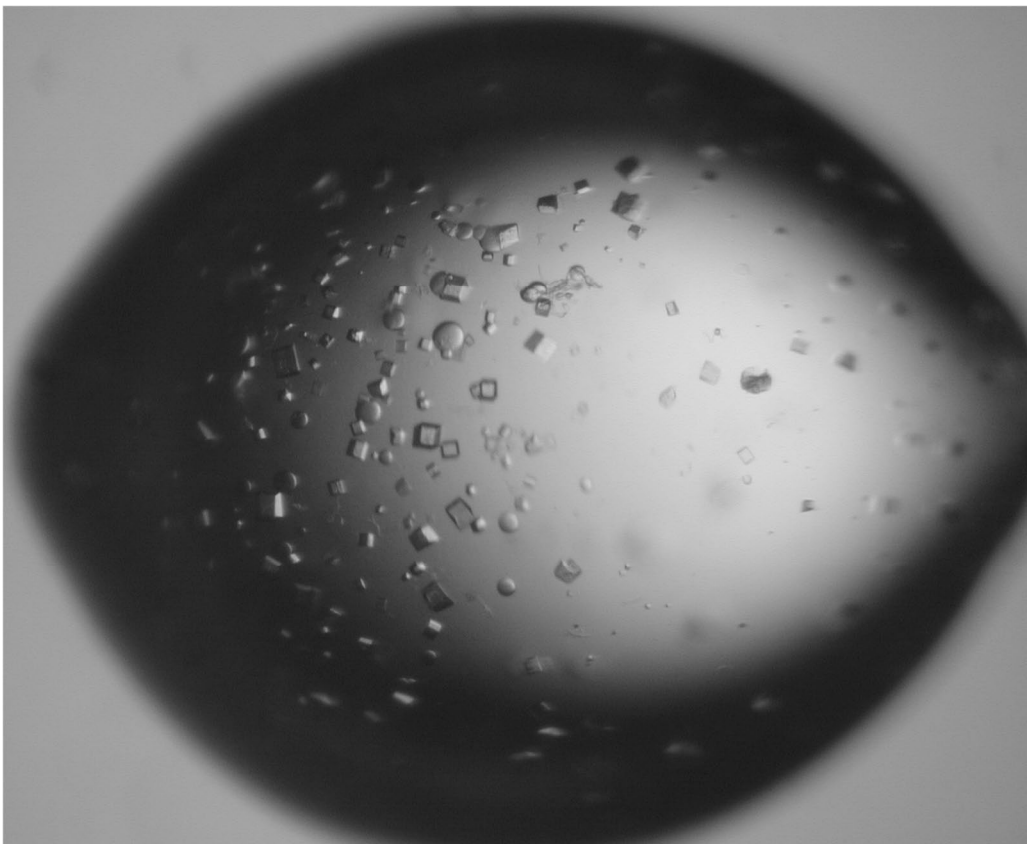


**Figura 3**

**A**



**B**



**Figura 4**

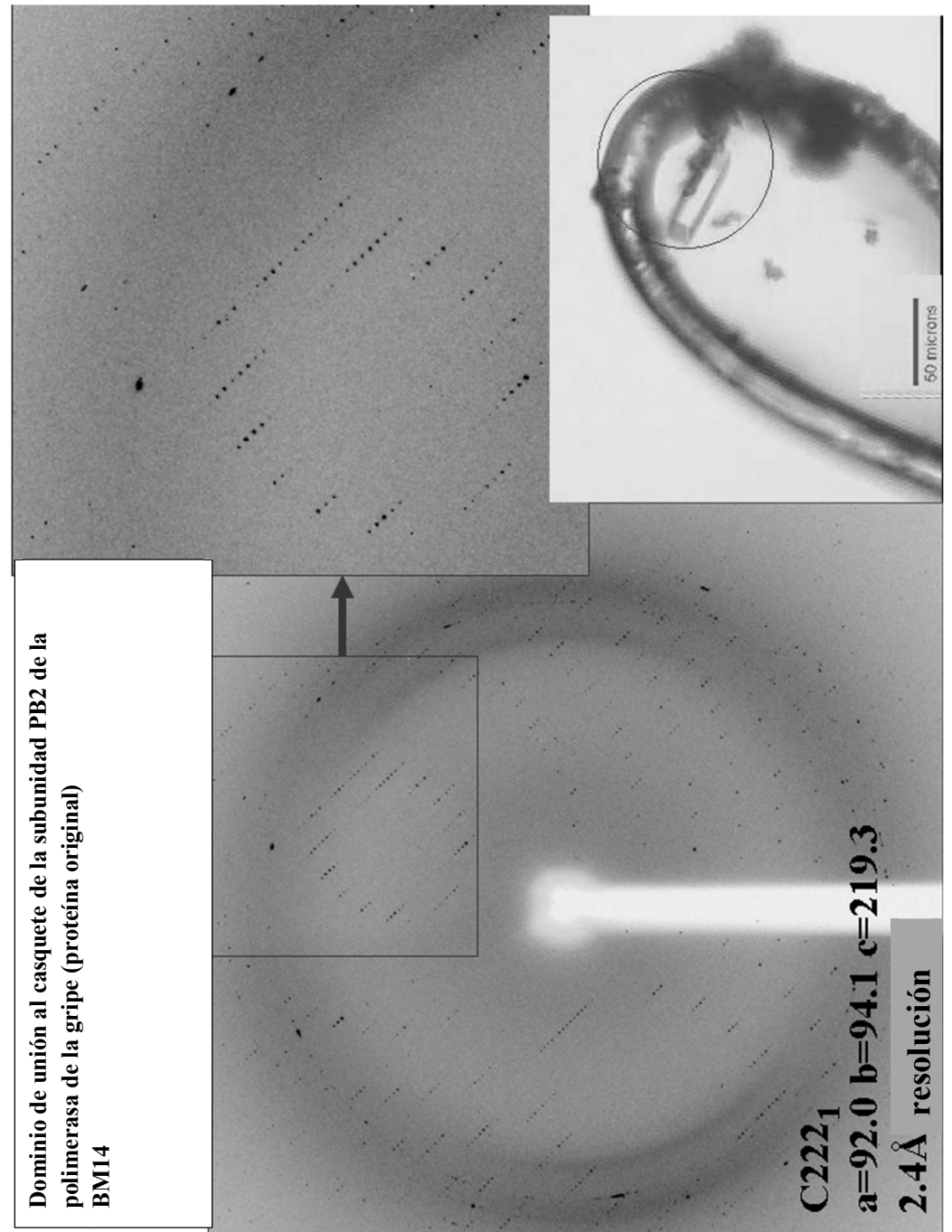


Figura 5

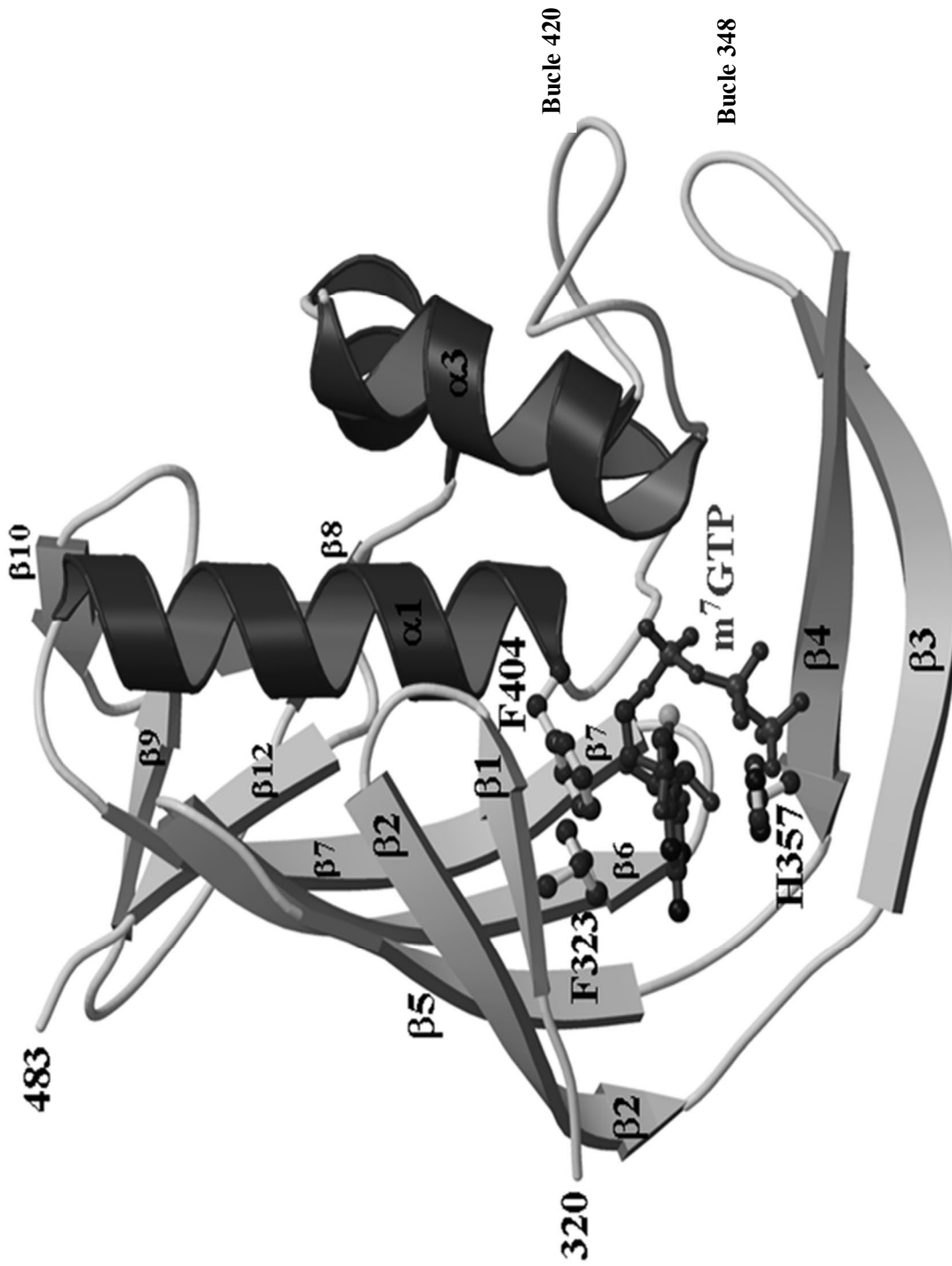


Figura 6

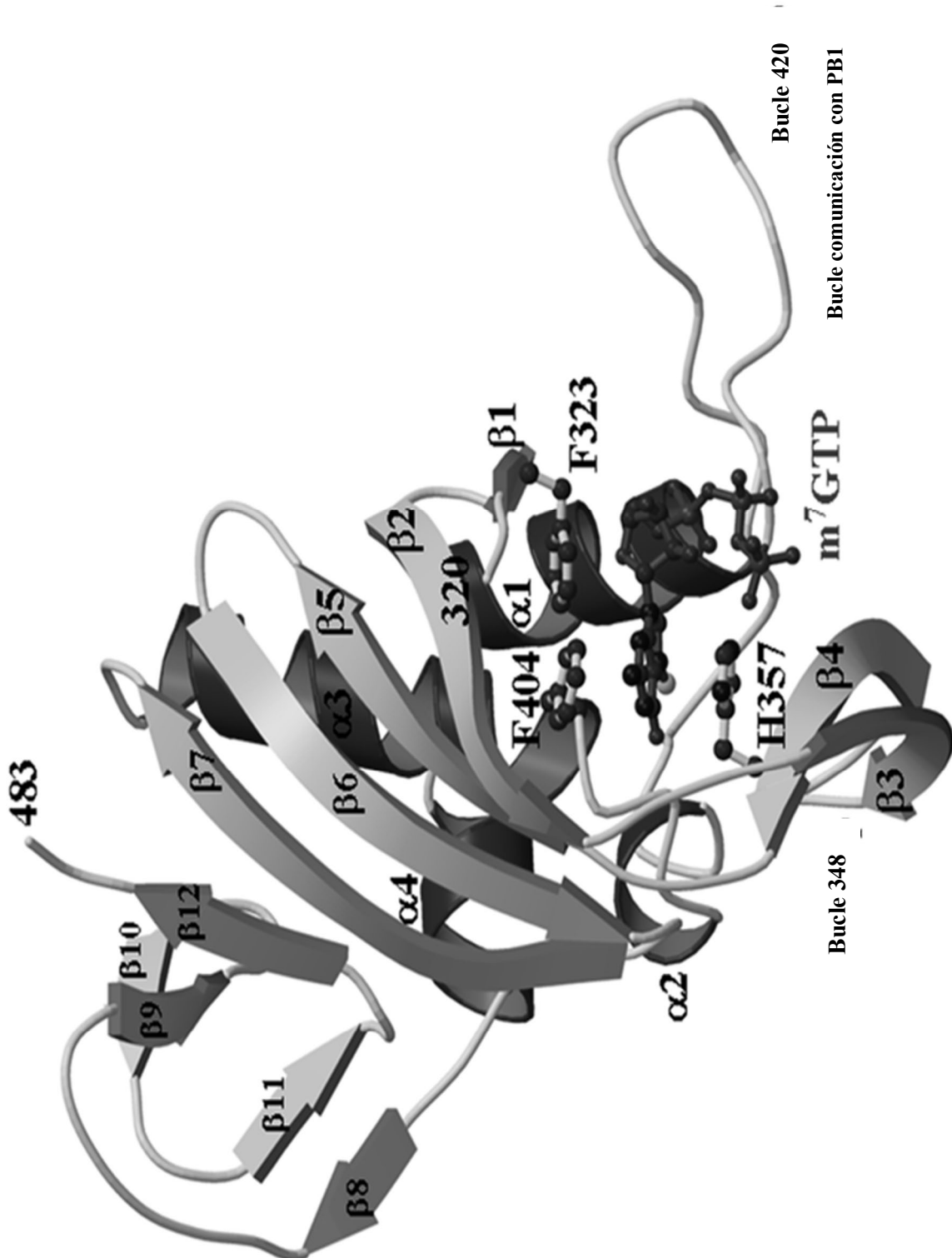


Figura 7

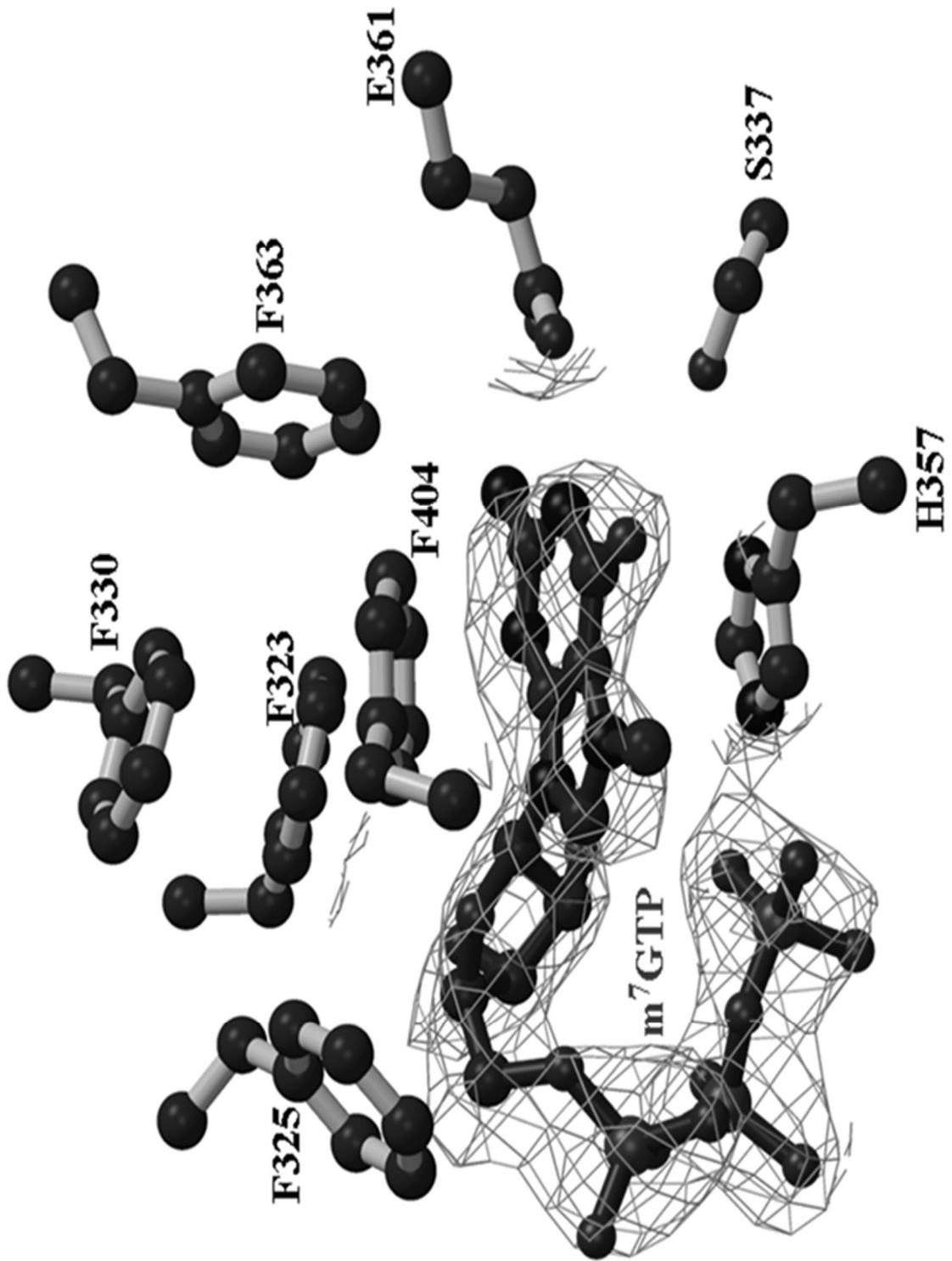




Figura 8

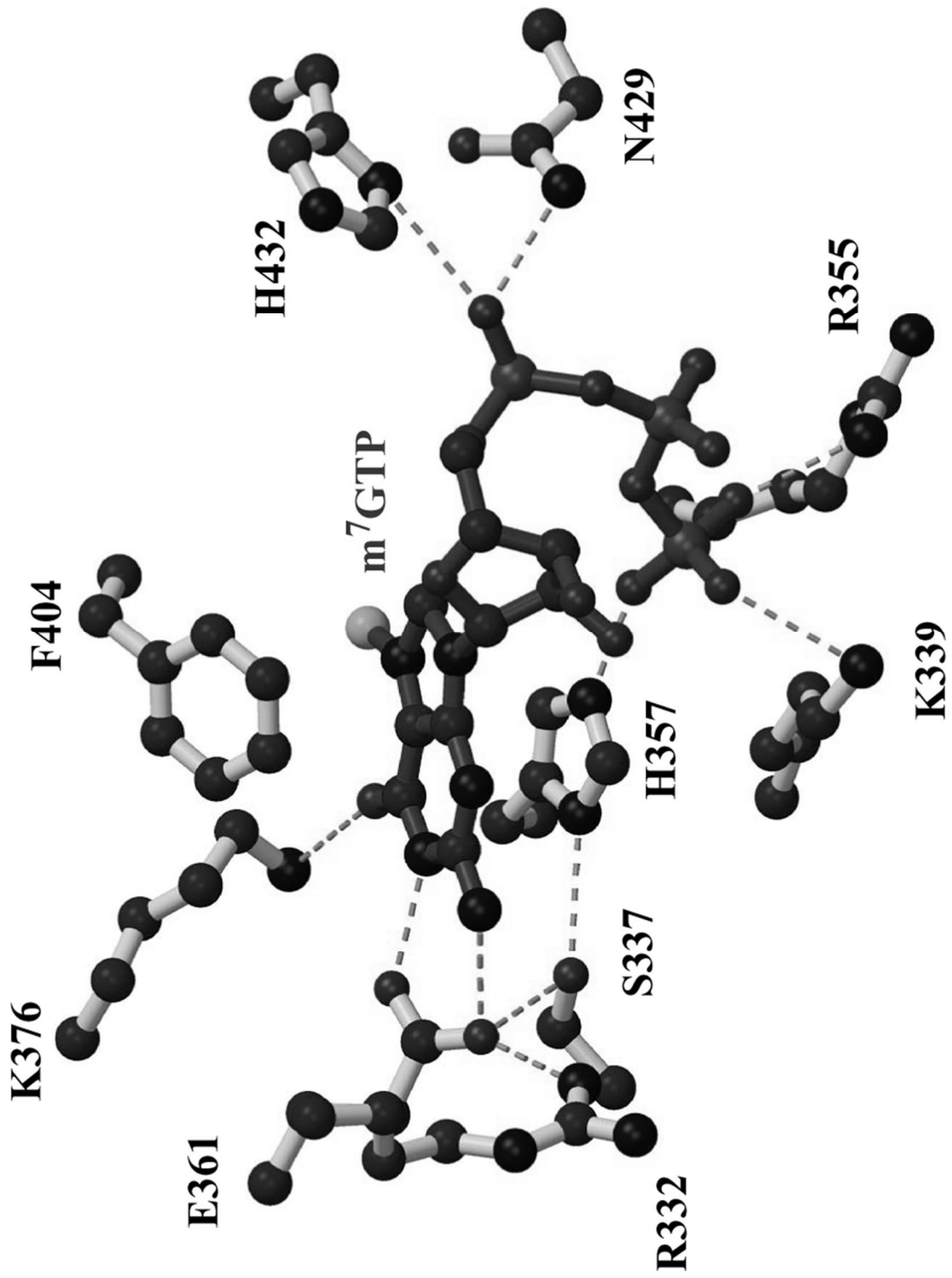


Figura 9

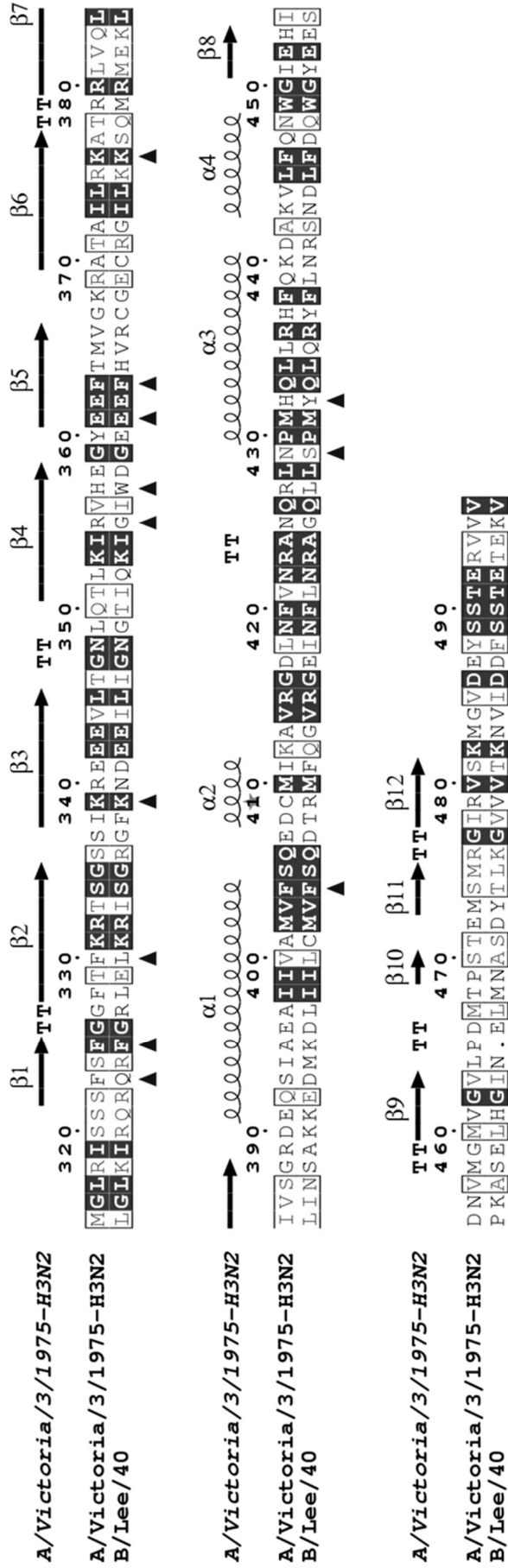


Figura 10

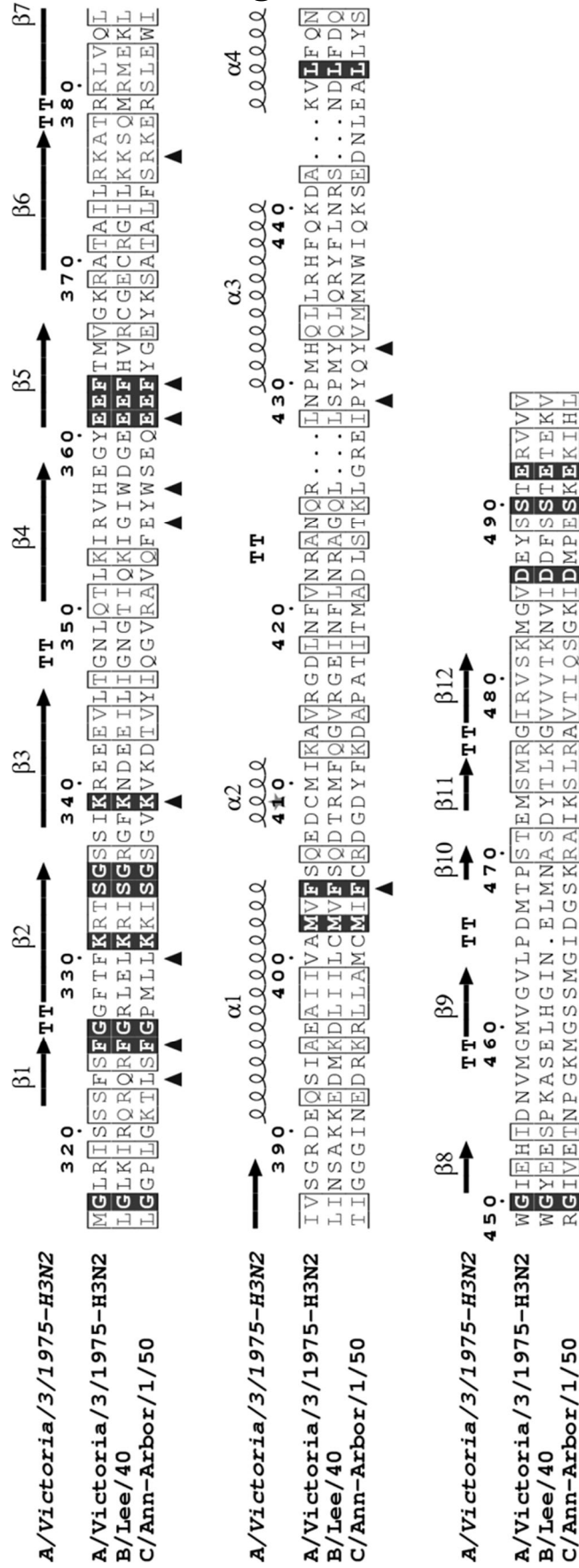
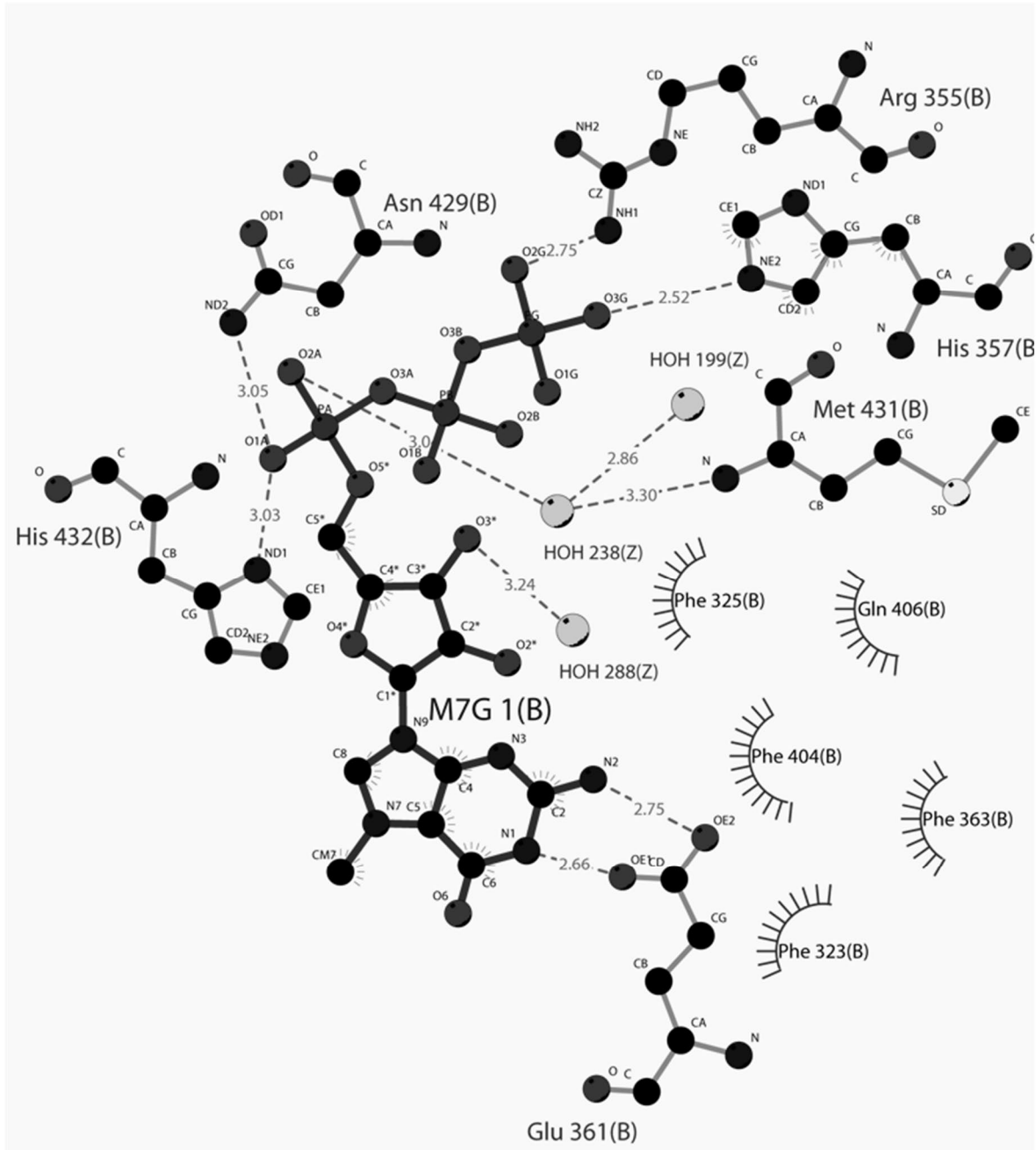
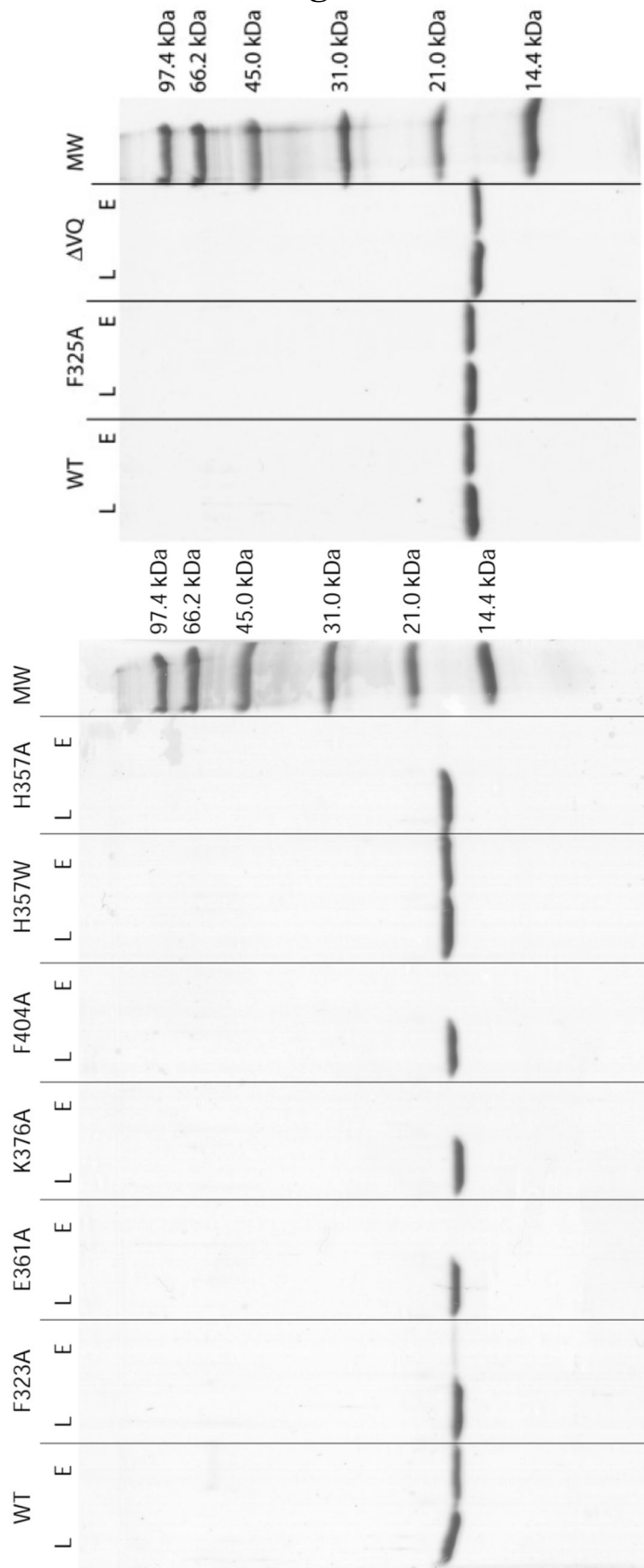


Figura 11



**Figura 12**



L=Fracciones cargadas, E=Fracciones eluidas

Figura 13

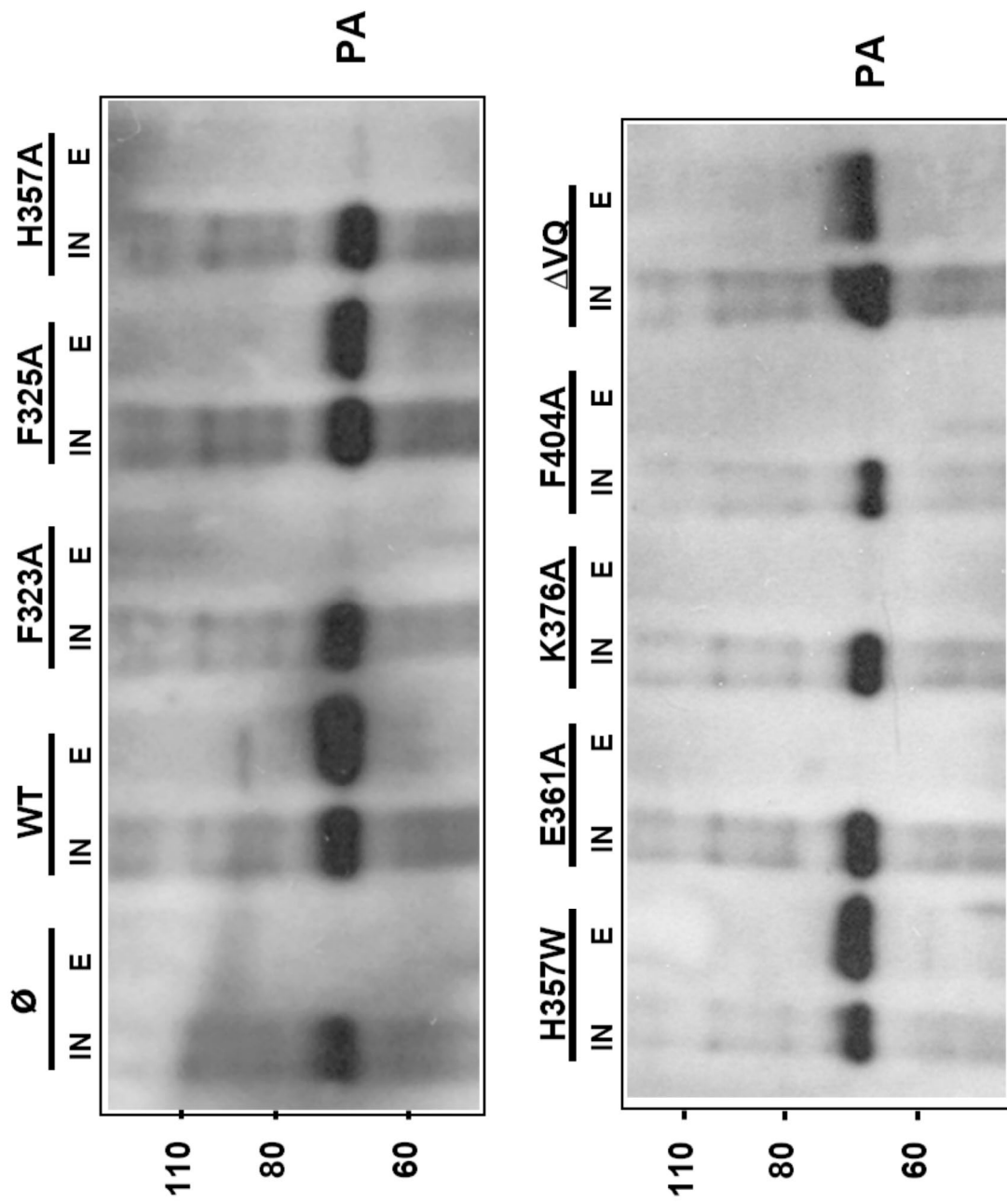


Figura 14

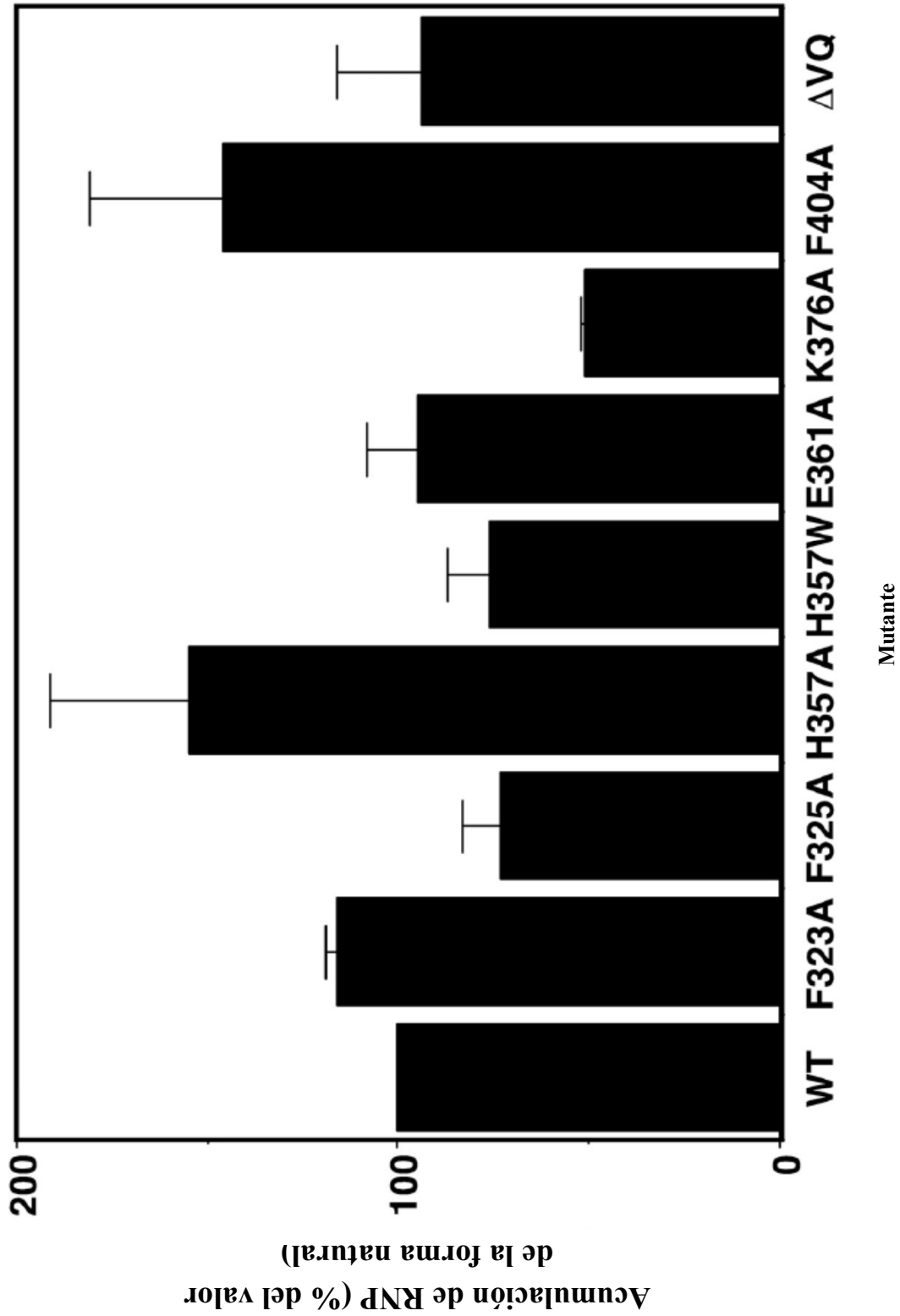


Figura 15

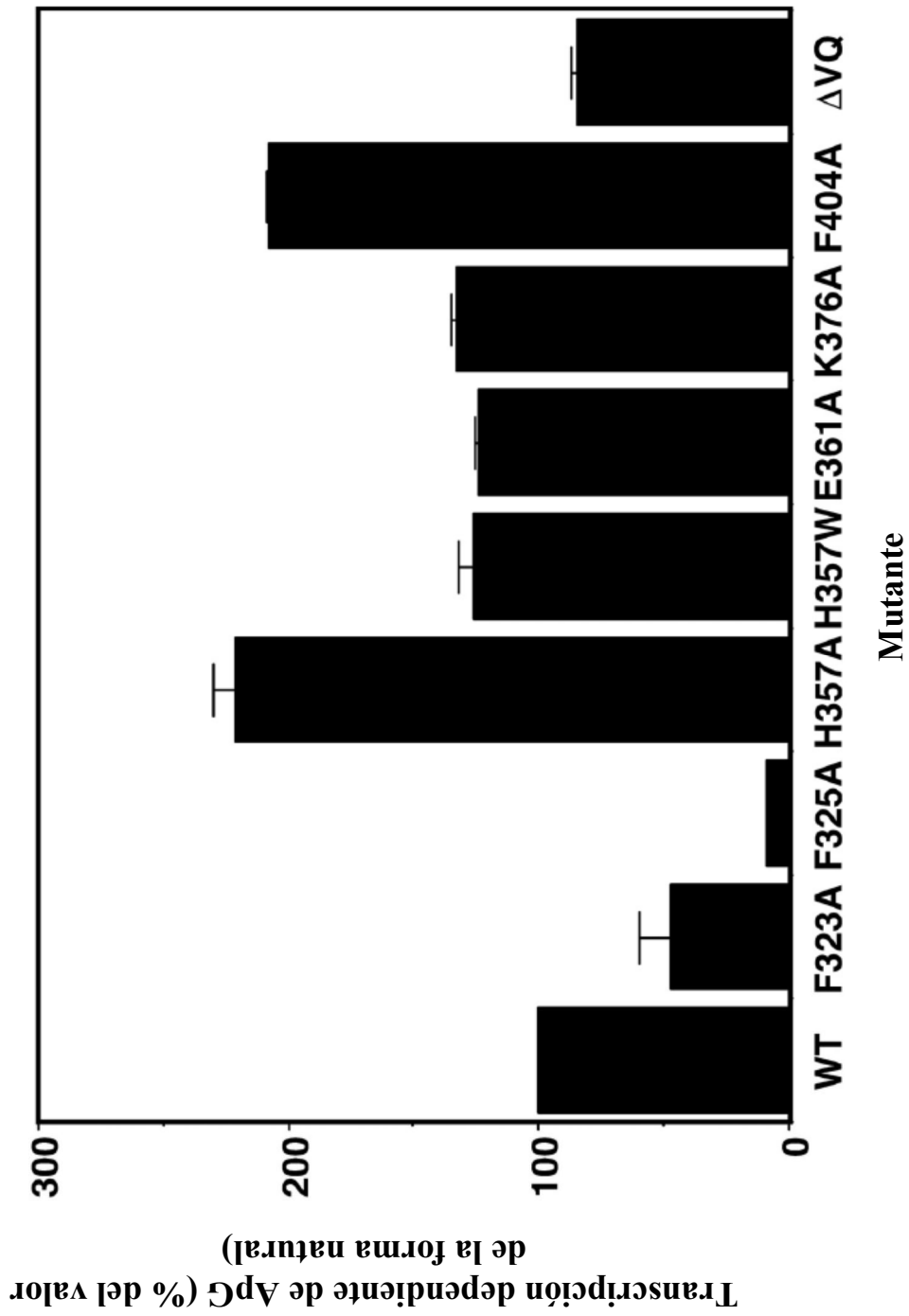




Figura 16

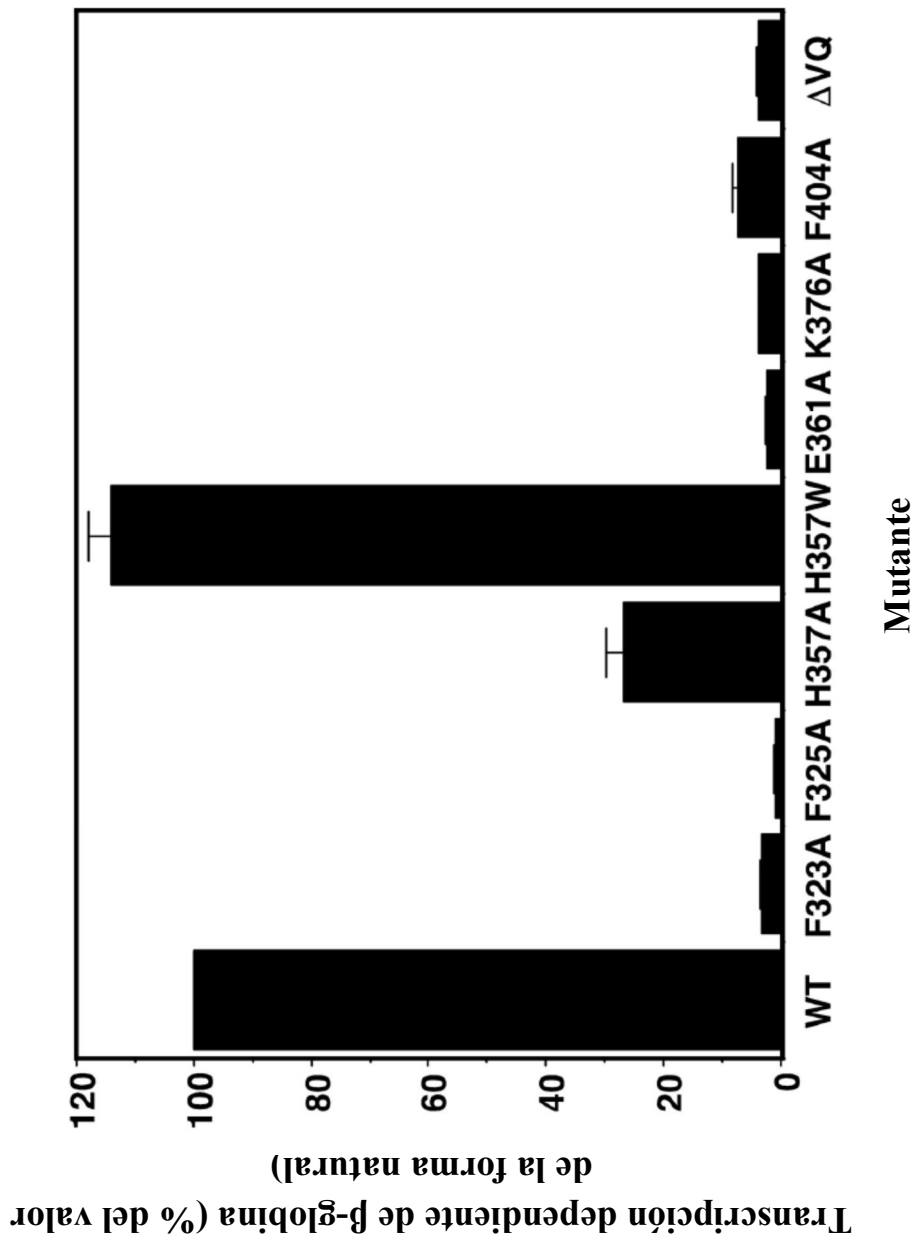
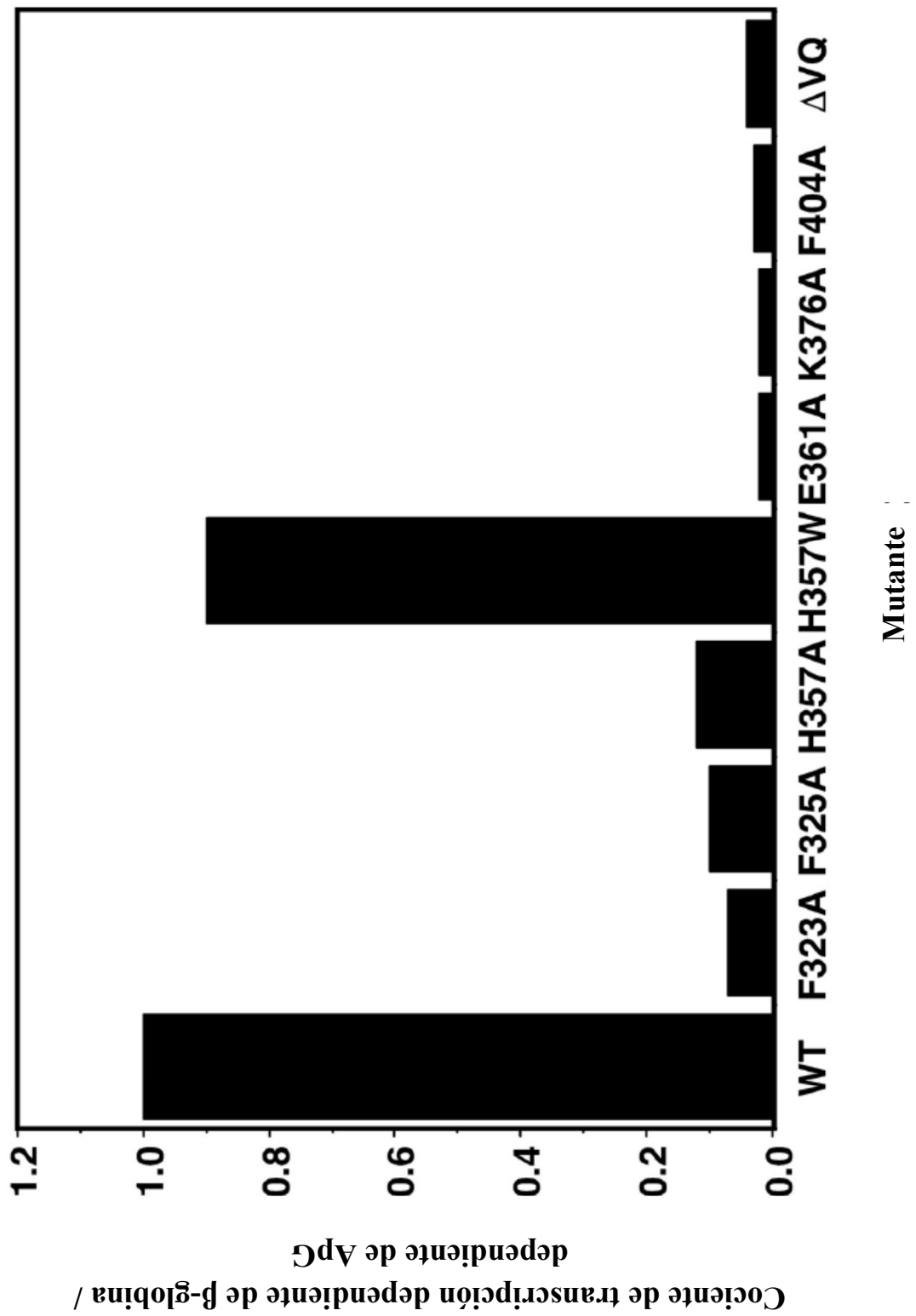


Figura 17



## Figura 18

```

HEADER      ----                      XX-XXX-XX   xxxx
COMPST     --COMENT.   3
5  COMENT.   3  AFINAMIENTO
  COMENT.   3  PROGRAMA       : REFMAC 5.2.0019
  COMENT.   3  AUTORES        : MURSHUDOV,VAGIN,DODSON
  COMENT.   3
10  COMENT.   3  DIANA DE AFINAMIENTO : MÁXIMA VEROSIMILITUD
  COMENT.   3
  COMENT.   3  DATOS UTILIZADOS EN EL AFINAMIENTO
  COMENT.   3  RANGO DE RESOLUCIÓN ALTO (ANGSTROMS) : 2.30
  COMENT.   3  RANGO DE RESOLUCIÓN BAJO (ANGSTROMS) : 29.53
  COMENT.   3  VALOR LÍMITE DE DATOS (SIGMA(F)) : NINGUNO
15  COMENT.   3  COMPLETITUD DEL RANGO (%) : 99.65
  COMENT.   3  NÚMERO DE REFLEXIONES : 40781
  COMENT.   3
  COMENT.   3  AJUSTE A LOS DATOS UTILIZADOS EN EL AFINAMIENTO
  COMENT.   3  MÉTODO DE VALIDACIÓN CRUZADA : TOTAL
20  COMENT.   3  SELECCIÓN DE CONFIG. DE PRUEBA DEL VALOR R-FREE : ALEATORIA
  COMENT.   3  VALOR R (CONFIG. TRABAJO + PRUEBA) : 0.18859
  COMENT.   3  VALOR R (CONFIG. TRABAJO) : 0.18611
  COMENT.   3  VALOR FREE R : 0.23465
  COMENT.   3  TAMAÑO CONFIG. DEL PRUEBA DEL VALOR FREE R (%) : 5.0
25  COMENT.   3  RECUENTO CONFIG. DE PRUEBA DEL VALOR R-FREE : 2165
  COMENT.   3
  COMENT.   3  ENCAJA EN LA CAPA DE MAYOR RESOLUCIÓN.
  COMENT.   3  NÚMERO TOTAL DE CAPAS UTILIZADAS : 20
  COMENT.   3  RANGO DE RESOLUCIÓN ALTO : 2.300
30  COMENT.   3  RANGO DE RESOLUCIÓN BAJO : 2.360
  COMENT.   3  REFLECCIÓN EN CAPA (CONFIG. TRABAJO) : 2984
  COMENT.   3  COMPLETITUD DE CAPA (CONFIG. TRABAJO + PRUEBA) (%) : 98.55
  COMENT.   3  VALOR R DE CAPA (CONFIG. TRABAJO) : 0.250
  COMENT.   3  RECUENTO CONFIG. VALOR FREE R : 148
35  COMENT.   3  VALOR FREE R DE CAPA : 0.312
  COMENT.   3
  COMENT.   3  NÚMERO DE ÁTOMOS UTILIZADOS EN EL REFINAMIENTO QUE NO SON ÁTOMOS DE
  COMENT.   3  HIDRÓGENO
  COMENT.   3  TOTAL ÁTOMOS : 6926
40  COMENT.   3
  COMENT.   3  VALORES B.
  COMENT.   3  A PARTIR DEL CERO, GRÁFICA DE WILSON (A**2) : CERO
  COMENT.   3  VALOR B MEDIO (TOTAL, A**2) : 32.465
  COMENT.   3  VALOR B ANISOTRÓPICO TOTAL.
45  COMENT.   3  B11 (A**2) : 0.44
  COMENT.   3  B22 (A**2) : 0.68
  COMENT.   3  B33 (A**2) : -1.12
  COMENT.   3  B12 (A**2) : 0.00
  COMENT.   3  B13 (A**2) : 0.00
50  COMENT.   3  B23 (A**2) : 0.00
  COMENT.   3
  COMENT.   3  ERROR COORDENADAS TOTAL ESTIMADO.
  COMENT.   3  ESU BASADO EN EL VALOR R (A) : 0.317
  COMENT.   3  ESU BASADO EN EL VALOR R-FREE (A) : 0.227
55  COMENT.   3  ESU BASADO EN LA MÁXIMA VEROSIMILITUD (A) : 0.160
  COMENT.   3  ESU DE LOS VALORES B BASADO EN LA MÁX. VEROSIMILITUD (A**2) : 13.245
  COMENT.   3
  COMENT.   3  COEFICIENTES DE CORRELACIÓN.
  COMENT.   3  COEFICIENTES DE CORRELACIÓN FO-FC : 0.946
60  COMENT.   3  COEFICIENTES DE CORRELACIÓN FO-FC FREE : 0.920
  COMENT.   3
  COMENT.   3  DESVIACIONES RMS DE VALORES IDEALES RECUENTO RMS PESO

```

## ES 2 454 773 T3

COMENT. 3 LONGITUDES DE ENLACE ÁTOMOS AFINADOS (A): 6764 ; 0.013 ; 0.022  
 COMENT. 3 ÁNGULOS DE ENLACE ÁTOMOS AFINADOS (GRADOS): 9116 ; 1.519 ; 1.987  
 COMENT. 3 ÁNGULOS DE TORSIÓN, PERÍODO 1 (GRADOS): 823 ; 6.267 ; 5.000  
 5 COMENT. 3 ÁNGULOS DE TORSIÓN, PERÍODO 2 (GRADOS): 297 ; 35.379 ; 23.199  
 COMENT. 3 ÁNGULOS DE TORSIÓN, PERÍODO 3 (GRADOS): 1291 ; 16.121 ; 15.000  
 COMENT. 3 ÁNGULOS DE TORSIÓN, PERÍODO 4 (GRADOS): 62 ; 18.647 ; 15.000  
 COMENT. 3 RESTRICCIONES DEL CENTRO QUIRAL (A\*\*3): 1027 ; 0.093 ; 0.200  
 COMENT. 3 PLANOS GENERALES DE LOS ÁTOMOS AFINADOS (A): 4923 ; 0.005 ;  
 0.020  
 10 COMENT. 3 CONTACTOS NO ENLAZADOS DE LOS ÁTOMOS AFINADOS (A): 2631 ; 0.200 ;  
 0.200  
 COMENT. 3 TORSIÓN NO ENLAZADA DE LOS ÁTOMOS AFINADOS (A): 4496 ; 0.292 ;  
 0.200  
 15 COMENT. 3 PUENTES DE H (X...Y) ÁTOMOS AFINADOS (A): 321 ; 0.173 ; 0.200  
 COMENT. 3 VDW SIMETRÍA ÁTOMOS AFINADOS (A): 124 ; 0.333 ; 0.200  
 COMENT. 3 SIMETRÍA PUENTES-H ÁTOMOS AFINADOS (A): 17 ; 0.205 ; 0.200  
 COMENT. 3  
 COMENT. 3 RESTRICCIONES DEL FACTOR TÉRMICO ISOTRÓPICO. RECuento RMS  
 PESO  
 20 COMENT. 3 ENLACE CADENA PRINCIPAL ÁTOMOS AFINADOS (A\*\*2): 4221 ; 0.728 ;  
 1.500  
 COMENT. 3 ÁNGULO CADENA PRINCIPAL ÁTOMOS AFINADOS (A\*\*2): 6577 ; 1.124 ; 2.000  
 COMENT. 3 ENLACE CADENA LATERAL ÁTOMOS AFINADOS (A\*\*2): 2920 ; 2.095 ; 3.000  
 25 COMENT. 3 ÁNGULO CADENA LATERAL ÁTOMOS AFINADOS (A\*\*2): 2539 ; 3.232 ; 4.500  
 COMENT. 3  
 COMENT. 3 ESTADÍSTICAS RESTRICCIONES NCS  
 COMENT. 3 NÚMERO DE GRUPOS NCS DISTINTOS : 1  
 COMENT. 3  
 30 COMENT. 3 NÚMERO DE GRUPO NCS : 1  
 COMENT. 3 NOMBRES DE CADENAS : B D E A  
 COMENT. 3 NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO NCS : 9  
 COMENT. 3 COMPONENTE C SSSEQI A C SSSEQI CÓDIGO  
 COMENT. 3 1 B 323 B 330 1  
 35 COMENT. 3 1 D 323 D 330 1  
 COMENT. 3 1 E 323 E 330 1  
 COMENT. 3 1 A 323 A 330 1  
 COMENT. 3 2 B 333 B 340 1  
 COMENT. 3 2 D 333 D 340 1  
 COMENT. 3 2 E 333 E 340 1  
 40 COMENT. 3 2 A 333 A 340 1  
 COMENT. 3 3 B 350 B 368 1  
 COMENT. 3 3 D 350 D 368 1  
 COMENT. 3 3 E 350 E 368 1  
 45 COMENT. 3 3 A 350 A 368 1  
 COMENT. 3 4 B 370 B 389 1  
 COMENT. 3 4 D 370 D 389 1  
 COMENT. 3 4 E 370 E 389 1  
 COMENT. 3 4 A 370 A 389 1  
 50 COMENT. 3 5 B 393 B 407 1  
 COMENT. 3 5 D 393 D 407 1  
 COMENT. 3 5 E 393 E 407 1  
 COMENT. 3 5 A 393 A 407 1  
 COMENT. 3 6 B 411 B 420 1  
 55 COMENT. 3 6 D 411 D 420 1  
 COMENT. 3 6 E 411 E 420 1  
 COMENT. 3 6 A 411 A 420 1  
 COMENT. 3 7 B 428 B 434 1  
 COMENT. 3 7 D 428 D 434 1  
 COMENT. 3 7 E 428 E 434 1  
 60 COMENT. 3 7 A 428 A 434 1  
 COMENT. 3 8 B 443 B 451 1  
 COMENT. 3 8 D 443 D 451 1  
 COMENT. 3 8 E 443 E 451 1  
 COMENT. 3 8 A 443 A 451 1

## ES 2 454 773 T3

	COMENT.	3	9	B	455	B	482	1	
	COMENT.	3	9	D	455	D	482	1	
	COMENT.	3	9	E	455	E	482	1	
	COMENT.	3	9	A	455	A	482	1	
5	COMENT.	3			GRUPO CADENA		RECUNTO	RMS	PESO
	COMENT.	3			POSICIONAL AJUSTADO	1 B	(A): 965 ;	0.05 ;	0.05
	COMENT.	3			POSICIONAL AJUSTADO	1 D	(A): 965 ;	0.04 ;	0.05
	COMENT.	3			POSICIONAL AJUSTADO	1 E	(A): 965 ;	0.05 ;	0.05
	COMENT.	3			POSICIONAL AJUSTADO	1 A	(A): 965 ;	0.06 ;	0.05
10	COMENT.	3			TÉRMICO AJUSTADO	1 B (A**2)	: 965 ;	1.46 ;	5.00
	COMENT.	3			TÉRMICO AJUSTADO	1 D (A**2)	: 965 ;	1.42 ;	5.00
	COMENT.	3			TÉRMICO AJUSTADO	1 E (A**2)	: 965 ;	1.17 ;	5.00
	COMENT.	3			TÉRMICO AJUSTADO	1 A (A**2)	: 965 ;	1.46 ;	5.00
	COMENT.	3							
15	COMENT.	3							
	COMENT.	3			DETALLES TLS				
	COMENT.	3			NÚMERO DE GRUPOS TLS :	5			
	COMENT.	3			REGISTRO DE ÁTOMOS CONTIENE LA SUMA DE TLS Y LOS FACTORES B RESIDUALES				
20	COMENT.	3			REGISTRO DE ANISOU CONTIENE LA SUMA DE TLS Y LOS FACTORES U RESIDUALES				
	COMENT.	3							
	COMENT.	3			GRUPO TLS :	1			
	COMENT.	3			NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO :	2			
25	COMENT.	3			COMPONENTES	C SSSEQI A C SSSEQI			
	COMENT.	3			RANGO DE RESIDUO :	A 320 A 483			
	COMENT.	3			RANGO DE RESIDUO :	A 1 A 1			
	COMENT.	3			ORIGEN DEL GRUPO (A):	35.1410 19.8550 -23.4970			
	COMENT.	3			TENSOR T				
30	COMENT.	3			T11: -0.1550 T22: -0.1929				
	COMENT.	3			T33: -0.1067 T12: 0.0176				
	COMENT.	3			T13: -0.0298 T23: 0.0184				
	COMENT.	3			TENSOR L				
	COMENT.	3			L11: 2.3533 L22: 1.7075				
35	COMENT.	3			L33: 2.2571 L12: 0.0348				
	COMENT.	3			L13: -0.0773 L23: 0.5035				
	COMENT.	3			TENSOR S				
	COMENT.	3			S11: 0.0055 S12: 0.1725 S13: 0.1938				
	COMENT.	3			S21: -0.0821 S22: 0.0154 S23: -0.0549				
40	COMENT.	3			S31: 0.0216 S32: 0.1221 S33: -0.0208				
	COMENT.	3							
	COMENT.	3			GRUPO TLS :	2			
	COMENT.	3			NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO :	2			
	COMENT.	3			COMPONENTES	C SSSEQI A C SSSEQI			
45	COMENT.	3			RANGO DE RESIDUO :	B 320 B 483			
	COMENT.	3			RANGO DE RESIDUO :	B 1 B 1			
	COMENT.	3			ORIGEN DEL GRUPO (A):	12.4750 -3.5580 -19.4120			
	COMENT.	3			TENSOR T				
	COMENT.	3			T11: -0.1896 T22: -0.1182				
50	COMENT.	3			T33: -0.0978 T12: -0.0381				
	COMENT.	3			T13: -0.0171 T23: -0.0637				
	COMENT.	3			TENSOR L				
	COMENT.	3			L11: 1.9172 L22: 2.6126				
	COMENT.	3			L33: 3.6260 L12: 0.0348				
55	COMENT.	3			L13: -0.2423 L23: -0.1860				
	COMENT.	3			TENSOR S				
	COMENT.	3			S11: -0.0729 S12: 0.1999 S13: -0.0806				
	COMENT.	3			S21: -0.0771 S22: 0.0269 S23: 0.2153				
	COMENT.	3			S31: 0.1325 S32: -0.3438 S33: 0.0460				
60	COMENT.	3							
	COMENT.	3			GRUPO TLS :	3			
	COMENT.	3			NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO :	2			
	COMENT.	3			COMPONENTES	C SSSEQI A C SSSEQI			
	COMENT.	3			RANGO DE RESIDUO :	D 319 D 483			

## ES 2 454 773 T3

COMENT. 3 RANGO DE RESIDUO : D 1 D 1  
 COMENT. 3 ORIGEN DEL GRUPO (A): 58.8840 -3.4260 -19.4800  
 COMENT. 3 TENSOR T  
 5 COMENT. 3 T11: -0.2007 T22: -0.1084  
 COMENT. 3 T33: -0.1629 T12: 0.0008  
 COMENT. 3 T13: 0.0350 T23: -0.0105  
 COMENT. 3 TENSOR L  
 COMENT. 3 L11: 2.5312 L22: 3.5830  
 10 COMENT. 3 L33: 2.7686 L12: -0.2516  
 COMENT. 3 L13: -0.0723 L23: 0.1658  
 COMENT. 3 TENSOR S  
 COMENT. 3 S11: 0.0281 S12: 0.3485 S13: -0.0276  
 COMENT. 3 S21: -0.3438 S22: -0.1013 S23: -0.1815  
 15 COMENT. 3 S31: 0.0548 S32: -0.1509 S33: 0.0732  
 COMENT. 3  
 COMENT. 3 GROUP TLS : 4  
 COMENT. 3 NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO : 2  
 COMENT. 3 COMPONENTS C SSSEQI A C SSSEQI  
 20 COMENT. 3 RANGO DE RESIDUO : E 320 E 483  
 COMENT. 3 RANGO DE RESIDUO : E 1 E 1  
 COMENT. 3 ORIGEN DEL GRUPO (A): 35.6570 -25.9320 -15.2800  
 COMENT. 3 TENSOR T  
 COMENT. 3 T11: -0.0768 T22: -0.2139  
 25 COMENT. 3 T33: -0.0804 T12: -0.0233  
 COMENT. 3 T13: 0.0636 T23: -0.0476  
 COMENT. 3 TENSOR L  
 COMENT. 3 L11: 3.7194 L22: 2.4929  
 COMENT. 3 L33: 2.9822 L12: 0.6274  
 30 COMENT. 3 L13: 0.2948 L23: 1.0025  
 COMENT. 3 TENSOR S  
 COMENT. 3 S11: -0.0484 S12: 0.3196 S13: -0.2371  
 COMENT. 3 S21: -0.1986 S22: 0.0864 S23: -0.0561  
 COMENT. 3 S31: 0.1208 S32: 0.1243 S33: -0.0380  
 35 COMENT. 3  
 COMENT. 3 GRUPO TLS : 5  
 COMENT. 3 NÚMERO DE COMPONENTES DEL GRUPO : 2  
 COMENT. 3 COMPONENTS C SSSEQI A C SSSEQI  
 40 COMENT. 3 RANGO DE RESIDUO : F 322 F 483  
 COMENT. 3 RANGO DE RESIDUO : F 1 F 1  
 COMENT. 3 ORIGEN DEL GRUPO (A): 29.6550 -7.6170 -50.4960  
 COMENT. 3 TENSOR T  
 COMENT. 3 T11: 0.0277 T22: 0.2406  
 COMENT. 3 T33: -0.1217 T12: 0.0164  
 45 COMENT. 3 T13: -0.0146 T23: -0.0766  
 COMENT. 3 TENSOR L  
 COMENT. 3 L11: 2.4339 L22: 4.7601  
 COMENT. 3 L33: 4.8718 L12: 0.4947  
 COMENT. 3 L13: -0.0699 L23: 1.5231  
 50 COMENT. 3 TENSOR S  
 COMENT. 3 S11: -0.0489 S12: 0.5805 S13: -0.1649  
 COMENT. 3 S21: -0.2269 S22: 0.0375 S23: -0.0293  
 COMENT. 3 S31: 0.2872 S32: 0.3181 S33: 0.0114  
 COMENT. 3  
 55 COMENT. 3  
 COMENT. 3 MODELIZACIÓN DEL SOLVENTE GRANEL.  
 COMENT. 3 MÉTODO UTILIZADO : MÁSCARA  
 COMENT. 3 PARÁMETROS PARA EL CÁLCULO DE LA MÁSCARA  
 COMENT. 3 RADIO SONDA VDW : 1.40  
 60 COMENT. 3 RADIO SONDA ION : 0.80  
 COMENT. 3 RADIO CONTRACCIÓN : 0.80  
 COMENT. 3  
 COMENT. 3 OTROS COMENTARIOS DE AFINAMIENTO.S:  
 COMENT. 3 SE HAN AÑADIDO HIDRÓGENOS EN LAS POSICIONES SOLAPADAS  
 COMENT. 3

# ES 2 454 773 T3

	LINK		VAL B 421		ALA B 424		gap
	LINK		ASN E 422		ARG E 427		gap
	LINK		ASN F 422		ASN F 425		gap
	CRYST1	92.200	94.440	220.400	90.00	90.00	90.00 C 2 2 21
5	SCALE1	0.010846	0.000000	0.000000		0.000000	
	SCALE2	0.000000	0.010589	0.000000		0.000000	
	SCALE3	0.000000	0.000000	0.004537		0.000000	
	ATOM	1	N	SER A 320	54.724	26.969	-16.114 1.00 49.27 N
	ANISOU	1	N	SER A 320	4119	7020	7581 -643 -576 -957 N
10	ATOM	2	CA	SER A 320	53.387	26.747	-16.772 1.00 47.48 C
	ANISOU	2	CA	SER A 320	4127	6616	7296 -583 -499 -811 C
	ATOM	3	CB	SER A 320	52.263	27.451	-15.989 1.00 46.88 C
	ANISOU	3	CB	SER A 320	4227	6364	7221 -625 -539 -825 C
	ATOM	4	OG	SER A 320	51.912	26.737	-14.806 1.00 47.95 O
15	ANISOU	4	OG	SER A 320	4428	6550	7242 -485 -673 -881 O
	ATOM	5	C	SER A 320	53.375	27.229	-18.230 1.00 47.12 C
	ANISOU	5	C	SER A 320	4085	6503	7314 -693 -330 -697 C
	ATOM	6	O	SER A 320	54.163	28.116	-18.614 1.00 48.38 O
	ANISOU	6	O	SER A 320	4111	6684	7588 -870 -256 -724 O
20	ATOM	7	N	SER A 321	52.500	26.617	-19.034 1.00 44.78 N
	ANISOU	7	N	SER A 321	3940	6137	6937 -592 -270 -571 N
	ATOM	8	CA	SER A 321	52.188	27.123	-20.378 1.00 43.99 C
	ANISOU	8	CA	SER A 321	3899	5951	6864 -686 -122 -442 C
	ATOM	9	CB	SER A 321	52.645	26.139	-21.481 1.00 44.33 C
25	ANISOU	9	CB	SER A 321	3883	6132	6831 -594 -42 -388 C
	ATOM	10	OG	SER A 321	51.642	25.165	-21.790 1.00 44.54 O
	ANISOU	10	OG	SER A 321	4074	6110	6740 -434 -58 -318 O
	ATOM	11	C	SER A 321	50.674	27.446	-20.489 1.00 41.02 C
	ANISOU	11	C	SER A 321	3753	5371	6461 -667 -116 -344 C
30	ATOM	12	O	SER A 321	49.828	26.667	-20.050 1.00 38.76 O
	ANISOU	12	O	SER A 321	3585	5058	6085 -525 -186 -338 O
	ATOM	13	N	SER A 322	50.365	28.608	-21.063 1.00 39.94 N
	ANISOU	13	N	SER A 322	3672	5093	6409 -814 -31 -267 N
	ATOM	14	CA	SER A 322	48.990	29.066	-21.192 1.00 37.50 C
35	ANISOU	14	CA	SER A 322	3558	4592	6098 -798 -28 -177 C
	ATOM	15	CB	SER A 322	48.780	30.408	-20.502 1.00 38.36 C
	ANISOU	15	CB	SER A 322	3699	4533	6342 -928 -45 -227 C
	ATOM	16	OG	SER A 322	48.807	30.236	-19.105 1.00 41.26 O
	ANISOU	16	OG	SER A 322	4040	4932	6704 -882 -161 -379 O
40	ATOM	17	C	SER A 322	48.540	29.176	-22.627 1.00 35.90 C
	ANISOU	17	C	SER A 322	3439	4343	5858 -813 81 -11 C
	ATOM	18	O	SER A 322	49.323	29.452	-23.543 1.00 36.92 O
	ANISOU	18	O	SER A 322	3488	4535	6006 -912 183 47 O
	ATOM	19	N	PHE A 323	47.261	28.915	-22.811 1.00 32.90 N
45	ANISOU	19	N	PHE A 323	3216	3870	5414 -714 56 62 N
	ATOM	20	CA	PHE A 323	46.611	29.195	-24.077 1.00 31.70 C
	ANISOU	20	CA	PHE A 323	3167	3652	5224 -726 134 223 C
	ATOM	21	CB	PHE A 323	46.730	28.032	-25.092 1.00 30.07 C
	ANISOU	21	CB	PHE A 323	2953	3600	4872 -634 177 274 C
50	ATOM	22	CG	PHE A 323	46.322	26.714	-24.552 1.00 27.72 C
	ANISOU	22	CG	PHE A 323	2678	3371	4481 -474 93 196 C
	ATOM	23	CD1	PHE A 323	45.030	26.271	-24.707 1.00 25.75 C
	ANISOU	23	CD1	PHE A 323	2566	3057	4162 -378 53 245 C
	ATOM	24	CE1	PHE A 323	44.642	25.070	-24.196 1.00 24.05 C
55	ANISOU	24	CE1	PHE A 323	2380	2888	3871 -251 -15 180 C
	ATOM	25	CZ	PHE A 323	45.541	24.275	-23.524 1.00 24.93 C
	ANISOU	25	CZ	PHE A 323	2397	3105	3969 -195 -52 76 C
	ATOM	26	CE2	PHE A 323	46.840	24.686	-23.357 1.00 25.71 C
	ANISOU	26	CE2	PHE A 323	2350	3285	4133 -269 -26 23 C
60	ATOM	27	CD2	PHE A 323	47.234	25.908	-23.874 1.00 28.00 C
	ANISOU	27	CD2	PHE A 323	2597	3536	4504 -418 51 77 C
	ATOM	28	C	PHE A 323	45.163	29.568	-23.830 1.00 29.89 C
	ANISOU	28	C	PHE A 323	3093	3256	5008 -667 82 270 C
	ATOM	29	O	PHE A 323	44.616	29.366	-22.743 1.00 29.10 O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	29	O	PHE	A	323	3023	3117	4917	-600	-3	175	O
	ATOM	30	N	SER	A	324	44.553	30.095	-24.867	1.00	29.85		N
	ANISOU	30	N	SER	A	324	3182	3167	4994	-688	135	420	N
	ATOM	31	CA	SER	A	324	43.159	30.471	-24.844	1.00	30.29		C
5	ANISOU	31	CA	SER	A	324	3369	3076	5062	-621	90	481	C
	ATOM	32	CB	SER	A	324	43.035	31.897	-25.367	1.00	32.34		C
	ANISOU	32	CB	SER	A	324	3691	3160	5436	-725	143	602	C
	ATOM	33	OG	SER	A	324	41.869	32.520	-24.855	1.00	36.69		O
	ANISOU	33	OG	SER	A	324	4337	3538	6064	-667	84	602	O
10	ATOM	34	C	SER	A	324	42.357	29.507	-25.724	1.00	28.87		C
	ANISOU	34	C	SER	A	324	3257	2982	4731	-505	81	560	C
	ATOM	35	O	SER	A	324	42.760	29.221	-26.855	1.00	29.40		O
	ANISOU	35	O	SER	A	324	3315	3147	4709	-524	146	648	O
	ATOM	36	N	PHE	A	325	41.252	28.971	-25.199	1.00	26.88		N
15	ANISOU	36	N	PHE	A	325	3064	2706	4445	-394	5	517	N
	ATOM	37	CA	PHE	A	325	40.371	28.148	-25.992	1.00	25.57		C
	ANISOU	37	CA	PHE	A	325	2960	2603	4153	-299	-13	580	C
	ATOM	38	CB	PHE	A	325	40.776	26.659	-25.905	1.00	24.87		C
	ANISOU	38	CB	PHE	A	325	2828	2671	3952	-233	-24	493	C
20	ATOM	39	CG	PHE	A	325	39.944	25.733	-26.769	1.00	23.25		C
	ANISOU	39	CG	PHE	A	325	2684	2533	3617	-152	-40	535	C
	ATOM	40	CD1	PHE	A	325	40.003	25.815	-28.165	1.00	25.46		C
	ANISOU	40	CD1	PHE	A	325	2990	2876	3809	-171	12	645	C
	ATOM	41	CE1	PHE	A	325	39.243	24.954	-28.976	1.00	23.62		C
25	ANISOU	41	CE1	PHE	A	325	2810	2717	3447	-102	-11	664	C
	ATOM	42	CZ	PHE	A	325	38.430	23.990	-28.377	1.00	23.09		C
	ANISOU	42	CZ	PHE	A	325	2768	2648	3358	-24	-79	576	C
	ATOM	43	CE2	PHE	A	325	38.359	23.916	-26.980	1.00	19.84		C
	ANISOU	43	CE2	PHE	A	325	2336	2168	3036	-9	-119	485	C
30	ATOM	44	CD2	PHE	A	325	39.118	24.773	-26.195	1.00	20.21		C
	ANISOU	44	CD2	PHE	A	325	2332	2156	3190	-67	-102	463	C
	ATOM	45	C	PHE	A	325	38.945	28.342	-25.493	1.00	25.59		C
	ANISOU	45	C	PHE	A	325	3035	2502	4189	-224	-81	574	C
	ATOM	46	O	PHE	A	325	38.673	28.189	-24.307	1.00	24.95		O
35	ANISOU	46	O	PHE	A	325	2941	2388	4150	-195	-126	462	O
	ATOM	47	N	GLY	A	326	38.032	28.646	-26.416	1.00	25.94		N
	ANISOU	47	N	GLY	A	326	3147	2510	4200	-188	-90	693	N
	ATOM	48	CA	GLY	A	326	36.612	28.725	-26.111	1.00	25.17		C
	ANISOU	48	CA	GLY	A	326	3096	2344	4125	-103	-155	690	C
40	ATOM	49	C	GLY	A	326	36.229	29.790	-25.105	1.00	26.10		C
	ANISOU	49	C	GLY	A	326	3221	2299	4397	-108	-174	641	C
	ATOM	50	O	GLY	A	326	35.223	29.646	-24.422	1.00	25.44		O
	ANISOU	50	O	GLY	A	326	3144	2187	4334	-38	-220	574	O
	ATOM	51	N	GLY	A	327	37.027	30.862	-25.017	1.00	27.43		N
45	ANISOU	51	N	GLY	A	327	3385	2361	4675	-198	-132	664	N
	ATOM	52	CA	GLY	A	327	36.814	31.912	-24.021	1.00	27.22		C
	ANISOU	52	CA	GLY	A	327	3367	2168	4806	-214	-145	590	C
	ATOM	53	C	GLY	A	327	37.405	31.621	-22.645	1.00	26.92		C
	ANISOU	53	C	GLY	A	327	3269	2165	4793	-247	-155	409	C
50	ATOM	54	O	GLY	A	327	37.162	32.382	-21.694	1.00	27.56		O
	ANISOU	54	O	GLY	A	327	3357	2128	4986	-254	-170	314	O
	ATOM	55	N	PHE	A	328	38.164	30.521	-22.524	1.00	25.21		N
	ANISOU	55	N	PHE	A	328	2998	2113	4470	-258	-153	357	N
	ATOM	56	CA	PHE	A	328	38.854	30.196	-21.271	1.00	24.27		C
55	ANISOU	56	CA	PHE	A	328	2818	2049	4354	-284	-175	202	C
	ATOM	57	CB	PHE	A	328	38.420	28.823	-20.748	1.00	21.36		C
	ANISOU	57	CB	PHE	A	328	2450	1807	3859	-193	-216	141	C
	ATOM	58	CG	PHE	A	328	37.002	28.783	-20.278	1.00	21.75		C
	ANISOU	58	CG	PHE	A	328	2552	1805	3906	-115	-245	118	C
60	ATOM	59	CD1	PHE	A	328	36.703	28.945	-18.927	1.00	20.12		C
	ANISOU	59	CD1	PHE	A	328	2344	1576	3724	-103	-269	-11	C
	ATOM	60	CE1	PHE	A	328	35.409	28.928	-18.474	1.00	18.66		C
	ANISOU	60	CE1	PHE	A	328	2192	1359	3539	-36	-280	-42	C
	ATOM	61	CZ	PHE	A	328	34.350	28.706	-19.370	1.00	19.24		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	61	CZ	PHE	A	328	2291	1424	3594	24	-280	54	C
	ATOM	62	CE2	PHE	A	328	34.621	28.534	-20.739	1.00	19.65		C
	ANISOU	62	CE2	PHE	A	328	2351	1500	3614	16	-271	184	C
	ATOM	63	CD2	PHE	A	328	35.943	28.578	-21.186	1.00	20.82		C
5	ANISOU	63	CD2	PHE	A	328	2476	1679	3755	-53	-247	216	C
	ATOM	64	C	PHE	A	328	40.359	30.228	-21.450	1.00	24.86		C
	ANISOU	64	C	PHE	A	328	2812	2194	4438	-383	-140	189	C
	ATOM	65	O	PHE	A	328	40.866	29.801	-22.489	1.00	25.40		O
	ANISOU	65	O	PHE	A	328	2860	2349	4442	-398	-98	278	O
10	ATOM	66	N	THR	A	329	41.061	30.721	-20.433	1.00	25.87		N
	ANISOU	66	N	THR	A	329	2885	2302	4643	-451	-157	64	N
	ATOM	67	CA	THR	A	329	42.516	30.587	-20.320	1.00	26.02		C
	ANISOU	67	CA	THR	A	329	2793	2427	4668	-537	-143	9	C
	ATOM	68	CB	THR	A	329	43.119	31.743	-19.510	1.00	27.28		C
15	ANISOU	68	CB	THR	A	329	2908	2490	4967	-657	-149	-100	C
	ATOM	69	OG1	THR	A	329	42.778	32.984	-20.135	1.00	28.71		O
	ANISOU	69	OG1	THR	A	329	3154	2479	5276	-731	-95	-9	O
	ATOM	70	CG2	THR	A	329	44.634	31.634	-19.423	1.00	28.51		C
20	ANISOU	70	CG2	THR	A	329	2923	2773	5137	-755	-139	-164	C
	ATOM	71	C	THR	A	329	42.803	29.250	-19.623	1.00	25.30		C
	ANISOU	71	C	THR	A	329	2656	2504	4453	-448	-202	-77	C
	ATOM	72	O	THR	A	329	42.381	29.020	-18.481	1.00	24.62		O
	ANISOU	72	O	THR	A	329	2591	2422	4339	-397	-263	-177	O
	ATOM	73	N	PHE	A	330	43.508	28.370	-20.328	1.00	25.13		N
25	ANISOU	73	N	PHE	A	330	2578	2617	4353	-425	-178	-34	N
	ATOM	74	CA	PHE	A	330	44.004	27.109	-19.781	1.00	23.76		C
	ANISOU	74	CA	PHE	A	330	2354	2594	4080	-338	-231	-105	C
	ATOM	75	CB	PHE	A	330	44.025	26.057	-20.885	1.00	22.27		C
30	ANISOU	75	CB	PHE	A	330	2176	2492	3794	-266	-193	-21	C
	ATOM	76	CG	PHE	A	330	42.680	25.488	-21.239	1.00	20.53		C
	ANISOU	76	CG	PHE	A	330	2078	2221	3502	-181	-200	43	C
	ATOM	77	CD1	PHE	A	330	42.392	24.145	-20.983	1.00	19.04		C
	ANISOU	77	CD1	PHE	A	330	1924	2097	3213	-73	-240	19	C
	ATOM	78	CE1	PHE	A	330	41.140	23.599	-21.356	1.00	18.69		C
35	ANISOU	78	CE1	PHE	A	330	1982	2010	3110	-15	-244	70	C
	ATOM	79	CZ	PHE	A	330	40.183	24.409	-21.969	1.00	16.45		C
	ANISOU	79	CZ	PHE	A	330	1753	1636	2861	-47	-219	144	C
	ATOM	80	CE2	PHE	A	330	40.483	25.735	-22.229	1.00	17.52		C
	ANISOU	80	CE2	PHE	A	330	1861	1702	3092	-134	-185	180	C
40	ATOM	81	CD2	PHE	A	330	41.712	26.267	-21.870	1.00	18.89		C
	ANISOU	81	CD2	PHE	A	330	1947	1901	3330	-209	-170	131	C
	ATOM	82	C	PHE	A	330	45.442	27.334	-19.342	1.00	25.60		C
	ANISOU	82	C	PHE	A	330	2443	2923	4362	-411	-244	-196	C
	ATOM	83	O	PHE	A	330	46.220	27.886	-20.103	1.00	26.69		O
45	ANISOU	83	O	PHE	A	330	2504	3075	4562	-509	-176	-160	O
	ATOM	84	N	LYS	A	331	45.798	26.952	-18.116	1.00	26.58		N
	ANISOU	84	N	LYS	A	331	2524	3119	4455	-370	-331	-311	N
	ATOM	85	CA	LYS	A	331	47.198	26.814	-17.729	1.00	28.34		C
50	ANISOU	85	CA	LYS	A	331	2589	3483	4695	-400	-366	-401	C
	ATOM	86	CB	LYS	A	331	47.576	27.791	-16.597	1.00	29.96		C
	ANISOU	86	CB	LYS	A	331	2740	3665	4978	-499	-424	-533	C
	ATOM	87	CG	LYS	A	331	46.950	29.141	-16.805	1.00	33.02		C
	ANISOU	87	CG	LYS	A	331	3199	3864	5484	-618	-366	-514	C
	ATOM	88	CD	LYS	A	331	47.691	30.310	-16.166	1.00	36.96		C
55	ANISOU	88	CD	LYS	A	331	3609	4328	6108	-772	-384	-641	C
	ATOM	89	CE	LYS	A	331	46.932	31.614	-16.487	1.00	38.10		C
	ANISOU	89	CE	LYS	A	331	3856	4240	6381	-869	-318	-602	C
	ATOM	90	NZ	LYS	A	331	45.453	31.490	-16.098	1.00	35.18		N
	ANISOU	90	NZ	LYS	A	331	3643	3766	5958	-754	-340	-582	N
60	ATOM	91	C	LYS	A	331	47.426	25.382	-17.285	1.00	27.41		C
	ANISOU	91	C	LYS	A	331	2461	3496	4457	-247	-438	-423	C
	ATOM	92	O	LYS	A	331	46.686	24.886	-16.436	1.00	26.89		O
	ANISOU	92	O	LYS	A	331	2493	3409	4316	-163	-502	-440	O
	ATOM	93	N	ARG	A	332	48.430	24.719	-17.857	1.00	27.61		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	93	N	ARG	A	332	2371	3651	4467	-207	-422	-419	N
	ATOM	94	CA	ARG	A	332	48.758	23.355	-17.455	1.00	27.40		C
	ANISOU	94	CA	ARG	A	332	2331	3735	4345	-47	-494	-440	C
	ATOM	95	CB	ARG	A	332	49.602	22.651	-18.535	1.00	28.32		C
5	ANISOU	95	CB	ARG	A	332	2347	3958	4456	6	-433	-413	C
	ATOM	96	CG	ARG	A	332	49.838	21.151	-18.250	1.00	27.07		C
	ANISOU	96	CG	ARG	A	332	2199	3876	4209	196	-503	-424	C
	ATOM	97	CD	ARG	A	332	50.442	20.434	-19.426	1.00	28.72		C
	ANISOU	97	CD	ARG	A	332	2338	4163	4411	261	-425	-404	C
10	ATOM	98	NE	ARG	A	332	51.692	21.044	-19.875	1.00	33.91		N
	ANISOU	98	NE	ARG	A	332	2788	4950	5147	174	-371	-457	N
	ATOM	99	CZ	ARG	A	332	52.274	20.789	-21.043	1.00	34.89		C
	ANISOU	99	CZ	ARG	A	332	2824	5156	5276	178	-265	-445	C
	ATOM	100	NH1	ARG	A	332	51.722	19.917	-21.900	1.00	36.69		N
15	ANISOU	100	NH1	ARG	A	332	3162	5348	5430	273	-212	-393	N
	ATOM	101	NH2	ARG	A	332	53.401	21.404	-21.362	1.00	33.49		N
	ANISOU	101	NH2	ARG	A	332	2447	5104	5173	80	-208	-495	N
	ATOM	102	C	ARG	A	332	49.478	23.325	-16.100	1.00	28.09		C
	ANISOU	102	C	ARG	A	332	2332	3923	4419	-22	-617	-552	C
20	ATOM	103	O	ARG	A	332	50.525	23.979	-15.940	1.00	29.61		O
	ANISOU	103	O	ARG	A	332	2361	4203	4686	-112	-631	-634	O
	ATOM	104	N	THR	A	333	48.919	22.570	-15.143	1.00	26.95		N
	ANISOU	104	N	THR	A	333	2293	3774	4172	91	-705	-554	N
	ATOM	105	CA	THR	A	333	49.474	22.450	-13.787	1.00	27.54		C
25	ANISOU	105	CA	THR	A	333	2315	3954	4195	133	-836	-647	C
	ATOM	106	CB	THR	A	333	48.388	22.724	-12.718	1.00	27.54		C
	ANISOU	106	CB	THR	A	333	2466	3874	4125	122	-877	-663	C
	ATOM	107	OG1	THR	A	333	47.269	21.862	-12.950	1.00	25.80		O
	ANISOU	107	OG1	THR	A	333	2413	3561	3829	209	-841	-558	O
30	ATOM	108	CG2	THR	A	333	47.898	24.155	-12.811	1.00	27.45		C
	ANISOU	108	CG2	THR	A	333	2468	3750	4212	-40	-814	-706	C
	ATOM	109	C	THR	A	333	50.166	21.106	-13.487	1.00	28.06		C
	ANISOU	109	C	THR	A	333	2339	4142	4179	311	-925	-636	C
	ATOM	110	O	THR	A	333	50.964	21.028	-12.549	1.00	29.37		O
35	ANISOU	110	O	THR	A	333	2410	4438	4313	352	-1042	-713	O
	ATOM	111	N	SER	A	334	49.860	20.070	-14.277	1.00	27.10		N
	ANISOU	111	N	SER	A	334	2292	3978	4028	420	-875	-547	N
	ATOM	112	CA	SER	A	334	50.480	18.728	-14.162	1.00	27.68		C
	ANISOU	112	CA	SER	A	334	2343	4130	4045	606	-945	-529	C
40	ATOM	113	CB	SER	A	334	49.626	17.789	-13.327	1.00	26.96		C
	ANISOU	113	CB	SER	A	334	2442	3966	3835	718	-1011	-462	C
	ATOM	114	OG	SER	A	334	50.099	17.727	-12.010	1.00	30.72		O
	ANISOU	114	OG	SER	A	334	2890	4542	4239	772	-1148	-505	O
	ATOM	115	C	SER	A	334	50.552	18.102	-15.525	1.00	26.76		C
45	ANISOU	115	C	SER	A	334	2220	3985	3963	656	-843	-480	C
	ATOM	116	O	SER	A	334	49.729	18.424	-16.392	1.00	25.27		O
	ANISOU	116	O	SER	A	334	2118	3691	3794	573	-735	-429	O
	ATOM	117	N	GLY	A	335	51.514	17.201	-15.702	1.00	27.29		N
	ANISOU	117	N	GLY	A	335	2187	4150	4033	801	-881	-502	N
50	ATOM	118	CA	GLY	A	335	51.543	16.328	-16.851	1.00	27.54		C
	ANISOU	118	CA	GLY	A	335	2237	4152	4073	890	-798	-470	C
	ATOM	119	C	GLY	A	335	52.108	16.996	-18.081	1.00	28.17		C
	ANISOU	119	C	GLY	A	335	2172	4300	4230	785	-672	-502	C
	ATOM	120	O	GLY	A	335	52.658	18.070	-18.002	1.00	28.84		O
55	ANISOU	120	O	GLY	A	335	2118	4461	4377	651	-657	-549	O
	ATOM	121	N	SER	A	336	51.966	16.334	-19.225	1.00	29.01		N
	ANISOU	121	N	SER	A	336	2317	4378	4327	841	-577	-478	N
	ATOM	122	CA	SER	A	336	52.594	16.734	-20.488	1.00	29.82		C
	ANISOU	122	CA	SER	A	336	2284	4572	4476	770	-446	-503	C
60	ATOM	123	CB	SER	A	336	54.095	16.434	-20.467	1.00	31.95		C
	ANISOU	123	CB	SER	A	336	2316	5026	4798	861	-468	-597	C
	ATOM	124	OG	SER	A	336	54.337	15.074	-20.142	1.00	33.68		O
	ANISOU	124	OG	SER	A	336	2566	5243	4988	1088	-549	-616	O
	ATOM	125	C	SER	A	336	51.901	15.920	-21.579	1.00	29.25		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	125	C	SER	A	336	2348	4417	4348	830	-360	-463	C
	ATOM	126	O	SER	A	336	51.086	15.038	-21.269	1.00	29.76		O
	ANISOU	126	O	SER	A	336	2585	4361	4362	927	-411	-428	O
	ATOM	127	N	SER	A	337	52.166	16.233	-22.844	1.00	28.72		N
5	ANISOU	127	N	SER	A	337	2213	4414	4284	760	-226	-467	N
	ATOM	128	CA	SER	A	337	51.555	15.491	-23.941	1.00	27.37		C
	ANISOU	128	CA	SER	A	337	2163	4189	4047	811	-146	-447	C
	ATOM	129	CB	SER	A	337	50.107	15.923	-24.208	1.00	25.82		C
	ANISOU	129	CB	SER	A	337	2159	3849	3801	703	-126	-356	C
10	ATOM	130	OG	SER	A	337	49.993	17.233	-24.736	1.00	25.02		O
	ANISOU	130	OG	SER	A	337	2022	3769	3717	524	-47	-301	O
	ATOM	131	C	SER	A	337	52.380	15.600	-25.197	1.00	28.77		C
	ANISOU	131	C	SER	A	337	2201	4511	4219	786	-9	-489	C
	ATOM	132	O	SER	A	337	53.165	16.538	-25.354	1.00	29.57		O
15	ANISOU	132	O	SER	A	337	2138	4728	4370	669	48	-499	O
	ATOM	133	N	ILE	A	338	52.232	14.601	-26.062	1.00	28.60		N
	ANISOU	133	N	ILE	A	338	2243	4486	4138	894	46	-524	N
	ATOM	134	CA	ILE	A	338	52.744	14.661	-27.433	1.00	29.37		C
	ANISOU	134	CA	ILE	A	338	2253	4715	4191	862	197	-558	C
20	ATOM	135	CB	ILE	A	338	53.684	13.470	-27.745	1.00	30.62		C
	ANISOU	135	CB	ILE	A	338	2306	4969	4358	1060	220	-684	C
	ATOM	136	CG1	ILE	A	338	52.951	12.126	-27.567	1.00	28.62		C
	ANISOU	136	CG1	ILE	A	338	2242	4558	4076	1227	144	-711	C
	ATOM	137	CD1	ILE	A	338	53.801	10.890	-27.901	1.00	31.84		C
25	ANISOU	137	CD1	ILE	A	338	2573	5023	4504	1443	164	-841	C
	ATOM	138	CG2	ILE	A	338	54.936	13.557	-26.869	1.00	29.51		C
	ANISOU	138	CG2	ILE	A	338	1946	4947	4320	1128	157	-748	C
	ATOM	139	C	ILE	A	338	51.544	14.715	-28.383	1.00	29.43		C
	ANISOU	139	C	ILE	A	338	2448	4638	4097	787	257	-490	C
30	ATOM	140	O	ILE	A	338	50.421	14.456	-27.965	1.00	27.50		O
	ANISOU	140	O	ILE	A	338	2379	4237	3831	796	177	-443	O
	ATOM	141	N	LYS	A	339	51.768	15.077	-29.643	1.00	32.18		N
	ANISOU	141	N	LYS	A	339	2753	5101	4374	708	395	-484	N
	ATOM	142	CA	LYS	A	339	50.659	15.264	-30.588	1.00	32.96		C
35	ANISOU	142	CA	LYS	A	339	3017	5146	4361	628	443	-410	C
	ATOM	143	CB	LYS	A	339	50.689	16.636	-31.277	1.00	33.66		C
	ANISOU	143	CB	LYS	A	339	3068	5303	4417	436	542	-299	C
	ATOM	144	CG	LYS	A	339	50.626	17.879	-30.433	1.00	35.13		C
	ANISOU	144	CG	LYS	A	339	3225	5418	4704	302	495	-209	C
40	ATOM	145	CD	LYS	A	339	50.839	19.070	-31.356	1.00	39.41		C
	ANISOU	145	CD	LYS	A	339	3730	6034	5211	126	622	-105	C
	ATOM	146	CE	LYS	A	339	51.214	20.330	-30.602	1.00	43.35		C
	ANISOU	146	CE	LYS	A	339	4145	6489	5837	-18	608	-49	C
	ATOM	147	NZ	LYS	A	339	51.747	21.354	-31.562	1.00	47.40		N
45	ANISOU	147	NZ	LYS	A	339	4590	7093	6327	-188	758	41	N
	ATOM	148	C	LYS	A	339	50.829	14.249	-31.693	1.00	34.82		C
	ANISOU	148	C	LYS	A	339	3269	5464	4496	730	526	-506	C
	ATOM	149	O	LYS	A	339	51.942	13.867	-32.033	1.00	35.45		O
	ANISOU	149	O	LYS	A	339	3198	5686	4586	804	603	-605	O
50	ATOM	150	N	ARG	A	340	49.708	13.859	-32.287	1.00	34.88		N
	ANISOU	150	N	ARG	A	340	3453	5392	4405	727	514	-488	N
	ATOM	151	CA	ARG	A	340	49.725	12.999	-33.446	1.00	37.31		C
	ANISOU	151	CA	ARG	A	340	3799	5779	4597	798	594	-585	C
	ATOM	152	CB	ARG	A	340	49.722	11.545	-32.981	1.00	37.81		C
55	ANISOU	152	CB	ARG	A	340	3918	5738	4710	985	522	-715	C
	ATOM	153	CG	ARG	A	340	49.740	10.518	-34.090	1.00	41.11		C
	ANISOU	153	CG	ARG	A	340	4385	6209	5025	1077	596	-851	C
	ATOM	154	CD	ARG	A	340	49.106	9.264	-33.574	1.00	44.08		C
	ANISOU	154	CD	ARG	A	340	4906	6391	5449	1202	493	-927	C
60	ATOM	155	NE	ARG	A	340	49.351	8.129	-34.448	1.00	49.69		N
	ANISOU	155	NE	ARG	A	340	5647	7130	6103	1325	557	-1096	N
	ATOM	156	CZ	ARG	A	340	48.735	6.956	-34.322	1.00	52.03		C
	ANISOU	156	CZ	ARG	A	340	6093	7254	6423	1418	492	-1183	C
	ATOM	157	NH1	ARG	A	340	47.836	6.774	-33.353	1.00	51.49		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	157	NH1	ARG	A	340	6152	6986	6426	1395	368	-1102	N
	ATOM	158	NH2	ARG	A	340	49.013	5.967	-35.163	1.00	53.54		N
	ANISOU	158	NH2	ARG	A	340	6308	7469	6565	1528	558	-1356	N
	ATOM	159	C	ARG	A	340	48.494	13.280	-34.318	1.00	36.74		C
5	ANISOU	159	C	ARG	A	340	3889	5680	4391	701	601	-510	C
	ATOM	160	O	ARG	A	340	47.381	13.418	-33.808	1.00	35.04		O
	ANISOU	160	O	ARG	A	340	3799	5317	4196	663	499	-439	O
	ATOM	161	N	GLU	A	341	48.689	13.298	-35.631	1.00	38.65		N
	ANISOU	161	N	GLU	A	341	4121	6076	4488	670	720	-537	N
10	ATOM	162	CA	GLU	A	341	47.613	13.581	-36.585	1.00	38.96		C
	ANISOU	162	CA	GLU	A	341	4300	6129	4373	584	724	-467	C
	ATOM	163	CB	GLU	A	341	48.207	14.150	-37.884	1.00	41.11		C
	ANISOU	163	CB	GLU	A	341	4510	6619	4490	505	881	-436	C
	ATOM	164	CG	GLU	A	341	47.223	14.984	-38.717	1.00	44.93		C
15	ANISOU	164	CG	GLU	A	341	5114	7131	4828	380	878	-285	C
	ATOM	165	CD	GLU	A	341	47.713	16.411	-38.966	1.00	50.98		C
	ANISOU	165	CD	GLU	A	341	5809	7976	5584	232	968	-111	C
	ATOM	166	OE1	GLU	A	341	48.843	16.587	-39.478	1.00	53.24		O
	ANISOU	166	OE1	GLU	A	341	5969	8430	5831	202	1115	-135	O
20	ATOM	167	OE2	GLU	A	341	46.961	17.362	-38.638	1.00	52.85		O
	ANISOU	167	OE2	GLU	A	341	6117	8101	5863	142	896	49	O
	ATOM	168	C	GLU	A	341	46.793	12.331	-36.867	1.00	38.09		C
	ANISOU	168	C	GLU	A	341	4327	5941	4204	678	662	-589	C
	ATOM	169	O	GLU	A	341	47.339	11.310	-37.253	1.00	39.85		O
25	ANISOU	169	O	GLU	A	341	4528	6213	4402	792	712	-749	O
	ATOM	170	N	GLU	A	342	45.486	12.415	-36.661	1.00	36.22		N
	ANISOU	170	N	GLU	A	342	4225	5579	3958	630	556	-523	N
	ATOM	171	CA	GLU	A	342	44.583	11.283	-36.867	1.00	35.81		C
30	ANISOU	171	CA	GLU	A	342	4305	5437	3866	688	488	-634	C
	ATOM	172	CB	GLU	A	342	44.147	10.658	-35.531	1.00	34.01		C
	ANISOU	172	CB	GLU	A	342	4129	4994	3799	747	372	-653	C
	ATOM	173	CG	GLU	A	342	45.206	9.806	-34.803	1.00	36.13		C
	ANISOU	173	CG	GLU	A	342	4330	5210	4188	889	381	-758	C
	ATOM	174	CD	GLU	A	342	44.743	9.377	-33.407	1.00	35.59		C
35	ANISOU	174	CD	GLU	A	342	4326	4936	4262	929	264	-729	C
	ATOM	175	OE1	GLU	A	342	45.588	9.256	-32.489	1.00	36.85		O
	ANISOU	175	OE1	GLU	A	342	4407	5063	4532	1012	245	-731	O
	ATOM	176	OE2	GLU	A	342	43.515	9.182	-33.211	1.00	38.13		O
	ANISOU	176	OE2	GLU	A	342	4771	5140	4578	874	190	-700	O
40	ATOM	177	C	GLU	A	342	43.348	11.764	-37.613	1.00	34.67		C
	ANISOU	177	C	GLU	A	342	4264	5320	3589	586	446	-553	C
	ATOM	178	O	GLU	A	342	42.952	12.925	-37.477	1.00	33.00		O
	ANISOU	178	O	GLU	A	342	4047	5109	3382	490	423	-388	O
	ATOM	179	N	GLU	A	343	42.744	10.866	-38.396	1.00	34.97		N
45	ANISOU	179	N	GLU	A	343	4394	5378	3515	612	430	-675	N
	ATOM	180	CA	GLU	A	343	41.458	11.149	-39.027	1.00	34.95		C
	ANISOU	180	CA	GLU	A	343	4487	5398	3393	529	359	-621	C
	ATOM	181	CB	GLU	A	343	41.400	10.673	-40.480	1.00	36.90		C
	ANISOU	181	CB	GLU	A	343	4778	5818	3423	531	413	-733	C
50	ATOM	182	CG	GLU	A	343	42.297	11.448	-41.402	1.00	40.28		C
	ANISOU	182	CG	GLU	A	343	5137	6463	3706	499	544	-666	C
	ATOM	183	CD	GLU	A	343	42.120	11.051	-42.851	1.00	46.55		C
	ANISOU	183	CD	GLU	A	343	5988	7449	4252	492	592	-767	C
	ATOM	184	OE1	GLU	A	343	42.201	9.829	-43.156	1.00	49.23		O
55	ANISOU	184	OE1	GLU	A	343	6363	7781	4562	569	603	-985	O
	ATOM	185	OE2	GLU	A	343	41.906	11.965	-43.686	1.00	47.82		O
	ANISOU	185	OE2	GLU	A	343	6164	7764	4241	412	616	-627	O
	ATOM	186	C	GLU	A	343	40.331	10.521	-38.238	1.00	33.33		C
	ANISOU	186	C	GLU	A	343	4367	5004	3293	529	234	-656	C
60	ATOM	187	O	GLU	A	343	40.314	9.306	-37.987	1.00	33.83		O
	ANISOU	187	O	GLU	A	343	4478	4963	3412	597	215	-808	O
	ATOM	188	N	VAL	A	344	39.377	11.366	-37.868	1.00	31.66		N
	ANISOU	188	N	VAL	A	344	4174	4745	3110	451	153	-512	N
	ATOM	189	CA	VAL	A	344	38.220	10.946	-37.086	1.00	29.70		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	189	CA	VAL	A	344	3988	4336	2960	430	43	-524	C
	ATOM	190	CB	VAL	A	344	38.219	11.619	-35.676	1.00	27.60		C
	ANISOU	190	CB	VAL	A	344	3682	3937	2866	420	8	-403	C
	ATOM	191	CG1	VAL	A	344	39.536	11.354	-34.968	1.00	27.04		C
5	ANISOU	191	CG1	VAL	A	344	3551	3828	2895	497	68	-437	C
	ATOM	192	CG2	VAL	A	344	38.006	13.082	-35.781	1.00	26.27		C
	ANISOU	192	CG2	VAL	A	344	3472	3829	2680	354	3	-231	C
	ATOM	193	C	VAL	A	344	36.924	11.195	-37.880	1.00	29.93		C
	ANISOU	193	C	VAL	A	344	4067	4436	2869	358	-34	-498	C
10	ATOM	194	O	VAL	A	344	36.926	11.910	-38.891	1.00	30.08		O
	ANISOU	194	O	VAL	A	344	4076	4615	2736	327	-12	-427	O
	ATOM	195	N	LEU	A	345	35.842	10.556	-37.454	1.00	29.10		N
	ANISOU	195	N	LEU	A	345	4013	4220	2824	331	-122	-559	N
	ATOM	196	CA	LEU	A	345	34.564	10.639	-38.170	1.00	29.46		C
15	ANISOU	196	CA	LEU	A	345	4088	4339	2767	267	-210	-564	C
	ATOM	197	CB	LEU	A	345	34.148	9.271	-38.665	1.00	30.37		C
	ANISOU	197	CB	LEU	A	345	4269	4435	2834	260	-234	-769	C
	ATOM	198	CG	LEU	A	345	34.852	8.751	-39.913	1.00	33.75		C
	ANISOU	198	CG	LEU	A	345	4723	5011	3089	297	-167	-900	C
20	ATOM	199	CD1	LEU	A	345	35.036	7.242	-39.784	1.00	35.77		C
	ANISOU	199	CD1	LEU	A	345	5045	5139	3408	333	-149	-1117	C
	ATOM	200	CD2	LEU	A	345	34.081	9.105	-41.171	1.00	33.10		C
	ANISOU	200	CD2	LEU	A	345	4653	5125	2797	243	-226	-900	C
	ATOM	201	C	LEU	A	345	33.486	11.170	-37.248	1.00	27.67		C
25	ANISOU	201	C	LEU	A	345	3841	4009	2661	219	-296	-463	C
	ATOM	202	O	LEU	A	345	33.301	10.630	-36.166	1.00	27.33		O
	ANISOU	202	O	LEU	A	345	3812	3808	2766	218	-308	-498	O
	ATOM	203	N	THR	A	346	32.793	12.229	-37.663	1.00	27.06		N
30	ANISOU	203	N	THR	A	346	3734	4024	2522	186	-351	-335	N
	ATOM	204	CA	THR	A	346	31.706	12.815	-36.857	1.00	25.51		C
	ANISOU	204	CA	THR	A	346	3504	3749	2440	153	-431	-248	C
	ATOM	205	CB	THR	A	346	31.306	14.244	-37.367	1.00	25.70		C
	ANISOU	205	CB	THR	A	346	3492	3871	2401	152	-474	-71	C
	ATOM	206	OG1	THR	A	346	30.535	14.151	-38.575	1.00	27.06		O
35	ANISOU	206	OG1	THR	A	346	3676	4199	2405	136	-550	-97	O
	ATOM	207	CG2	THR	A	346	32.515	15.135	-37.609	1.00	24.02		C
	ANISOU	207	CG2	THR	A	346	3273	3699	2154	177	-384	49	C
	ATOM	208	C	THR	A	346	30.457	11.896	-36.816	1.00	26.38		C
	ANISOU	208	C	THR	A	346	3628	3829	2568	101	-515	-371	C
40	ATOM	209	O	THR	A	346	30.402	10.882	-37.518	1.00	27.44		O
	ANISOU	209	O	THR	A	346	3805	4004	2616	84	-521	-521	O
	ATOM	210	N	GLY	A	347	29.450	12.255	-36.016	1.00	25.61		N
	ANISOU	210	N	GLY	A	347	3486	3661	2583	68	-575	-320	N
	ATOM	211	CA	GLY	A	347	28.142	11.586	-36.109	1.00	25.17		C
45	ANISOU	211	CA	GLY	A	347	3414	3613	2535	0	-659	-421	C
	ATOM	212	C	GLY	A	347	27.442	11.653	-37.467	1.00	26.55		C
	ANISOU	212	C	GLY	A	347	3572	3975	2541	-19	-747	-458	C
	ATOM	213	O	GLY	A	347	26.559	10.833	-37.753	1.00	27.47		O
	ANISOU	213	O	GLY	A	347	3681	4117	2641	-85	-811	-591	O
50	ATOM	214	N	ASN	A	348	27.812	12.630	-38.302	1.00	26.51		N
	ANISOU	214	N	ASN	A	348	3561	4103	2408	31	-754	-337	N
	ATOM	215	CA	ASN	A	348	27.340	12.690	-39.715	1.00	27.47		C
	ANISOU	215	CA	ASN	A	348	3685	4430	2323	26	-835	-360	C
	ATOM	216	CB	ASN	A	348	27.036	14.128	-40.155	1.00	27.65		C
55	ANISOU	216	CB	ASN	A	348	3670	4556	2281	75	-894	-155	C
	ATOM	217	CG	ASN	A	348	25.936	14.197	-41.212	1.00	30.51		C
	ANISOU	217	CG	ASN	A	348	3999	5108	2487	66	-1036	-172	C
	ATOM	218	OD1	ASN	A	348	25.056	13.330	-41.277	1.00	32.90		O
	ANISOU	218	OD1	ASN	A	348	4267	5438	2795	8	-1112	-331	O
60	ATOM	219	ND2	ASN	A	348	26.001	15.206	-42.070	1.00	30.49		N
	ANISOU	219	ND2	ASN	A	348	4008	5240	2337	120	-1076	-9	N
	ATOM	220	C	ASN	A	348	28.300	12.039	-40.715	1.00	28.41		C
	ANISOU	220	C	ASN	A	348	3879	4646	2270	37	-769	-462	C
	ATOM	221	O	ASN	A	348	28.092	12.120	-41.927	1.00	29.94		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	221	O	ASN	A	348	4087	5027	2260	37	-821	-478	O
	ATOM	222	N	LEU	A	349	29.339	11.376	-40.203	1.00	27.99		N
	ANISOU	222	N	LEU	A	349	3869	4473	2293	53	-657	-538	N
	ATOM	223	CA	LEU	A	349	30.311	10.650	-41.043	1.00	29.00		C
5	ANISOU	223	CA	LEU	A	349	4058	4676	2284	77	-577	-664	C
	ATOM	224	CB	LEU	A	349	29.602	9.567	-41.884	1.00	30.71		C
	ANISOU	224	CB	LEU	A	349	4309	4973	2386	27	-646	-875	C
	ATOM	225	CG	LEU	A	349	28.751	8.531	-41.136	1.00	30.08		C
	ANISOU	225	CG	LEU	A	349	4234	4731	2466	-42	-696	-1020	C
10	ATOM	226	CD1	LEU	A	349	28.022	7.598	-42.085	1.00	30.19		C
	ANISOU	226	CD1	LEU	A	349	4274	4842	2357	-109	-773	-1229	C
	ATOM	227	CD2	LEU	A	349	29.637	7.731	-40.222	1.00	29.27		C
	ANISOU	227	CD2	LEU	A	349	4181	4417	2521	-10	-593	-1087	C
	ATOM	228	C	LEU	A	349	31.195	11.574	-41.914	1.00	29.53		C
15	ANISOU	228	C	LEU	A	349	4130	4907	2185	121	-512	-535	C
	ATOM	229	O	LEU	A	349	31.589	11.202	-43.025	1.00	31.24		O
	ANISOU	229	O	LEU	A	349	4386	5279	2206	128	-480	-624	O
	ATOM	230	N	GLN	A	350	31.500	12.768	-41.395	1.00	28.82		N
	ANISOU	230	N	GLN	A	350	4003	4776	2171	141	-485	-330	N
20	ATOM	231	CA	GLN	A	350	32.430	13.729	-42.020	1.00	30.27		C
	ANISOU	231	CA	GLN	A	350	4189	5072	2238	164	-402	-180	C
	ATOM	232	CB	GLN	A	350	31.967	15.164	-41.722	1.00	29.66		C
	ANISOU	232	CB	GLN	A	350	4082	4968	2219	164	-454	54	C
	ATOM	233	CG	GLN	A	350	32.811	16.292	-42.325	1.00	30.58		C
25	ANISOU	233	CG	GLN	A	350	4211	5174	2234	167	-373	242	C
	ATOM	234	CD	GLN	A	350	32.356	17.682	-41.883	1.00	30.94		C
	ANISOU	234	CD	GLN	A	350	4238	5137	2382	172	-423	464	C
	ATOM	235	OE1	GLN	A	350	31.407	17.830	-41.095	1.00	28.70		O
	ANISOU	235	OE1	GLN	A	350	3920	4739	2246	182	-518	470	O
30	ATOM	236	NE2	GLN	A	350	33.032	18.708	-42.394	1.00	31.65		N
	ANISOU	236	NE2	GLN	A	350	4350	5278	2397	161	-353	643	N
	ATOM	237	C	GLN	A	350	33.826	13.515	-41.457	1.00	29.30		C
	ANISOU	237	C	GLN	A	350	4053	4868	2210	193	-262	-209	C
	ATOM	238	O	GLN	A	350	33.975	13.375	-40.257	1.00	27.88		O
35	ANISOU	238	O	GLN	A	350	3848	4515	2231	203	-253	-217	O
	ATOM	239	N	THR	A	351	34.832	13.499	-42.315	1.00	30.89		N
	ANISOU	239	N	THR	A	351	4265	5208	2262	207	-156	-226	N
	ATOM	240	CA	THR	A	351	36.226	13.364	-41.880	1.00	31.43		C
	ANISOU	240	CA	THR	A	351	4295	5233	2412	241	-21	-254	C
40	ATOM	241	CB	THR	A	351	37.120	12.811	-43.019	1.00	33.11		C
	ANISOU	241	CB	THR	A	351	4522	5629	2431	264	91	-373	C
	ATOM	242	OG1	THR	A	351	36.598	11.543	-43.428	1.00	32.96		O
	ANISOU	242	OG1	THR	A	351	4555	5620	2346	282	42	-592	O
	ATOM	243	CG2	THR	A	351	38.567	12.622	-42.553	1.00	34.11		C
45	ANISOU	243	CG2	THR	A	351	4582	5723	2657	309	229	-418	C
	ATOM	244	C	THR	A	351	36.792	14.669	-41.370	1.00	31.33		C
	ANISOU	244	C	THR	A	351	4233	5181	2492	220	30	-48	C
	ATOM	245	O	THR	A	351	36.719	15.702	-42.065	1.00	32.56		O
	ANISOU	245	O	THR	A	351	4400	5442	2531	184	38	119	O
50	ATOM	246	N	LEU	A	352	37.338	14.623	-40.153	1.00	30.61		N
	ANISOU	246	N	LEU	A	352	4091	4933	2605	240	57	-57	N
	ATOM	247	CA	LEU	A	352	38.103	15.732	-39.588	1.00	30.88		C
	ANISOU	247	CA	LEU	A	352	4065	4923	2744	215	120	94	C
	ATOM	248	CB	LEU	A	352	37.467	16.248	-38.296	1.00	28.81		C
55	ANISOU	248	CB	LEU	A	352	3790	4476	2680	205	35	169	C
	ATOM	249	CG	LEU	A	352	36.033	16.805	-38.295	1.00	28.66		C
	ANISOU	249	CG	LEU	A	352	3809	4417	2663	183	-86	262	C
	ATOM	250	CD1	LEU	A	352	35.625	17.143	-36.864	1.00	26.74		C
	ANISOU	250	CD1	LEU	A	352	3538	3992	2629	184	-138	291	C
60	ATOM	251	CD2	LEU	A	352	35.847	18.027	-39.226	1.00	29.78		C
	ANISOU	251	CD2	LEU	A	352	3972	4656	2686	149	-86	449	C
	ATOM	252	C	LEU	A	352	39.550	15.297	-39.350	1.00	32.06		C
	ANISOU	252	C	LEU	A	352	4145	5094	2942	250	241	5	C
	ATOM	253	O	LEU	A	352	39.807	14.219	-38.805	1.00	31.91		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	253	O	LEU	A	352	4119	5002	3003	313	237	-151	O
	ATOM	254	N	LYS	A	353	40.489	16.127	-39.790	1.00	33.85		N
	ANISOU	254	N	LYS	A	353	4320	5423	3120	208	350	105	N
	ATOM	255	CA	LYS	A	353	41.898	15.963	-39.470	1.00	34.96		C
5	ANISOU	255	CA	LYS	A	353	4358	5594	3332	230	465	43	C
	ATOM	256	CB	LYS	A	353	42.735	16.484	-40.626	1.00	37.50		C
	ANISOU	256	CB	LYS	A	353	4644	6115	3488	179	606	104	C
	ATOM	257	CG	LYS	A	353	44.133	15.905	-40.717	1.00	41.91		C
	ANISOU	257	CG	LYS	A	353	5091	6777	4055	224	740	-29	C
10	ATOM	258	CD	LYS	A	353	44.876	16.499	-41.917	1.00	48.11		C
	ANISOU	258	CD	LYS	A	353	5841	7780	4658	151	894	45	C
	ATOM	259	CE	LYS	A	353	45.805	15.477	-42.553	1.00	51.72		C
	ANISOU	259	CE	LYS	A	353	6232	8401	5018	228	1016	-154	C
	ATOM	260	NZ	LYS	A	353	46.301	15.930	-43.897	1.00	55.83		N
15	ANISOU	260	NZ	LYS	A	353	6745	9164	5305	155	1168	-93	N
	ATOM	261	C	LYS	A	353	42.176	16.775	-38.212	1.00	33.47		C
	ANISOU	261	C	LYS	A	353	4107	5260	3349	199	442	138	C
	ATOM	262	O	LYS	A	353	42.115	18.008	-38.238	1.00	33.44		O
	ANISOU	262	O	LYS	A	353	4099	5242	3365	118	453	305	O
20	ATOM	263	N	ILE	A	354	42.447	16.075	-37.110	1.00	32.36		N
	ANISOU	263	N	ILE	A	354	3930	5007	3360	266	404	30	N
	ATOM	264	CA	ILE	A	354	42.806	16.720	-35.842	1.00	31.37		C
	ANISOU	264	CA	ILE	A	354	3738	4762	3418	245	377	87	C
	ATOM	265	CB	ILE	A	354	41.737	16.490	-34.731	1.00	29.39		C
25	ANISOU	265	CB	ILE	A	354	3552	4334	3280	270	247	81	C
	ATOM	266	CG1	ILE	A	354	41.620	15.001	-34.379	1.00	28.30		C
	ANISOU	266	CG1	ILE	A	354	3451	4143	3159	368	206	-78	C
	ATOM	267	CD1	ILE	A	354	40.879	14.705	-33.055	1.00	28.35		C
	ANISOU	267	CD1	ILE	A	354	3501	3978	3294	389	104	-86	C
30	ATOM	268	CG2	ILE	A	354	40.373	17.085	-35.158	1.00	29.30		C
	ANISOU	268	CG2	ILE	A	354	3629	4293	3209	219	176	185	C
	ATOM	269	C	ILE	A	354	44.170	16.257	-35.328	1.00	31.76		C
	ANISOU	269	C	ILE	A	354	3668	4847	3552	301	442	-15	C
	ATOM	270	O	ILE	A	354	44.603	15.135	-35.611	1.00	32.13		O
35	ANISOU	270	O	ILE	A	354	3703	4946	3559	394	471	-157	O
	ATOM	271	N	ARG	A	355	44.834	17.127	-34.571	1.00	31.99		N
	ANISOU	271	N	ARG	A	355	3606	4847	3703	249	457	49	N
	ATOM	272	CA	ARG	A	355	46.027	16.753	-33.847	1.00	32.46		C
	ANISOU	272	CA	ARG	A	355	3536	4929	3866	306	483	-44	C
40	ATOM	273	CB	ARG	A	355	46.987	17.948	-33.720	1.00	34.26		C
	ANISOU	273	CB	ARG	A	355	3637	5219	4163	198	559	35	C
	ATOM	274	CG	ARG	A	355	47.656	18.288	-35.032	1.00	39.00		C
	ANISOU	274	CG	ARG	A	355	4181	5997	4639	132	708	67	C
	ATOM	275	CD	ARG	A	355	48.600	19.431	-34.872	1.00	45.77		C
45	ANISOU	275	CD	ARG	A	355	4910	6902	5578	6	790	144	C
	ATOM	276	NE	ARG	A	355	48.574	20.333	-36.023	1.00	52.25		N
	ANISOU	276	NE	ARG	A	355	5764	7806	6284	-123	901	284	N
	ATOM	277	CZ	ARG	A	355	49.146	21.539	-36.057	1.00	56.14		C
	ANISOU	277	CZ	ARG	A	355	6188	8307	6837	-272	980	398	C
50	ATOM	278	NH1	ARG	A	355	49.801	22.023	-34.996	1.00	55.45		N
	ANISOU	278	NH1	ARG	A	355	5982	8157	6928	-320	956	369	N
	ATOM	279	NH2	ARG	A	355	49.061	22.269	-37.166	1.00	58.73		N
	ANISOU	279	NH2	ARG	A	355	6571	8703	7040	-381	1083	542	N
	ATOM	280	C	ARG	A	355	45.608	16.213	-32.488	1.00	29.93		C
55	ANISOU	280	C	ARG	A	355	3252	4453	3666	379	359	-91	C
	ATOM	281	O	ARG	A	355	45.187	16.959	-31.616	1.00	28.02		O
	ANISOU	281	O	ARG	A	355	3025	4108	3513	324	295	-17	O
	ATOM	282	N	VAL	A	356	45.705	14.897	-32.339	1.00	28.99		N
	ANISOU	282	N	VAL	A	356	3158	4313	3543	504	331	-216	N
60	ATOM	283	CA	VAL	A	356	45.350	14.233	-31.098	1.00	27.31		C
	ANISOU	283	CA	VAL	A	356	2994	3955	3426	581	223	-254	C
	ATOM	284	CB	VAL	A	356	45.003	12.746	-31.341	1.00	27.54		C
	ANISOU	284	CB	VAL	A	356	3118	3930	3417	695	198	-368	C
	ATOM	285	CG1	VAL	A	356	44.842	11.989	-30.014	1.00	27.23		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	285	CG1	VAL	A	356	3128	3741	3479	780	99	-394	C
	ATOM	286	CG2	VAL	A	356	43.732	12.634	-32.157	1.00	26.35		C
	ANISOU	286	CG2	VAL	A	356	3094	3753	3164	637	186	-350	C
	ATOM	287	C	VAL	A	356	46.460	14.367	-30.058	1.00	26.67		C
5	ANISOU	287	C	VAL	A	356	2786	3889	3460	624	204	-279	C
	ATOM	288	O	VAL	A	356	47.604	14.038	-30.324	1.00	28.57		O
	ANISOU	288	O	VAL	A	356	2907	4239	3708	689	263	-354	O
	ATOM	289	N	HIS	A	357	46.128	14.879	-28.884	1.00	25.43		N
10	ANISOU	289	N	HIS	A	357	2642	3635	3385	590	121	-224	N
	ATOM	290	CA	HIS	A	357	47.107	14.993	-27.808	1.00	25.05		C
	ANISOU	290	CA	HIS	A	357	2478	3607	3433	631	79	-254	C
	ATOM	291	CB	HIS	A	357	46.849	16.229	-26.954	1.00	23.90		C
	ANISOU	291	CB	HIS	A	357	2315	3412	3353	517	36	-177	C
	ATOM	292	CG	HIS	A	357	47.266	17.509	-27.615	1.00	24.64		C
15	ANISOU	292	CG	HIS	A	357	2322	3585	3457	380	123	-117	C
	ATOM	293	ND1	HIS	A	357	48.390	18.216	-27.235	1.00	25.54		N
	ANISOU	293	ND1	HIS	A	357	2277	3779	3648	325	146	-136	N
	ATOM	294	CE1	HIS	A	357	48.507	19.290	-27.995	1.00	24.49		C
20	ANISOU	294	CE1	HIS	A	357	2110	3684	3511	188	235	-62	C
	ATOM	295	NE2	HIS	A	357	47.505	19.300	-28.857	1.00	25.00		N
	ANISOU	295	NE2	HIS	A	357	2307	3703	3488	167	263	9	N
	ATOM	296	CD2	HIS	A	357	46.725	18.191	-28.652	1.00	22.30		C
	ANISOU	296	CD2	HIS	A	357	2077	3296	3100	282	192	-34	C
	ATOM	297	C	HIS	A	357	47.122	13.716	-26.984	1.00	25.08		C
25	ANISOU	297	C	HIS	A	357	2536	3529	3463	781	-5	-319	C
	ATOM	298	O	HIS	A	357	46.079	13.215	-26.573	1.00	24.14		O
	ANISOU	298	O	HIS	A	357	2561	3280	3330	795	-66	-297	O
	ATOM	299	N	GLU	A	358	48.322	13.175	-26.778	1.00	25.97		N
30	ANISOU	299	N	GLU	A	358	2530	3722	3616	895	-6	-397	N
	ATOM	300	CA	GLU	A	358	48.492	11.913	-26.065	1.00	25.43		C
	ANISOU	300	CA	GLU	A	358	2512	3575	3577	1062	-86	-451	C
	ATOM	301	CB	GLU	A	358	49.224	10.905	-26.939	1.00	26.70		C
	ANISOU	301	CB	GLU	A	358	2626	3796	3722	1198	-23	-558	C
	ATOM	302	CG	GLU	A	358	48.506	10.641	-28.264	1.00	26.20		C
35	ANISOU	302	CG	GLU	A	358	2661	3726	3567	1151	64	-583	C
	ATOM	303	CD	GLU	A	358	49.340	9.852	-29.243	1.00	28.06		C
	ANISOU	303	CD	GLU	A	358	2826	4059	3777	1267	151	-709	C
	ATOM	304	OE1	GLU	A	358	50.595	9.994	-29.261	1.00	27.40		O
40	ANISOU	304	OE1	GLU	A	358	2558	4117	3735	1329	192	-763	O
	ATOM	305	OE2	GLU	A	358	48.730	9.082	-30.014	1.00	28.42		O
	ANISOU	305	OE2	GLU	A	358	2993	4046	3760	1295	181	-767	O
	ATOM	306	C	GLU	A	358	49.233	12.107	-24.751	1.00	25.42		C
	ANISOU	306	C	GLU	A	358	2416	3596	3646	1113	-180	-446	C
	ATOM	307	O	GLU	A	358	50.317	12.638	-24.734	1.00	25.81		O
45	ANISOU	307	O	GLU	A	358	2285	3785	3737	1107	-159	-481	O
	ATOM	308	N	GLY	A	359	48.608	11.697	-23.651	1.00	24.36		N
	ANISOU	308	N	GLY	A	359	2405	3335	3518	1152	-283	-403	N
	ATOM	309	CA	GLY	A	359	49.203	11.836	-22.335	1.00	23.73		C
50	ANISOU	309	CA	GLY	A	359	2258	3280	3476	1204	-388	-394	C
	ATOM	310	C	GLY	A	359	48.271	12.445	-21.311	1.00	22.21		C
	ANISOU	310	C	GLY	A	359	2168	3005	3267	1103	-452	-318	C
	ATOM	311	O	GLY	A	359	47.324	13.163	-21.653	1.00	21.39		O
	ANISOU	311	O	GLY	A	359	2131	2854	3144	965	-404	-274	O
	ATOM	312	N	TYR	A	360	48.535	12.139	-20.049	1.00	22.42		N
55	ANISOU	312	N	TYR	A	360	2206	3018	3293	1183	-562	-305	N
	ATOM	313	CA	TYR	A	360	47.836	12.761	-18.939	1.00	22.10		C
	ANISOU	313	CA	TYR	A	360	2238	2934	3226	1096	-623	-252	C
	ATOM	314	CB	TYR	A	360	48.072	11.966	-17.646	1.00	23.09		C
	ANISOU	314	CB	TYR	A	360	2423	3034	3318	1228	-745	-227	C
60	ATOM	315	CG	TYR	A	360	47.620	12.724	-16.422	1.00	22.63		C
	ANISOU	315	CG	TYR	A	360	2399	2981	3217	1141	-809	-196	C
	ATOM	316	CD1	TYR	A	360	46.261	12.802	-16.094	1.00	21.89		C
	ANISOU	316	CD1	TYR	A	360	2469	2771	3076	1053	-784	-137	C
	ATOM	317	CE1	TYR	A	360	45.826	13.516	-14.980	1.00	22.60		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	317	CE1	TYR	A	360	2589	2877	3121	976	-829	-125	C
	ATOM	318	CZ	TYR	A	360	46.759	14.181	-14.201	1.00	23.69		C
	ANISOU	318	CZ	TYR	A	360	2599	3145	3259	979	-908	-177	C
	ATOM	319	OH	TYR	A	360	46.326	14.889	-13.103	1.00	24.72		O
5	ANISOU	319	OH	TYR	A	360	2764	3296	3335	903	-950	-184	O
	ATOM	320	CE2	TYR	A	360	48.122	14.118	-14.506	1.00	23.39		C
	ANISOU	320	CE2	TYR	A	360	2391	3226	3272	1057	-943	-234	C
	ATOM	321	CD2	TYR	A	360	48.543	13.397	-15.617	1.00	21.33		C
10	ANISOU	321	CD2	TYR	A	360	2094	2952	3059	1140	-889	-241	C
	ATOM	322	C	TYR	A	360	48.232	14.229	-18.731	1.00	21.86		C
	ANISOU	322	C	TYR	A	360	2068	3007	3231	959	-615	-276	C
	ATOM	323	O	TYR	A	360	49.413	14.553	-18.673	1.00	23.34		O
	ANISOU	323	O	TYR	A	360	2082	3326	3462	981	-634	-333	O
	ATOM	324	N	GLU	A	361	47.237	15.100	-18.598	1.00	21.04		N
15	ANISOU	324	N	GLU	A	361	2037	2837	3118	821	-587	-239	N
	ATOM	325	CA	GLU	A	361	47.450	16.524	-18.288	1.00	21.68		C
	ANISOU	325	CA	GLU	A	361	2021	2973	3244	684	-582	-262	C
	ATOM	326	CB	GLU	A	361	47.406	17.391	-19.552	1.00	20.98		C
20	ANISOU	326	CB	GLU	A	361	1876	2893	3201	564	-469	-250	C
	ATOM	327	CG	GLU	A	361	48.599	17.217	-20.468	1.00	24.43		C
	ANISOU	327	CG	GLU	A	361	2161	3450	3670	596	-412	-291	C
	ATOM	328	CD	GLU	A	361	48.413	17.894	-21.813	1.00	22.96		C
	ANISOU	328	CD	GLU	A	361	1960	3269	3496	484	-289	-254	C
	ATOM	329	OE1	GLU	A	361	47.351	17.715	-22.440	1.00	20.90		O
25	ANISOU	329	OE1	GLU	A	361	1833	2919	3188	469	-249	-198	O
	ATOM	330	OE2	GLU	A	361	49.338	18.607	-22.238	1.00	26.07		O
	ANISOU	330	OE2	GLU	A	361	2204	3762	3940	408	-232	-278	O
	ATOM	331	C	GLU	A	361	46.384	17.031	-17.332	1.00	20.41		C
30	ANISOU	331	C	GLU	A	361	1975	2727	3053	614	-618	-235	C
	ATOM	332	O	GLU	A	361	45.240	16.587	-17.379	1.00	19.53		O
	ANISOU	332	O	GLU	A	361	2009	2512	2900	617	-599	-184	O
	ATOM	333	N	GLU	A	362	46.774	17.961	-16.476	1.00	21.16		N
	ANISOU	333	N	GLU	A	362	1994	2876	3172	547	-666	-282	N
	ATOM	334	CA	GLU	A	362	45.841	18.688	-15.628	1.00	22.46		C
35	ANISOU	334	CA	GLU	A	362	2243	2974	3317	465	-683	-283	C
	ATOM	335	CB	GLU	A	362	46.105	18.430	-14.141	1.00	22.93		C
	ANISOU	335	CB	GLU	A	362	2317	3092	3304	522	-796	-319	C
	ATOM	336	CG	GLU	A	362	45.054	19.016	-13.191	1.00	23.73		C
40	ANISOU	336	CG	GLU	A	362	2522	3135	3361	454	-803	-328	C
	ATOM	337	CD	GLU	A	362	45.445	18.797	-11.736	1.00	26.51		C
	ANISOU	337	CD	GLU	A	362	2881	3575	3616	507	-916	-369	C
	ATOM	338	OE1	GLU	A	362	44.878	17.909	-11.080	1.00	31.01		O
	ANISOU	338	OE1	GLU	A	362	3579	4121	4081	581	-946	-311	O
	ATOM	339	OE2	GLU	A	362	46.357	19.496	-11.254	1.00	32.87		O
45	ANISOU	339	OE2	GLU	A	362	3562	4482	4446	471	-977	-458	O
	ATOM	340	C	GLU	A	362	45.923	20.184	-15.927	1.00	22.18		C
	ANISOU	340	C	GLU	A	362	2128	2929	3372	317	-633	-319	C
	ATOM	341	O	GLU	A	362	47.018	20.735	-16.087	1.00	23.04		O
50	ANISOU	341	O	GLU	A	362	2089	3123	3544	271	-636	-371	O
	ATOM	342	N	PHE	A	363	44.759	20.825	-15.996	1.00	21.18		N
	ANISOU	342	N	PHE	A	363	2095	2693	3259	243	-588	-290	N
	ATOM	343	CA	PHE	A	363	44.646	22.260	-16.286	1.00	21.78		C
	ANISOU	343	CA	PHE	A	363	2129	2714	3431	111	-538	-309	C
	ATOM	344	CB	PHE	A	363	44.028	22.491	-17.691	1.00	20.64		C
55	ANISOU	344	CB	PHE	A	363	2025	2495	3323	74	-443	-220	C
	ATOM	345	CG	PHE	A	363	44.832	21.911	-18.837	1.00	21.21		C
	ANISOU	345	CG	PHE	A	363	2029	2642	3388	104	-397	-186	C
	ATOM	346	CD1	PHE	A	363	45.831	22.663	-19.453	1.00	20.96		C
60	ANISOU	346	CD1	PHE	A	363	1874	2663	3429	19	-346	-195	C
	ATOM	347	CE1	PHE	A	363	46.570	22.150	-20.514	1.00	21.38		C
	ANISOU	347	CE1	PHE	A	363	1855	2803	3465	45	-287	-172	C
	ATOM	348	CZ	PHE	A	363	46.313	20.885	-20.998	1.00	18.73		C
	ANISOU	348	CZ	PHE	A	363	1579	2489	3048	163	-284	-150	C
	ATOM	349	CE2	PHE	A	363	45.316	20.123	-20.407	1.00	20.47		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	349	CE2	PHE	A	363	1932	2638	3209	242	-340	-139	C
	ATOM	350	CD2	PHE	A	363	44.570	20.637	-19.319	1.00	18.91		C
	ANISOU	350	CD2	PHE	A	363	1799	2365	3021	209	-392	-151	C
	ATOM	351	C	PHE	A	363	43.738	22.994	-15.315	1.00	21.72		C
5	ANISOU	351	C	PHE	A	363	2196	2632	3426	65	-558	-349	C
	ATOM	352	O	PHE	A	363	42.737	22.439	-14.830	1.00	20.51		O
	ANISOU	352	O	PHE	A	363	2152	2441	3199	117	-569	-326	O
	ATOM	353	N	THR	A	364	44.060	24.266	-15.070	1.00	22.89		N
10	ANISOU	353	N	THR	A	364	2282	2752	3664	-41	-553	-414	N
	ATOM	354	CA	THR	A	364	43.032	25.177	-14.615	1.00	23.63		C
	ANISOU	354	CA	THR	A	364	2449	2733	3796	-93	-534	-443	C
	ATOM	355	CB	THR	A	364	43.500	26.176	-13.539	1.00	25.43		C
	ANISOU	355	CB	THR	A	364	2624	2968	4069	-171	-580	-577	C
	ATOM	356	OG1	THR	A	364	44.450	27.087	-14.102	1.00	29.67		O
15	ANISOU	356	OG1	THR	A	364	3054	3489	4730	-281	-554	-601	O
	ATOM	357	CG2	THR	A	364	44.117	25.466	-12.315	1.00	24.74		C
	ANISOU	357	CG2	THR	A	364	2509	3025	3866	-111	-682	-657	C
	ATOM	358	C	THR	A	364	42.480	25.903	-15.855	1.00	23.68		C
20	ANISOU	358	C	THR	A	364	2479	2620	3896	-148	-448	-357	C
	ATOM	359	O	THR	A	364	43.224	26.192	-16.803	1.00	23.87		O
	ANISOU	359	O	THR	A	364	2436	2655	3980	-201	-406	-313	O
	ATOM	360	N	MSE	A	365	41.172	26.145	-15.860	1.00	22.96		N
	ANISOU	360	N	MSE	A	365	2483	2430	3811	-130	-423	-327	N
	ATOM	361	CA	MSE	A	365	40.493	26.940	-16.879	1.00	23.90		C
25	ANISOU	361	CA	MSE	A	365	2637	2429	4017	-165	-361	-246	C
	ATOM	362	CB	MSE	A	365	39.333	26.162	-17.525	1.00	22.98		C
	ANISOU	362	CB	MSE	A	365	2597	2301	3833	-88	-343	-155	C
	ATOM	363	CG	MSE	A	365	39.696	24.837	-18.242	1.00	23.11		C
30	ANISOU	363	CG	MSE	A	365	2611	2416	3753	-32	-341	-95	C
	ATOM	364	SE	MSE	A	365	38.160	23.718	-18.667	0.90	26.48		SE
	ANISOU	364	SE	MSE	A	365	3137	2833	4091	49	-336	-31	SE
	ATOM	365	CE	MSE	A	365	37.026	25.011	-19.510	1.00	21.85		C
	ANISOU	365	CE	MSE	A	365	2574	2128	3599	18	-301	38	C
	ATOM	366	C	MSE	A	365	39.916	28.149	-16.156	1.00	23.45		C
35	ANISOU	366	C	MSE	A	365	2605	2254	4051	-209	-361	-322	C
	ATOM	367	O	MSE	A	365	39.223	27.994	-15.148	1.00	23.44		O
	ANISOU	367	O	MSE	A	365	2645	2258	4002	-167	-386	-396	O
	ATOM	368	N	VAL	A	366	40.215	29.346	-16.654	1.00	23.42		N
40	ANISOU	368	N	VAL	A	366	2581	2139	4177	-293	-326	-306	N
	ATOM	369	CA	VAL	A	366	39.691	30.586	-16.090	1.00	23.54		C
	ANISOU	369	CA	VAL	A	366	2629	2009	4308	-331	-319	-382	C
	ATOM	370	CB	VAL	A	366	40.833	31.452	-15.443	1.00	25.39		C
	ANISOU	370	CB	VAL	A	366	2793	2224	4631	-448	-336	-505	C
	ATOM	371	CG1	VAL	A	366	40.312	32.803	-14.943	1.00	25.44		C
45	ANISOU	371	CG1	VAL	A	366	2842	2047	4776	-492	-323	-594	C
	ATOM	372	CG2	VAL	A	366	41.533	30.678	-14.298	1.00	25.91		C
	ANISOU	372	CG2	VAL	A	366	2801	2461	4582	-433	-406	-628	C
	ATOM	373	C	VAL	A	366	38.916	31.393	-17.163	1.00	24.02		C
50	ANISOU	373	C	VAL	A	366	2745	1911	4469	-329	-270	-260	C
	ATOM	374	O	VAL	A	366	39.498	31.895	-18.140	1.00	24.09		O
	ANISOU	374	O	VAL	A	366	2741	1868	4545	-398	-232	-164	O
	ATOM	375	N	GLY	A	367	37.609	31.524	-16.962	1.00	23.61		N
	ANISOU	375	N	GLY	A	367	2753	1792	4425	-248	-271	-262	N
	ATOM	376	CA	GLY	A	367	36.782	32.410	-17.779	1.00	25.53		C
55	ANISOU	376	CA	GLY	A	367	3047	1876	4776	-223	-244	-164	C
	ATOM	377	C	GLY	A	367	36.277	33.660	-17.044	1.00	27.40		C
	ANISOU	377	C	GLY	A	367	3313	1940	5157	-225	-240	-269	C
	ATOM	378	O	GLY	A	367	36.620	33.896	-15.876	1.00	28.05		O
60	ANISOU	378	O	GLY	A	367	3375	2032	5251	-261	-254	-435	O
	ATOM	379	N	LYS	A	368	35.459	34.461	-17.728	1.00	28.02		N
	ANISOU	379	N	LYS	A	368	3442	1863	5342	-177	-225	-178	N
	ATOM	380	CA	LYS	A	368	34.815	35.621	-17.111	1.00	30.01		C
	ANISOU	380	CA	LYS	A	368	3727	1931	5744	-146	-219	-276	C
	ATOM	381	CB	LYS	A	368	34.065	36.473	-18.152	1.00	31.76		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	381	CB	LYS	A	368	4007	1974	6086	-83	-211	-125	C
	ATOM	382	CG	LYS	A	368	34.947	37.212	-19.147	1.00	36.76		C
	ANISOU	382	CG	LYS	A	368	4677	2481	6808	-185	-185	20	C
	ATOM	383	CD	LYS	A	368	34.052	37.959	-20.123	1.00	43.28		C
5	ANISOU	383	CD	LYS	A	368	5574	3141	7729	-94	-190	186	C
	ATOM	384	CE	LYS	A	368	34.692	38.098	-21.504	1.00	48.10		C
	ANISOU	384	CE	LYS	A	368	6224	3733	8319	-165	-165	410	C
	ATOM	385	NZ	LYS	A	368	33.990	39.150	-22.301	1.00	50.85		N
	ANISOU	385	NZ	LYS	A	368	6662	3864	8792	-92	-174	569	N
10	ATOM	386	C	LYS	A	368	33.837	35.243	-15.977	1.00	28.59		C
	ANISOU	386	C	LYS	A	368	3533	1823	5507	-54	-230	-427	C
	ATOM	387	O	LYS	A	368	33.803	35.912	-14.963	1.00	28.78		O
	ANISOU	387	O	LYS	A	368	3561	1774	5601	-66	-224	-594	O
	ATOM	388	N	ARG	A	369	33.047	34.184	-16.141	1.00	26.59		N
15	ANISOU	388	N	ARG	A	369	3264	1712	5126	28	-239	-377	N
	ATOM	389	CA	ARG	A	369	32.032	33.851	-15.117	1.00	25.86		C
	ANISOU	389	CA	ARG	A	369	3155	1690	4982	105	-231	-507	C
	ATOM	390	CB	ARG	A	369	30.615	34.105	-15.636	1.00	26.07		C
	ANISOU	390	CB	ARG	A	369	3177	1657	5072	225	-227	-447	C
20	ATOM	391	CG	ARG	A	369	30.370	35.495	-16.189	1.00	28.17		C
	ANISOU	391	CG	ARG	A	369	3477	1696	5532	264	-228	-403	C
	ATOM	392	CD	ARG	A	369	28.865	35.741	-16.363	1.00	30.60		C
	ANISOU	392	CD	ARG	A	369	3757	1968	5902	411	-232	-393	C
	ATOM	393	NE	ARG	A	369	28.465	36.887	-15.535	1.00	37.04		N
25	ANISOU	393	NE	ARG	A	369	4580	2621	6871	463	-207	-550	N
	ATOM	394	CZ	ARG	A	369	27.527	36.892	-14.591	1.00	37.12		C
	ANISOU	394	CZ	ARG	A	369	4542	2678	6882	543	-176	-709	C
	ATOM	395	NH1	ARG	A	369	26.793	35.818	-14.317	1.00	34.10		N
	ANISOU	395	NH1	ARG	A	369	4097	2499	6360	575	-163	-727	N
30	ATOM	396	NH2	ARG	A	369	27.296	38.024	-13.941	1.00	43.52		N
	ANISOU	396	NH2	ARG	A	369	5369	3322	7847	590	-151	-856	N
	ATOM	397	C	ARG	A	369	32.135	32.449	-14.526	1.00	23.85		C
	ANISOU	397	C	ARG	A	369	2878	1646	4537	96	-238	-539	C
	ATOM	398	O	ARG	A	369	31.300	32.046	-13.716	1.00	22.65		O
35	ANISOU	398	O	ARG	A	369	2714	1571	4319	145	-220	-626	O
	ATOM	399	N	ALA	A	370	33.158	31.705	-14.934	1.00	23.31		N
	ANISOU	399	N	ALA	A	370	2805	1669	4383	35	-258	-466	N
	ATOM	400	CA	ALA	A	370	33.390	30.376	-14.395	1.00	22.66		C
	ANISOU	400	CA	ALA	A	370	2715	1763	4132	32	-271	-485	C
40	ATOM	401	CB	ALA	A	370	32.551	29.299	-15.160	1.00	21.26		C
	ANISOU	401	CB	ALA	A	370	2543	1663	3872	89	-268	-369	C
	ATOM	402	C	ALA	A	370	34.875	30.034	-14.427	1.00	22.52		C
	ANISOU	402	C	ALA	A	370	2679	1811	4069	-42	-299	-476	C
	ATOM	403	O	ALA	A	370	35.619	30.550	-15.262	1.00	23.04		O
45	ANISOU	403	O	ALA	A	370	2730	1812	4213	-93	-297	-408	O
	ATOM	404	N	THR	A	371	35.290	29.169	-13.503	1.00	22.37		N
	ANISOU	404	N	THR	A	371	2656	1925	3920	-44	-324	-542	N
	ATOM	405	CA	THR	A	371	36.622	28.573	-13.512	1.00	22.86		C
	ANISOU	405	CA	THR	A	371	2686	2083	3918	-84	-362	-529	C
50	ATOM	406	CB	THR	A	371	37.577	29.196	-12.446	1.00	24.26		C
	ANISOU	406	CB	THR	A	371	2826	2283	4108	-147	-400	-676	C
	ATOM	407	OG1	THR	A	371	37.179	28.782	-11.144	1.00	27.06		O
	ANISOU	407	OG1	THR	A	371	3210	2727	4343	-114	-419	-776	O
	ATOM	408	CG2	THR	A	371	37.597	30.704	-12.518	1.00	22.87		C
55	ANISOU	408	CG2	THR	A	371	2640	1949	4099	-210	-377	-743	C
	ATOM	409	C	THR	A	371	36.510	27.054	-13.335	1.00	21.90		C
	ANISOU	409	C	THR	A	371	2588	2092	3640	-29	-380	-480	C
	ATOM	410	O	THR	A	371	35.451	26.546	-12.967	1.00	22.77		O
	ANISOU	410	O	THR	A	371	2742	2223	3688	15	-360	-478	O
60	ATOM	411	N	ALA	A	372	37.576	26.312	-13.616	1.00	21.17		N
	ANISOU	411	N	ALA	A	372	2467	2082	3493	-32	-413	-439	N
	ATOM	412	CA	ALA	A	372	37.495	24.865	-13.505	1.00	19.77		C
	ANISOU	412	CA	ALA	A	372	2327	1997	3186	28	-430	-386	C
	ATOM	413	CB	ALA	A	372	36.796	24.241	-14.737	1.00	18.33		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	413	CB	ALA	A	372	2174	1784	3006	59	-394	-271	C
	ATOM	414	C	ALA	A	372	38.835	24.237	-13.308	1.00	19.97		C
	ANISOU	414	C	ALA	A	372	2310	2121	3156	39	-484	-393	C
	ATOM	415	O	ALA	A	372	39.853	24.849	-13.608	1.00	20.79		O
5	ANISOU	415	O	ALA	A	372	2337	2231	3330	-8	-497	-419	O
	ATOM	416	N	ILE	A	373	38.816	23.010	-12.789	1.00	19.57		N
	ANISOU	416	N	ILE	A	373	2308	2144	2983	102	-514	-368	N
	ATOM	417	CA	ILE	A	373	39.963	22.112	-12.831	1.00	19.72		C
	ANISOU	417	CA	ILE	A	373	2295	2249	2948	151	-568	-345	C
10	ATOM	418	CB	ILE	A	373	40.416	21.607	-11.444	1.00	20.88		C
	ANISOU	418	CB	ILE	A	373	2464	2493	2978	193	-643	-394	C
	ATOM	419	CG1	ILE	A	373	40.502	22.762	-10.432	1.00	22.57		C
	ANISOU	419	CG1	ILE	A	373	2645	2729	3201	130	-667	-517	C
	ATOM	420	CD1	ILE	A	373	40.936	22.348	-8.989	1.00	22.21		C
15	ANISOU	420	CD1	ILE	A	373	2624	2805	3011	169	-752	-574	C
	ATOM	421	CG2	ILE	A	373	41.764	20.932	-11.585	1.00	18.66		C
	ANISOU	421	CG2	ILE	A	373	2115	2300	2676	252	-710	-381	C
	ATOM	422	C	ILE	A	373	39.645	20.919	-13.691	1.00	18.62		C
	ANISOU	422	C	ILE	A	373	2207	2092	2774	209	-544	-246	C
20	ATOM	423	O	ILE	A	373	38.635	20.253	-13.476	1.00	18.19		O
	ANISOU	423	O	ILE	A	373	2241	2007	2662	231	-522	-209	O
	ATOM	424	N	LEU	A	374	40.530	20.643	-14.656	1.00	18.68		N
	ANISOU	424	N	LEU	A	374	2154	2125	2818	229	-542	-216	N
	ATOM	425	CA	LEU	A	374	40.328	19.586	-15.652	1.00	16.99		C
25	ANISOU	425	CA	LEU	A	374	1981	1892	2582	281	-514	-144	C
	ATOM	426	CB	LEU	A	374	40.251	20.197	-17.064	1.00	15.29		C
	ANISOU	426	CB	LEU	A	374	1724	1644	2441	233	-453	-108	C
	ATOM	427	CG	LEU	A	374	40.219	19.251	-18.265	1.00	15.44		C
	ANISOU	427	CG	LEU	A	374	1766	1665	2434	277	-421	-57	C
30	ATOM	428	CD1	LEU	A	374	38.992	18.305	-18.302	1.00	14.91		C
	ANISOU	428	CD1	LEU	A	374	1810	1543	2313	303	-413	-24	C
	ATOM	429	CD2	LEU	A	374	40.303	20.021	-19.573	1.00	16.74		C
	ANISOU	429	CD2	LEU	A	374	1884	1827	2651	222	-365	-20	C
	ATOM	430	C	LEU	A	374	41.486	18.592	-15.607	1.00	17.53		C
35	ANISOU	430	C	LEU	A	374	2018	2033	2611	368	-562	-144	C
	ATOM	431	O	LEU	A	374	42.663	19.008	-15.663	1.00	18.31		O
	ANISOU	431	O	LEU	A	374	2004	2204	2748	365	-586	-185	O
	ATOM	432	N	ARG	A	375	41.161	17.302	-15.495	1.00	16.74		N
	ANISOU	432	N	ARG	A	375	2010	1906	2444	445	-575	-102	N
40	ATOM	433	CA	ARG	A	375	42.128	16.231	-15.749	1.00	17.32		C
	ANISOU	433	CA	ARG	A	375	2066	2016	2497	550	-609	-93	C
	ATOM	434	CB	ARG	A	375	42.224	15.233	-14.612	1.00	17.75		C
	ANISOU	434	CB	ARG	A	375	2205	2070	2469	639	-680	-69	C
	ATOM	435	CG	ARG	A	375	43.006	15.772	-13.443	1.00	18.20		C
45	ANISOU	435	CG	ARG	A	375	2196	2225	2493	651	-761	-113	C
	ATOM	436	CD	ARG	A	375	42.926	14.833	-12.281	1.00	20.67		C
	ANISOU	436	CD	ARG	A	375	2618	2538	2698	734	-831	-66	C
	ATOM	437	NE	ARG	A	375	43.721	15.319	-11.164	1.00	22.34		N
	ANISOU	437	NE	ARG	A	375	2762	2868	2856	753	-925	-115	N
50	ATOM	438	CZ	ARG	A	375	43.603	14.892	-9.911	1.00	24.36		C
	ANISOU	438	CZ	ARG	A	375	3108	3157	2992	799	-993	-83	C
	ATOM	439	NH1	ARG	A	375	42.718	13.955	-9.595	1.00	26.04		N
	ANISOU	439	NH1	ARG	A	375	3486	3280	3130	822	-967	10	N
	ATOM	440	NH2	ARG	A	375	44.383	15.409	-8.971	1.00	27.64		N
55	ANISOU	440	NH2	ARG	A	375	3448	3702	3353	812	-1089	-144	N
	ATOM	441	C	ARG	A	375	41.742	15.522	-17.009	1.00	17.19		C
	ANISOU	441	C	ARG	A	375	2092	1945	2495	569	-551	-62	C
	ATOM	442	O	ARG	A	375	40.566	15.227	-17.252	1.00	16.68		O
	ANISOU	442	O	ARG	A	375	2122	1802	2414	533	-514	-29	O
60	ATOM	443	N	LYS	A	376	42.743	15.264	-17.830	1.00	17.94		N
	ANISOU	443	N	LYS	A	376	2106	2093	2619	621	-540	-83	N
	ATOM	444	CA	LYS	A	376	42.484	14.748	-19.154	1.00	18.80		C
	ANISOU	444	CA	LYS	A	376	2238	2172	2732	630	-477	-75	C
	ATOM	445	CB	LYS	A	376	42.485	15.948	-20.089	1.00	19.04		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	445	CB	LYS	A	376	2186	2243	2804	530	-415	-73	C
	ATOM	446	CG	LYS	A	376	42.472	15.657	-21.514	1.00	22.12		C
	ANISOU	446	CG	LYS	A	376	2573	2649	3183	532	-351	-70	C
	ATOM	447	CD	LYS	A	376	43.216	16.738	-22.249	1.00	25.06		C
5	ANISOU	447	CD	LYS	A	376	2826	3105	3592	464	-298	-68	C
	ATOM	448	CE	LYS	A	376	43.015	16.490	-23.721	1.00	26.93		C
	ANISOU	448	CE	LYS	A	376	3079	3367	3787	456	-227	-54	C
	ATOM	449	NZ	LYS	A	376	43.691	15.264	-24.120	1.00	27.50		N
	ANISOU	449	NZ	LYS	A	376	3143	3478	3828	566	-218	-111	N
10	ATOM	450	C	LYS	A	376	43.569	13.729	-19.486	1.00	19.24		C
	ANISOU	450	C	LYS	A	376	2256	2266	2787	756	-493	-106	C
	ATOM	451	O	LYS	A	376	44.650	13.770	-18.915	1.00	20.06		O
	ANISOU	451	O	LYS	A	376	2269	2448	2907	818	-543	-135	O
	ATOM	452	N	ALA	A	377	43.257	12.766	-20.348	1.00	19.46		N
15	ANISOU	452	N	ALA	A	377	2354	2239	2799	802	-456	-112	N
	ATOM	453	CA	ALA	A	377	44.251	11.822	-20.856	1.00	20.59		C
	ANISOU	453	CA	ALA	A	377	2459	2411	2953	930	-454	-160	C
	ATOM	454	CB	ALA	A	377	44.120	10.473	-20.155	1.00	20.90		C
20	ANISOU	454	CB	ALA	A	377	2623	2340	2977	1047	-512	-144	C
	ATOM	455	C	ALA	A	377	44.003	11.728	-22.371	1.00	20.76		C
	ANISOU	455	C	ALA	A	377	2480	2447	2962	897	-367	-192	C
	ATOM	456	O	ALA	A	377	43.249	12.533	-22.902	1.00	20.64		O
	ANISOU	456	O	ALA	A	377	2473	2438	2933	780	-325	-163	O
	ATOM	457	N	THR	A	378	44.622	10.780	-23.061	1.00	22.11		N
25	ANISOU	457	N	THR	A	378	2642	2627	3133	1005	-342	-253	N
	ATOM	458	CA	THR	A	378	44.428	10.601	-24.505	1.00	22.78		C
	ANISOU	458	CA	THR	A	378	2731	2741	3183	981	-260	-299	C
	ATOM	459	CB	THR	A	378	45.231	9.415	-25.017	1.00	23.45		C
30	ANISOU	459	CB	THR	A	378	2808	2825	3277	1131	-241	-389	C
	ATOM	460	OG1	THR	A	378	46.575	9.539	-24.551	1.00	23.66		O
	ANISOU	460	OG1	THR	A	378	2689	2950	3349	1227	-263	-415	O
	ATOM	461	CG2	THR	A	378	45.203	9.355	-26.561	1.00	23.42		C
	ANISOU	461	CG2	THR	A	378	2787	2895	3216	1103	-145	-456	C
35	ATOM	462	C	THR	A	378	42.959	10.423	-24.902	1.00	22.92		C
	ANISOU	462	C	THR	A	378	2886	2662	3160	891	-249	-274	C
	ATOM	463	O	THR	A	378	42.361	9.373	-24.664	1.00	23.13		O
	ANISOU	463	O	THR	A	378	3038	2563	3187	929	-277	-288	O
	ATOM	464	N	ARG	A	379	42.395	11.464	-25.505	1.00	23.07		N
40	ANISOU	464	N	ARG	A	379	2878	2739	3150	770	-213	-235	N
	ATOM	465	CA	ARG	A	379	41.001	11.461	-25.957	1.00	23.17		C
	ANISOU	465	CA	ARG	A	379	2988	2693	3123	683	-211	-213	C
	ATOM	466	CB	ARG	A	379	40.838	10.623	-27.240	1.00	23.76		C
	ANISOU	466	CB	ARG	A	379	3108	2781	3137	707	-169	-291	C
	ATOM	467	CG	ARG	A	379	41.771	11.029	-28.390	1.00	23.77		C
45	ANISOU	467	CG	ARG	A	379	3011	2933	3089	720	-95	-325	C
	ATOM	468	CD	ARG	A	379	41.330	10.371	-29.694	1.00	25.40		C
	ANISOU	468	CD	ARG	A	379	3277	3169	3207	718	-57	-401	C
	ATOM	469	NE	ARG	A	379	40.022	10.902	-30.106	1.00	24.50		N
	ANISOU	469	NE	ARG	A	379	3216	3051	3041	606	-80	-347	N
50	ATOM	470	CZ	ARG	A	379	39.252	10.392	-31.059	1.00	24.10		C
	ANISOU	470	CZ	ARG	A	379	3232	3014	2911	577	-79	-404	C
	ATOM	471	NH1	ARG	A	379	39.641	9.323	-31.758	1.00	25.54		N
	ANISOU	471	NH1	ARG	A	379	3449	3204	3050	644	-47	-530	N
55	ATOM	472	NH2	ARG	A	379	38.099	10.974	-31.317	1.00	22.39		N
	ANISOU	472	NH2	ARG	A	379	3041	2808	2658	485	-115	-345	N
	ATOM	473	C	ARG	A	379	40.061	10.981	-24.854	1.00	23.18		C
	ANISOU	473	C	ARG	A	379	3094	2563	3150	668	-268	-182	C
	ATOM	474	O	ARG	A	379	39.189	10.137	-25.092	1.00	24.70		O
	ANISOU	474	O	ARG	A	379	3388	2671	3327	652	-272	-208	O
60	ATOM	475	N	ARG	A	380	40.242	11.534	-23.654	1.00	22.60		N
	ANISOU	475	N	ARG	A	380	2994	2481	3113	663	-306	-133	N
	ATOM	476	CA	ARG	A	380	39.482	11.149	-22.465	1.00	22.87		C
	ANISOU	476	CA	ARG	A	380	3120	2413	3156	648	-350	-96	C
	ATOM	477	CB	ARG	A	380	40.063	9.888	-21.829	1.00	23.67		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	477	CB	ARG	A	380	3291	2436	3267	763	-386	-109	C
	ATOM	478	CG	ARG	A	380	39.313	9.349	-20.612	1.00	25.57		C
	ANISOU	478	CG	ARG	A	380	3648	2566	3499	747	-421	-54	C
	ATOM	479	CD	ARG	A	380	40.092	8.171	-20.021	1.00	30.01		C
5	ANISOU	479	CD	ARG	A	380	4280	3051	4071	882	-464	-48	C
	ATOM	480	NE	ARG	A	380	39.887	8.025	-18.572	1.00	39.22		N
	ANISOU	480	NE	ARG	A	380	5520	4172	5211	888	-512	30	N
	ATOM	481	CZ	ARG	A	380	40.796	7.522	-17.733	1.00	40.49		C
	ANISOU	481	CZ	ARG	A	380	5699	4323	5363	1013	-577	62	C
10	ATOM	482	NH1	ARG	A	380	41.968	7.110	-18.193	1.00	43.42		N
	ANISOU	482	NH1	ARG	A	380	6006	4723	5768	1149	-600	15	N
	ATOM	483	NH2	ARG	A	380	40.537	7.434	-16.435	1.00	42.81		N
	ANISOU	483	NH2	ARG	A	380	6069	4590	5607	1008	-619	141	N
	ATOM	484	C	ARG	A	380	39.490	12.279	-21.455	1.00	21.00		C
15	ANISOU	484	C	ARG	A	380	2828	2214	2937	601	-375	-50	C
	ATOM	485	O	ARG	A	380	40.551	12.775	-21.067	1.00	20.79		O
	ANISOU	485	O	ARG	A	380	2713	2256	2929	638	-393	-57	O
	ATOM	486	N	LEU	A	381	38.288	12.705	-21.066	1.00	19.70		N
	ANISOU	486	N	LEU	A	381	2706	2009	2769	514	-373	-18	N
20	ATOM	487	CA	LEU	A	381	38.090	13.567	-19.904	1.00	18.41		C
	ANISOU	487	CA	LEU	A	381	2522	1857	2616	475	-396	9	C
	ATOM	488	CB	LEU	A	381	36.745	14.289	-19.985	1.00	16.88		C
	ANISOU	488	CB	LEU	A	381	2337	1645	2433	380	-372	26	C
	ATOM	489	CG	LEU	A	381	36.469	15.343	-18.928	1.00	17.01		C
25	ANISOU	489	CG	LEU	A	381	2323	1675	2467	338	-382	32	C
	ATOM	490	CD1	LEU	A	381	35.655	16.492	-19.499	1.00	12.78		C
	ANISOU	490	CD1	LEU	A	381	1738	1145	1973	273	-356	41	C
	ATOM	491	CD2	LEU	A	381	35.764	14.667	-17.749	1.00	15.08		C
	ANISOU	491	CD2	LEU	A	381	2164	1384	2181	330	-388	44	C
30	ATOM	492	C	LEU	A	381	38.123	12.638	-18.694	1.00	18.24		C
	ANISOU	492	C	LEU	A	381	2589	1780	2564	525	-433	27	C
	ATOM	493	O	LEU	A	381	37.296	11.748	-18.564	1.00	17.60		O
	ANISOU	493	O	LEU	A	381	2610	1616	2464	509	-422	44	O
	ATOM	494	N	VAL	A	382	39.085	12.854	-17.814	1.00	18.87		N
35	ANISOU	494	N	VAL	A	382	2628	1907	2635	580	-480	26	N
	ATOM	495	CA	VAL	A	382	39.212	12.031	-16.604	1.00	19.46		C
	ANISOU	495	CA	VAL	A	382	2791	1944	2660	640	-528	61	C
	ATOM	496	CB	VAL	A	382	40.671	11.956	-16.074	1.00	19.74		C
	ANISOU	496	CB	VAL	A	382	2760	2052	2688	749	-598	48	C
40	ATOM	497	CG1	VAL	A	382	40.736	11.203	-14.743	1.00	20.37		C
	ANISOU	497	CG1	VAL	A	382	2942	2102	2697	814	-661	104	C
	ATOM	498	CG2	VAL	A	382	41.561	11.303	-17.093	1.00	19.70		C
	ANISOU	498	CG2	VAL	A	382	2711	2051	2723	843	-593	16	C
	ATOM	499	C	VAL	A	382	38.274	12.584	-15.548	1.00	19.47		C
45	ANISOU	499	C	VAL	A	382	2832	1944	2622	558	-521	84	C
	ATOM	500	O	VAL	A	382	37.472	11.840	-14.971	1.00	19.89		O
	ANISOU	500	O	VAL	A	382	2999	1928	2631	538	-507	128	O
	ATOM	501	N	GLN	A	383	38.362	13.885	-15.307	1.00	18.92		N
	ANISOU	501	N	GLN	A	383	2671	1946	2571	507	-521	49	N
50	ATOM	502	CA	GLN	A	383	37.483	14.517	-14.335	1.00	20.00		C
	ANISOU	502	CA	GLN	A	383	2833	2091	2675	436	-506	46	C
	ATOM	503	CB	GLN	A	383	37.874	14.122	-12.908	1.00	21.18		C
	ANISOU	503	CB	GLN	A	383	3042	2275	2732	481	-560	66	C
	ATOM	504	CG	GLN	A	383	36.899	14.605	-11.894	1.00	28.38		C
55	ANISOU	504	CG	GLN	A	383	3993	3203	3587	409	-528	59	C
	ATOM	505	CD	GLN	A	383	36.981	13.887	-10.544	1.00	37.43		C
	ANISOU	505	CD	GLN	A	383	5244	4372	4605	445	-564	109	C
	ATOM	506	OE1	GLN	A	383	38.033	13.320	-10.146	1.00	36.64		O
	ANISOU	506	OE1	GLN	A	383	5163	4301	4457	540	-643	139	O
60	ATOM	507	NE2	GLN	A	383	35.848	13.911	-9.823	1.00	39.52		N
	ANISOU	507	NE2	GLN	A	383	5575	4633	4808	372	-503	122	N
	ATOM	508	C	GLN	A	383	37.476	16.041	-14.523	1.00	18.54		C
	ANISOU	508	C	GLN	A	383	2542	1952	2551	374	-491	-8	C
	ATOM	509	O	GLN	A	383	38.482	16.611	-14.934	1.00	18.67		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	509	O	GLN	A	383	2468	2013	2613	390	-513	-37	O
	ATOM	510	N	LEU	A	384	36.330	16.663	-14.252	1.00	16.78		N
	ANISOU	510	N	LEU	A	384	2330	1708	2337	305	-448	-21	N
	ATOM	511	CA	LEU	A	384	36.156	18.111	-14.349	1.00	16.11		C
5	ANISOU	511	CA	LEU	A	384	2165	1634	2321	254	-431	-70	C
	ATOM	512	CB	LEU	A	384	35.379	18.478	-15.633	1.00	14.20		C
	ANISOU	512	CB	LEU	A	384	1897	1346	2153	221	-387	-47	C
	ATOM	513	CG	LEU	A	384	35.100	19.947	-15.893	1.00	15.78		C
	ANISOU	513	CG	LEU	A	384	2031	1526	2439	180	-369	-75	C
10	ATOM	514	CD1	LEU	A	384	36.401	20.725	-16.207	1.00	10.81		C
	ANISOU	514	CD1	LEU	A	384	1330	915	1863	174	-391	-92	C
	ATOM	515	CD2	LEU	A	384	34.054	20.107	-16.999	1.00	14.91		C
	ANISOU	515	CD2	LEU	A	384	1914	1378	2373	164	-338	-36	C
	ATOM	516	C	LEU	A	384	35.367	18.584	-13.150	1.00	16.11		C
15	ANISOU	516	C	LEU	A	384	2191	1646	2283	219	-413	-111	C
	ATOM	517	O	LEU	A	384	34.264	18.059	-12.911	1.00	16.54		O
	ANISOU	517	O	LEU	A	384	2303	1680	2301	197	-371	-89	O
	ATOM	518	N	ILE	A	385	35.903	19.575	-12.422	1.00	16.23		N
	ANISOU	518	N	ILE	A	385	2159	1700	2309	206	-439	-182	N
20	ATOM	519	CA	ILE	A	385	35.136	20.337	-11.409	1.00	17.22		C
	ANISOU	519	CA	ILE	A	385	2291	1838	2415	170	-411	-252	C
	ATOM	520	CB	ILE	A	385	35.776	20.285	-9.974	1.00	19.18		C
	ANISOU	520	CB	ILE	A	385	2565	2173	2549	183	-460	-306	C
	ATOM	521	CG1	ILE	A	385	36.149	18.859	-9.636	1.00	21.06		C
25	ANISOU	521	CG1	ILE	A	385	2884	2446	2673	236	-496	-222	C
	ATOM	522	CD1	ILE	A	385	37.060	18.725	-8.443	1.00	25.03		C
	ANISOU	522	CD1	ILE	A	385	3405	3048	3060	273	-575	-251	C
	ATOM	523	CG2	ILE	A	385	34.780	20.792	-8.871	1.00	18.63		C
	ANISOU	523	CG2	ILE	A	385	2525	2131	2421	148	-410	-379	C
30	ATOM	524	C	ILE	A	385	35.022	21.812	-11.817	1.00	17.38		C
	ANISOU	524	C	ILE	A	385	2235	1809	2560	134	-392	-315	C
	ATOM	525	O	ILE	A	385	36.038	22.477	-12.052	1.00	16.35		O
	ANISOU	525	O	ILE	A	385	2047	1678	2489	122	-428	-346	O
35	ATOM	526	N	VAL	A	386	33.788	22.308	-11.888	1.00	17.59		N
	ANISOU	526	N	VAL	A	386	2260	1791	2632	116	-336	-334	N
	ATOM	527	CA	VAL	A	386	33.497	23.673	-12.328	1.00	17.46		C
	ANISOU	527	CA	VAL	A	386	2187	1700	2747	99	-317	-379	C
	ATOM	528	CB	VAL	A	386	32.501	23.721	-13.521	1.00	17.32		C
	ANISOU	528	CB	VAL	A	386	2153	1623	2805	111	-285	-308	C
40	ATOM	529	CG1	VAL	A	386	32.435	25.126	-14.121	1.00	14.48		C
	ANISOU	529	CG1	VAL	A	386	1746	1168	2586	108	-281	-322	C
	ATOM	530	CG2	VAL	A	386	32.875	22.722	-14.622	1.00	14.00		C
	ANISOU	530	CG2	VAL	A	386	1747	1216	2356	121	-303	-206	C
	ATOM	531	C	VAL	A	386	32.924	24.512	-11.181	1.00	19.48		C
45	ANISOU	531	C	VAL	A	386	2439	1958	3003	89	-289	-498	C
	ATOM	532	O	VAL	A	386	32.052	24.065	-10.400	1.00	19.17		O
	ANISOU	532	O	VAL	A	386	2432	1971	2882	93	-248	-524	O
	ATOM	533	N	SER	A	387	33.434	25.741	-11.087	1.00	20.06		N
	ANISOU	533	N	SER	A	387	2475	1975	3174	69	-304	-576	N
50	ATOM	534	CA	SER	A	387	32.894	26.762	-10.198	1.00	20.65		C
	ANISOU	534	CA	SER	A	387	2541	2021	3286	64	-273	-709	C
	ATOM	535	CB	SER	A	387	34.004	27.197	-9.236	1.00	21.25		C
	ANISOU	535	CB	SER	A	387	2612	2141	3321	26	-322	-822	C
	ATOM	536	OG	SER	A	387	33.536	28.081	-8.225	1.00	25.92		O
55	ANISOU	536	OG	SER	A	387	3205	2723	3922	20	-293	-979	O
	ATOM	537	C	SER	A	387	32.403	27.938	-11.076	1.00	20.74		C
	ANISOU	537	C	SER	A	387	2515	1887	3478	75	-250	-705	C
	ATOM	538	O	SER	A	387	33.153	28.448	-11.920	1.00	20.93		O
	ANISOU	538	O	SER	A	387	2521	1834	3597	50	-277	-654	O
60	ATOM	539	N	GLY	A	388	31.171	28.394	-10.876	1.00	20.37		N
	ANISOU	539	N	GLY	A	388	2457	1802	3480	115	-199	-755	N
	ATOM	540	CA	GLY	A	388	30.607	29.375	-11.771	1.00	20.03		C
	ANISOU	540	CA	GLY	A	388	2385	1621	3603	151	-188	-725	C
	ATOM	541	C	GLY	A	388	29.641	30.315	-11.094	1.00	21.29		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	541	C	GLY	A	388	2524	1722	3843	198	-142	-856	C
	ATOM	542	O	GLY	A	388	29.139	30.030	-10.008	1.00	20.82		O
	ANISOU	542	O	GLY	A	388	2464	1757	3689	204	-100	-961	O
	ATOM	543	N	LYS	A	389	29.391	31.447	-11.743	1.00	22.34		N
5	ANISOU	543	N	LYS	A	389	2643	1697	4149	235	-144	-847	N
	ATOM	544	CA	LYS	A	389	28.404	32.440	-11.252	1.00	23.74		C
	ANISOU	544	CA	LYS	A	389	2793	1788	4438	308	-101	-972	C
	ATOM	545	CB	LYS	A	389	28.635	33.761	-11.940	1.00	24.80		C
	ANISOU	545	CB	LYS	A	389	2942	1708	4771	330	-123	-951	C
10	ATOM	546	CG	LYS	A	389	29.884	34.437	-11.447	1.00	28.40		C
	ANISOU	546	CG	LYS	A	389	3437	2087	5267	239	-141	-1042	C
	ATOM	547	CD	LYS	A	389	30.035	35.791	-12.096	1.00	35.05		C
	ANISOU	547	CD	LYS	A	389	4306	2688	6324	250	-150	-1019	C
	ATOM	548	CE	LYS	A	389	31.177	36.562	-11.441	1.00	41.60		C
15	ANISOU	548	CE	LYS	A	389	5164	3432	7212	145	-160	-1153	C
	ATOM	549	NZ	LYS	A	389	31.822	37.562	-12.391	1.00	47.46		N
	ANISOU	549	NZ	LYS	A	389	5944	3955	8136	93	-174	-1054	N
	ATOM	550	C	LYS	A	389	26.964	32.018	-11.437	1.00	23.29		C
	ANISOU	550	C	LYS	A	389	2680	1796	4372	389	-64	-947	C
20	ATOM	551	O	LYS	A	389	26.103	32.459	-10.703	1.00	24.56		O
	ANISOU	551	O	LYS	A	389	2804	1962	4567	446	-11	-1079	O
	ATOM	552	N	ASP	A	390	26.725	31.102	-12.371	1.00	22.47		N
	ANISOU	552	N	ASP	A	390	2563	1759	4214	388	-89	-794	N
	ATOM	553	CA	ASP	A	390	25.370	30.703	-12.704	1.00	23.07		C
25	ANISOU	553	CA	ASP	A	390	2569	1900	4296	454	-66	-765	C
	ATOM	554	CB	ASP	A	390	24.663	31.853	-13.445	1.00	24.00		C
	ANISOU	554	CB	ASP	A	390	2644	1876	4601	562	-88	-743	C
	ATOM	555	CG	ASP	A	390	25.432	32.299	-14.704	1.00	24.13		C
	ANISOU	555	CG	ASP	A	390	2712	1766	4691	555	-157	-587	C
30	ATOM	556	OD1	ASP	A	390	25.404	31.534	-15.677	1.00	25.37		O
	ANISOU	556	OD1	ASP	A	390	2865	1991	4783	541	-195	-449	O
	ATOM	557	OD2	ASP	A	390	26.078	33.378	-14.716	1.00	18.12		O
	ANISOU	557	OD2	ASP	A	390	1997	842	4045	553	-168	-605	O
	ATOM	558	C	ASP	A	390	25.431	29.453	-13.563	1.00	21.82		C
35	ANISOU	558	C	ASP	A	390	2416	1838	4036	412	-98	-618	C
	ATOM	559	O	ASP	A	390	26.473	29.107	-14.095	1.00	21.61		O
	ANISOU	559	O	ASP	A	390	2445	1800	3967	359	-140	-529	O
	ATOM	560	N	GLU	A	391	24.289	28.816	-13.752	1.00	22.29		N
	ANISOU	560	N	GLU	A	391	2410	1991	4069	437	-77	-602	N
40	ATOM	561	CA	GLU	A	391	24.220	27.543	-14.442	1.00	21.52		C
	ANISOU	561	CA	GLU	A	391	2317	1987	3871	387	-99	-494	C
	ATOM	562	CB	GLU	A	391	22.839	26.928	-14.190	1.00	22.15		C
	ANISOU	562	CB	GLU	A	391	2309	2181	3927	393	-50	-536	C
	ATOM	563	CG	GLU	A	391	22.286	26.000	-15.243	1.00	24.99		C
45	ANISOU	563	CG	GLU	A	391	2632	2607	4255	372	-88	-439	C
	ATOM	564	CD	GLU	A	391	20.751	25.986	-15.206	1.00	33.67		C
	ANISOU	564	CD	GLU	A	391	3596	3789	5407	410	-56	-495	C
	ATOM	565	OE1	GLU	A	391	20.154	25.746	-14.111	1.00	34.20		O
	ANISOU	565	OE1	GLU	A	391	3622	3935	5438	379	35	-596	O
50	ATOM	566	OE2	GLU	A	391	20.138	26.247	-16.270	1.00	38.52		O
	ANISOU	566	OE2	GLU	A	391	4139	4401	6095	472	-121	-439	O
	ATOM	567	C	GLU	A	391	24.611	27.602	-15.922	1.00	20.48		C
	ANISOU	567	C	GLU	A	391	2204	1800	3778	403	-176	-352	C
	ATOM	568	O	GLU	A	391	25.229	26.686	-16.401	1.00	19.95		O
55	ANISOU	568	O	GLU	A	391	2183	1778	3619	346	-199	-277	O
	ATOM	569	N	GLN	A	392	24.288	28.689	-16.609	1.00	21.46		N
	ANISOU	569	N	GLN	A	392	2299	1824	4031	484	-212	-317	N
	ATOM	570	CA	GLN	A	392	24.666	28.910	-18.002	1.00	23.52		C
	ANISOU	570	CA	GLN	A	392	2587	2032	4318	502	-281	-172	C
60	ATOM	571	CB	GLN	A	392	23.926	30.147	-18.557	1.00	24.65		C
	ANISOU	571	CB	GLN	A	392	2688	2067	4610	617	-317	-138	C
	ATOM	572	CG	GLN	A	392	24.537	30.860	-19.769	1.00	28.63		C
	ANISOU	572	CG	GLN	A	392	3252	2461	5164	639	-376	13	C
	ATOM	573	CD	GLN	A	392	24.305	32.416	-19.753	1.00	30.83		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	573	CD	GLN	A	392	3540	2551	5624	735	-387	15	C
	ATOM	574	OE1	GLN	A	392	25.010	33.190	-19.035	1.00	34.80		O
	ANISOU	574	OE1	GLN	A	392	4092	2924	6205	705	-349	-58	O
	ATOM	575	NE2	GLN	A	392	23.321	32.867	-20.548	1.00	33.14		N
5	ANISOU	575	NE2	GLN	A	392	3784	2821	5985	853	-447	94	N
	ATOM	576	C	GLN	A	392	26.188	29.017	-18.189	1.00	22.62		C
	ANISOU	576	C	GLN	A	392	2561	1858	4175	433	-289	-120	C
	ATOM	577	O	GLN	A	392	26.726	28.443	-19.125	1.00	21.91		O
	ANISOU	577	O	GLN	A	392	2503	1807	4016	398	-319	-17	O
10	ATOM	578	N	SER	A	393	26.877	29.730	-17.295	1.00	22.81		N
	ANISOU	578	N	SER	A	393	2615	1801	4249	409	-260	-206	N
	ATOM	579	CA	SER	A	393	28.347	29.794	-17.315	1.00	21.99		C
	ANISOU	579	CA	SER	A	393	2570	1664	4121	331	-264	-183	C
	ATOM	580	CB	SER	A	393	28.857	30.874	-16.346	1.00	23.44		C
15	ANISOU	580	CB	SER	A	393	2770	1738	4397	313	-242	-300	C
	ATOM	581	OG	SER	A	393	28.140	32.078	-16.569	1.00	25.29		O
	ANISOU	581	OG	SER	A	393	2992	1830	4786	390	-243	-305	O
	ATOM	582	C	SER	A	393	29.011	28.464	-16.993	1.00	20.66		C
	ANISOU	582	C	SER	A	393	2422	1626	3801	265	-259	-189	C
20	ATOM	583	O	SER	A	393	30.049	28.132	-17.552	1.00	19.87		O
	ANISOU	583	O	SER	A	393	2350	1542	3659	219	-276	-122	O
	ATOM	584	N	ILE	A	394	28.422	27.713	-16.073	1.00	20.77		N
	ANISOU	584	N	ILE	A	394	2422	1732	3737	263	-230	-268	N
	ATOM	585	CA	ILE	A	394	28.889	26.369	-15.747	1.00	19.11		C
25	ANISOU	585	CA	ILE	A	394	2244	1630	3386	214	-227	-260	C
	ATOM	586	CB	ILE	A	394	28.139	25.782	-14.497	1.00	19.85		C
	ANISOU	586	CB	ILE	A	394	2333	1806	3402	206	-179	-352	C
	ATOM	587	CG1	ILE	A	394	28.509	26.606	-13.259	1.00	20.43		C
	ANISOU	587	CG1	ILE	A	394	2415	1856	3490	201	-158	-477	C
30	ATOM	588	CD1	ILE	A	394	27.499	26.518	-12.109	1.00	22.75		C
	ANISOU	588	CD1	ILE	A	394	2688	2218	3738	210	-93	-583	C
	ATOM	589	CG2	ILE	A	394	28.435	24.278	-14.274	1.00	15.59		C
	ANISOU	589	CG2	ILE	A	394	1843	1358	2723	163	-177	-313	C
	ATOM	590	C	ILE	A	394	28.784	25.474	-16.977	1.00	18.68		C
35	ANISOU	590	C	ILE	A	394	2195	1619	3284	212	-254	-148	C
	ATOM	591	O	ILE	A	394	29.760	24.825	-17.311	1.00	17.57		O
	ANISOU	591	O	ILE	A	394	2090	1507	3080	182	-270	-104	O
	ATOM	592	N	ALA	A	395	27.630	25.500	-17.663	1.00	19.22		N
	ANISOU	592	N	ALA	A	395	2220	1695	3386	250	-262	-113	N
40	ATOM	593	CA	ALA	A	395	27.401	24.738	-18.901	1.00	19.01		C
	ANISOU	593	CA	ALA	A	395	2194	1718	3313	248	-295	-23	C
	ATOM	594	CB	ALA	A	395	25.980	24.956	-19.419	1.00	18.56		C
	ANISOU	594	CB	ALA	A	395	2065	1683	3305	297	-314	-13	C
	ATOM	595	C	ALA	A	395	28.416	25.074	-19.990	1.00	19.20		C
45	ANISOU	595	C	ALA	A	395	2250	1706	3340	245	-327	70	C
	ATOM	596	O	ALA	A	395	28.898	24.171	-20.671	1.00	18.93		O
	ANISOU	596	O	ALA	A	395	2244	1727	3223	220	-339	115	O
	ATOM	597	N	GLU	A	396	28.719	26.364	-20.157	1.00	20.22		N
	ANISOU	597	N	GLU	A	396	2377	1739	3567	267	-332	96	N
50	ATOM	598	CA	GLU	A	396	29.710	26.818	-21.142	1.00	21.09		C
	ANISOU	598	CA	GLU	A	396	2517	1810	3684	247	-345	193	C
	ATOM	599	CB	GLU	A	396	29.807	28.341	-21.147	1.00	22.89		C
	ANISOU	599	CB	GLU	A	396	2749	1899	4047	266	-343	216	C
	ATOM	600	CG	GLU	A	396	28.607	29.009	-21.787	1.00	27.44		C
55	ANISOU	600	CG	GLU	A	396	3306	2429	4693	349	-378	278	C
	ATOM	601	CD	GLU	A	396	28.571	30.513	-21.606	1.00	31.59		C
	ANISOU	601	CD	GLU	A	396	3844	2785	5373	385	-375	287	C
	ATOM	602	OE1	GLU	A	396	29.466	31.075	-20.945	1.00	37.15		O
	ANISOU	602	OE1	GLU	A	396	4573	3406	6136	328	-342	230	O
60	ATOM	603	OE2	GLU	A	396	27.632	31.141	-22.145	1.00	34.90		O
	ANISOU	603	OE2	GLU	A	396	4250	3151	5862	473	-412	349	O
	ATOM	604	C	GLU	A	396	31.090	26.181	-20.894	1.00	19.62		C
	ANISOU	604	C	GLU	A	396	2357	1667	3430	186	-325	174	C
	ATOM	605	O	GLU	A	396	31.755	25.774	-21.820	1.00	19.19		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	605	O	GLU	A	396	2317	1657	3319	166	-327	242	O
	ATOM	606	N	ALA	A	397	31.480	26.093	-19.631	1.00	18.63		N
	ANISOU	606	N	ALA	A	397	2231	1543	3306	164	-309	75	N
	ATOM	607	CA	ALA	A	397	32.722	25.456	-19.210	1.00	18.01		C
5	ANISOU	607	CA	ALA	A	397	2163	1517	3164	125	-305	44	C
	ATOM	608	CB	ALA	A	397	32.994	25.795	-17.741	1.00	17.36		C
	ANISOU	608	CB	ALA	A	397	2076	1422	3099	108	-300	-69	C
	ATOM	609	C	ALA	A	397	32.768	23.936	-19.457	1.00	16.96		C
10	ANISOU	609	C	ALA	A	397	2052	1477	2914	133	-311	60	C
	ATOM	610	O	ALA	A	397	33.775	23.398	-19.924	1.00	17.05		O
	ANISOU	610	O	ALA	A	397	2067	1532	2880	123	-313	85	O
	ATOM	611	N	ILE	A	398	31.668	23.250	-19.152	1.00	17.13		N
	ANISOU	611	N	ILE	A	398	2086	1526	2898	151	-309	38	N
	ATOM	612	CA	ILE	A	398	31.536	21.827	-19.422	1.00	15.91		C
15	ANISOU	612	CA	ILE	A	398	1963	1430	2651	150	-312	51	C
	ATOM	613	CB	ILE	A	398	30.199	21.264	-18.834	1.00	17.18		C
	ANISOU	613	CB	ILE	A	398	2128	1608	2792	144	-297	15	C
	ATOM	614	CG1	ILE	A	398	30.119	21.527	-17.326	1.00	16.13		C
20	ANISOU	614	CG1	ILE	A	398	2000	1471	2657	136	-271	-57	C
	ATOM	615	CD1	ILE	A	398	28.779	21.236	-16.716	1.00	16.58		C
	ANISOU	615	CD1	ILE	A	398	2043	1553	2705	121	-235	-95	C
	ATOM	616	CG2	ILE	A	398	30.022	19.747	-19.155	1.00	13.67		C
	ANISOU	616	CG2	ILE	A	398	1729	1199	2267	127	-297	27	C
	ATOM	617	C	ILE	A	398	31.671	21.562	-20.922	1.00	16.07		C
25	ANISOU	617	C	ILE	A	398	1985	1475	2647	156	-326	121	C
	ATOM	618	O	ILE	A	398	32.434	20.686	-21.326	1.00	16.26		O
	ANISOU	618	O	ILE	A	398	2034	1535	2609	157	-326	128	O
	ATOM	619	N	ILE	A	399	30.963	22.335	-21.741	1.00	16.42		N
30	ANISOU	619	N	ILE	A	399	2003	1502	2734	169	-339	169	N
	ATOM	620	CA	ILE	A	399	31.042	22.212	-23.210	1.00	16.68		C
	ANISOU	620	CA	ILE	A	399	2040	1574	2722	175	-356	243	C
	ATOM	621	CB	ILE	A	399	30.128	23.237	-23.951	1.00	17.23		C
	ANISOU	621	CB	ILE	A	399	2083	1621	2843	205	-385	310	C
	ATOM	622	CG1	ILE	A	399	28.652	22.926	-23.683	1.00	16.60		C
35	ANISOU	622	CG1	ILE	A	399	1968	1565	2776	225	-410	268	C
	ATOM	623	CD1	ILE	A	399	27.669	24.079	-24.032	1.00	17.54		C
	ANISOU	623	CD1	ILE	A	399	2040	1648	2976	281	-446	315	C
	ATOM	624	CG2	ILE	A	399	30.379	23.228	-25.492	1.00	18.27		C
40	ANISOU	624	CG2	ILE	A	399	2231	1807	2903	209	-404	401	C
	ATOM	625	C	ILE	A	399	32.467	22.321	-23.722	1.00	17.17		C
	ANISOU	625	C	ILE	A	399	2111	1650	2761	159	-335	277	C
	ATOM	626	O	ILE	A	399	32.926	21.437	-24.454	1.00	17.83		O
	ANISOU	626	O	ILE	A	399	2214	1798	2764	160	-329	282	O
	ATOM	627	N	VAL	A	400	33.152	23.398	-23.336	1.00	16.69		N
45	ANISOU	627	N	VAL	A	400	2033	1534	2776	141	-318	289	N
	ATOM	628	CA	VAL	A	400	34.542	23.641	-23.732	1.00	16.70		C
	ANISOU	628	CA	VAL	A	400	2020	1553	2773	109	-288	316	C
	ATOM	629	CB	VAL	A	400	35.026	25.034	-23.221	1.00	16.70		C
50	ANISOU	629	CB	VAL	A	400	1997	1463	2887	69	-273	321	C
	ATOM	630	CG1	VAL	A	400	36.523	25.234	-23.427	1.00	15.47		C
	ANISOU	630	CG1	VAL	A	400	1803	1337	2737	16	-236	327	C
	ATOM	631	CG2	VAL	A	400	34.216	26.116	-23.893	1.00	16.90		C
	ANISOU	631	CG2	VAL	A	400	2039	1410	2973	79	-281	410	C
	ATOM	632	C	VAL	A	400	35.510	22.529	-23.314	1.00	15.98		C
55	ANISOU	632	C	VAL	A	400	1922	1527	2623	114	-279	252	C
	ATOM	633	O	VAL	A	400	36.327	22.104	-24.112	1.00	17.42		O
	ANISOU	633	O	VAL	A	400	2094	1773	2753	112	-256	272	O
	ATOM	634	N	ALA	A	401	35.406	22.061	-22.079	1.00	16.30		N
	ANISOU	634	N	ALA	A	401	1971	1556	2666	128	-297	178	N
60	ATOM	635	CA	ALA	A	401	36.199	20.909	-21.593	1.00	16.28		C
	ANISOU	635	CA	ALA	A	401	1976	1604	2606	155	-305	128	C
	ATOM	636	CB	ALA	A	401	35.953	20.689	-20.091	1.00	14.87		C
	ANISOU	636	CB	ALA	A	401	1817	1404	2428	165	-328	68	C
	ATOM	637	C	ALA	A	401	35.896	19.628	-22.378	1.00	16.82		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	637	C	ALA	A	401	2088	1709	2596	188	-304	136	C
	ATOM	638	O	ALA	A	401	36.802	18.869	-22.684	1.00	18.03		O
	ANISOU	638	O	ALA	A	401	2236	1907	2709	218	-296	118	O
	ATOM	639	N	MSE	A	402	34.624	19.373	-22.681	1.00	17.03		N
5	ANISOU	639	N	MSE	A	402	2147	1717	2604	183	-313	147	N
	ATOM	640	CA	MSE	A	402	34.253	18.142	-23.412	1.00	17.44		C
	ANISOU	640	CA	MSE	A	402	2244	1796	2588	199	-316	135	C
	ATOM	641	CB	MSE	A	402	32.737	17.935	-23.431	1.00	16.42		C
10	ANISOU	641	CB	MSE	A	402	2133	1649	2458	176	-333	130	C
	ATOM	642	CG	MSE	A	402	32.140	17.462	-22.125	1.00	16.29		C
	ANISOU	642	CG	MSE	A	402	2144	1590	2456	163	-332	92	C
	ATOM	643	SE	MSE	A	402	30.183	17.395	-22.251	0.90	20.12		SE
	ANISOU	643	SE	MSE	A	402	2609	2079	2958	119	-340	80	SE
	ATOM	644	CE	MSE	A	402	29.774	16.578	-20.532	1.00	14.21		C
15	ANISOU	644	CE	MSE	A	402	1909	1287	2202	87	-307	39	C
	ATOM	645	C	MSE	A	402	34.797	18.137	-24.843	1.00	17.04		C
	ANISOU	645	C	MSE	A	402	2179	1807	2487	205	-298	163	C
	ATOM	646	O	MSE	A	402	35.297	17.114	-25.295	1.00	17.79		O
20	ANISOU	646	O	MSE	A	402	2299	1933	2528	233	-288	126	O
	ATOM	647	N	VAL	A	403	34.697	19.277	-25.541	1.00	17.61		N
	ANISOU	647	N	VAL	A	403	2220	1894	2576	182	-292	230	N
	ATOM	648	CA	VAL	A	403	35.335	19.465	-26.866	1.00	17.49		C
	ANISOU	648	CA	VAL	A	403	2194	1951	2500	177	-261	275	C
	ATOM	649	CB	VAL	A	403	34.977	20.843	-27.538	1.00	18.05		C
25	ANISOU	649	CB	VAL	A	403	2252	2014	2593	149	-261	380	C
	ATOM	650	CG1	VAL	A	403	35.759	21.042	-28.835	1.00	15.38		C
	ANISOU	650	CG1	VAL	A	403	1909	1761	2174	132	-215	441	C
	ATOM	651	CG2	VAL	A	403	33.475	20.963	-27.819	1.00	18.29		C
30	ANISOU	651	CG2	VAL	A	403	2302	2033	2616	162	-316	405	C
	ATOM	652	C	VAL	A	403	36.880	19.322	-26.774	1.00	18.33		C
	ANISOU	652	C	VAL	A	403	2259	2096	2607	184	-216	250	C
	ATOM	653	O	VAL	A	403	37.496	18.607	-27.563	1.00	18.16		O
	ANISOU	653	O	VAL	A	403	2238	2149	2515	207	-185	224	O
	ATOM	654	N	PHE	A	404	37.482	20.014	-25.804	1.00	18.22		N
35	ANISOU	654	N	PHE	A	404	2203	2042	2676	166	-213	246	N
	ATOM	655	CA	PHE	A	404	38.935	20.002	-25.606	1.00	18.45		C
	ANISOU	655	CA	PHE	A	404	2167	2120	2724	167	-180	215	C
	ATOM	656	CB	PHE	A	404	39.279	20.946	-24.451	1.00	18.40		C
40	ANISOU	656	CB	PHE	A	404	2118	2060	2815	130	-197	203	C
	ATOM	657	CG	PHE	A	404	40.743	21.047	-24.167	1.00	16.27		C
	ANISOU	657	CG	PHE	A	404	1758	1850	2576	119	-176	163	C
	ATOM	658	CD1	PHE	A	404	41.538	21.926	-24.884	1.00	17.08		C
	ANISOU	658	CD1	PHE	A	404	1794	1990	2708	49	-116	207	C
	ATOM	659	CE1	PHE	A	404	42.921	22.016	-24.616	1.00	21.24		C
45	ANISOU	659	CE1	PHE	A	404	2210	2589	3271	29	-94	157	C
	ATOM	660	CZ	PHE	A	404	43.501	21.222	-23.619	1.00	19.15		C
	ANISOU	660	CZ	PHE	A	404	1905	2364	3009	98	-148	68	C
	ATOM	661	CE2	PHE	A	404	42.718	20.351	-22.893	1.00	18.17		C
50	ANISOU	661	CE2	PHE	A	404	1866	2192	2846	176	-211	40	C
	ATOM	662	CD2	PHE	A	404	41.325	20.260	-23.180	1.00	17.63		C
	ANISOU	662	CD2	PHE	A	404	1906	2047	2745	177	-217	86	C
	ATOM	663	C	PHE	A	404	39.518	18.593	-25.332	1.00	18.68		C
	ANISOU	663	C	PHE	A	404	2200	2187	2710	241	-190	135	C
	ATOM	664	O	PHE	A	404	40.673	18.296	-25.683	1.00	18.92		O
55	ANISOU	664	O	PHE	A	404	2170	2292	2727	266	-154	105	O
	ATOM	665	N	SER	A	405	38.712	17.745	-24.692	1.00	18.21		N
	ANISOU	665	N	SER	A	405	2210	2070	2638	277	-233	102	N
	ATOM	666	CA	SER	A	405	39.091	16.363	-24.380	1.00	18.68		C
	ANISOU	666	CA	SER	A	405	2304	2127	2668	352	-249	41	C
60	ATOM	667	CB	SER	A	405	38.012	15.723	-23.496	1.00	18.57		C
	ANISOU	667	CB	SER	A	405	2375	2027	2653	356	-290	32	C
	ATOM	668	OG	SER	A	405	36.849	15.381	-24.246	1.00	16.66		O
	ANISOU	668	OG	SER	A	405	2188	1765	2376	326	-287	37	O
	ATOM	669	C	SER	A	405	39.340	15.491	-25.619	1.00	20.09		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	669	C	SER	A	405	2498	2356	2779	391	-214	8	C
	ATOM	670	O	SER	A	405	40.066	14.496	-25.533	1.00	21.25		O
	ANISOU	670	O	SER	A	405	2648	2509	2916	468	-213	-50	O
	ATOM	671	N	GLN	A	406	38.723	15.866	-26.758	1.00	20.26		N
5	ANISOU	671	N	GLN	A	406	2533	2414	2751	345	-190	41	N
	ATOM	672	CA	GLN	A	406	38.832	15.162	-28.048	1.00	20.05		C
	ANISOU	672	CA	GLN	A	406	2527	2454	2636	368	-155	2	C
	ATOM	673	CB	GLN	A	406	40.290	15.095	-28.531	1.00	19.99		C
	ANISOU	673	CB	GLN	A	406	2441	2542	2612	409	-93	-31	C
10	ATOM	674	CG	GLN	A	406	40.906	16.472	-28.726	1.00	20.76		C
	ANISOU	674	CG	GLN	A	406	2452	2702	2734	342	-49	46	C
	ATOM	675	CD	GLN	A	406	42.332	16.414	-29.196	1.00	20.39		C
	ANISOU	675	CD	GLN	A	406	2306	2766	2674	366	24	9	C
	ATOM	676	OE1	GLN	A	406	43.147	15.693	-28.645	1.00	19.25		O
15	ANISOU	676	OE1	GLN	A	406	2117	2630	2566	444	17	-66	O
	ATOM	677	NE2	GLN	A	406	42.640	17.179	-30.233	1.00	22.01		N
	ANISOU	677	NE2	GLN	A	406	2474	3065	2824	301	97	68	N
	ATOM	678	C	GLN	A	406	38.164	13.777	-28.045	1.00	20.64		C
	ANISOU	678	C	GLN	A	406	2691	2466	2684	406	-184	-74	C
20	ATOM	679	O	GLN	A	406	38.465	12.937	-28.887	1.00	22.16		O
	ANISOU	679	O	GLN	A	406	2906	2696	2817	445	-157	-144	O
	ATOM	680	N	GLU	A	407	37.248	13.554	-27.111	1.00	20.37		N
	ANISOU	680	N	GLU	A	407	2710	2337	2695	385	-231	-65	N
	ATOM	681	CA	GLU	A	407	36.556	12.268	-26.951	1.00	21.29		C
25	ANISOU	681	CA	GLU	A	407	2916	2369	2805	396	-254	-125	C
	ATOM	682	CB	GLU	A	407	35.638	12.293	-25.718	1.00	19.97		C
	ANISOU	682	CB	GLU	A	407	2786	2110	2691	355	-289	-92	C
	ATOM	683	CG	GLU	A	407	36.371	12.188	-24.373	1.00	21.49		C
	ANISOU	683	CG	GLU	A	407	2982	2253	2931	404	-301	-73	C
30	ATOM	684	CD	GLU	A	407	35.649	11.292	-23.352	1.00	21.16		C
	ANISOU	684	CD	GLU	A	407	3033	2101	2906	391	-321	-72	C
	ATOM	685	OE1	GLU	A	407	34.688	10.585	-23.711	1.00	21.26		O
	ANISOU	685	OE1	GLU	A	407	3107	2062	2909	342	-319	-101	O
	ATOM	686	OE2	GLU	A	407	36.071	11.267	-22.189	1.00	20.34		O
35	ANISOU	686	OE2	GLU	A	407	2943	1965	2820	424	-339	-43	O
	ATOM	687	C	GLU	A	407	35.725	11.866	-28.158	1.00	22.08		C
	ANISOU	687	C	GLU	A	407	3052	2504	2835	357	-256	-169	C
	ATOM	688	O	GLU	A	407	35.066	12.694	-28.765	1.00	20.70		O
	ANISOU	688	O	GLU	A	407	2846	2394	2624	304	-267	-123	O
40	ATOM	689	N	ASP	A	408	35.720	10.573	-28.461	1.00	23.34		N
	ANISOU	689	N	ASP	A	408	3280	2611	2976	386	-253	-261	N
	ATOM	690	CA	ASP	A	408	34.928	10.035	-29.544	1.00	24.61		C
	ANISOU	690	CA	ASP	A	408	3481	2801	3068	344	-263	-332	C
	ATOM	691	CB	ASP	A	408	35.160	8.530	-29.658	1.00	25.59		C
45	ANISOU	691	CB	ASP	A	408	3692	2830	3202	388	-253	-449	C
	ATOM	692	CG	ASP	A	408	34.396	7.913	-30.801	1.00	27.72		C
	ANISOU	692	CG	ASP	A	408	4003	3131	3397	336	-265	-551	C
	ATOM	693	OD1	ASP	A	408	34.710	8.279	-31.958	1.00	31.59		O
	ANISOU	693	OD1	ASP	A	408	4457	3762	3786	347	-246	-579	O
50	ATOM	694	OD2	ASP	A	408	33.492	7.066	-30.549	1.00	28.73		O
	ANISOU	694	OD2	ASP	A	408	4201	3151	3564	276	-293	-607	O
	ATOM	695	C	ASP	A	408	33.427	10.347	-29.389	1.00	24.65		C
	ANISOU	695	C	ASP	A	408	3488	2793	3084	249	-310	-301	C
	ATOM	696	O	ASP	A	408	32.784	10.796	-30.342	1.00	24.93		O
55	ANISOU	696	O	ASP	A	408	3495	2927	3051	207	-333	-299	O
	ATOM	697	N	ACYS	A	409	32.869	10.126	-28.205	0.70	24.72		N
	ANISOU	697	N	ACYS	A	409	3524	2697	3172	218	-325	-276	N
	ATOM	698	N	BCYS	A	409	32.906	10.105	-28.182	0.30	24.11		N
	ANISOU	698	N	BCYS	A	409	3448	2617	3096	220	-324	-276	N
60	ATOM	699	CA	ACYS	A	409	31.430	10.317	-28.021	0.70	25.22		C
	ANISOU	699	CA	ACYS	A	409	3572	2756	3254	128	-359	-264	C
	ATOM	700	CA	BCYS	A	409	31.506	10.359	-27.816	0.30	23.92		C
	ANISOU	700	CA	BCYS	A	409	3408	2580	3101	132	-355	-254	C
	ATOM	701	CB	ACYS	A	409	30.961	9.730	-26.681	0.70	25.40		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	701	CB	ACYS	A	409	3644	2652	3353	91	-351	-253	C
	ATOM	702	CB	BCYS	A	409	31.313	10.176	-26.307	0.30	23.45		C
	ANISOU	702	CB	BCYS	A	409	3378	2413	3118	117	-345	-213	C
	ATOM	703	SG	ACYS	A	409	31.124	10.858	-25.325	0.70	28.09		S
5	ANISOU	703	SG	ACYS	A	409	3936	2990	3746	108	-341	-150	S
	ATOM	704	SG	BCYS	A	409	31.533	8.502	-25.712	0.30	24.62		S
	ANISOU	704	SG	BCYS	A	409	3655	2400	3300	125	-326	-269	S
	ATOM	705	C	ACYS	A	409	31.016	11.792	-28.173	0.70	23.86		C
	ANISOU	705	C	ACYS	A	409	3310	2680	3076	114	-379	-177	C
10	ATOM	706	C	BCYS	A	409	31.060	11.762	-28.191	0.30	23.24		C
	ANISOU	706	C	BCYS	A	409	3233	2600	2995	116	-378	-179	C
	ATOM	707	O	ACYS	A	409	29.841	12.089	-28.420	0.70	23.73		O
	ANISOU	707	O	ACYS	A	409	3255	2703	3058	58	-417	-174	O
	ATOM	708	O	BCYS	A	409	29.914	11.985	-28.591	0.30	23.42		O
15	ANISOU	708	O	BCYS	A	409	3222	2670	3007	61	-417	-184	O
	ATOM	709	N	MSE	A	410	31.991	12.696	-28.033	1.00	22.71		N
	ANISOU	709	N	MSE	A	410	3128	2566	2936	166	-357	-110	N
	ATOM	710	CA	MSE	A	410	31.811	14.092	-28.382	1.00	21.64		C
20	ANISOU	710	CA	MSE	A	410	2925	2503	2796	162	-370	-25	C
	ATOM	711	CB	MSE	A	410	32.941	14.929	-27.770	1.00	21.38		C
	ANISOU	711	CB	MSE	A	410	2860	2456	2807	198	-336	34	C
	ATOM	712	CG	MSE	A	410	32.895	16.431	-28.071	1.00	19.41		C
	ANISOU	712	CG	MSE	A	410	2554	2246	2573	190	-339	129	C
	ATOM	713	SE	MSE	A	410	33.826	17.055	-29.687	0.90	23.28		SE
25	ANISOU	713	SE	MSE	A	410	3027	2856	2961	199	-303	190	SE
	ATOM	714	CE	MSE	A	410	35.627	16.334	-29.341	1.00	17.42		C
	ANISOU	714	CE	MSE	A	410	2275	2120	2226	242	-234	125	C
	ATOM	715	C	MSE	A	410	31.762	14.285	-29.903	1.00	22.99		C
30	ANISOU	715	C	MSE	A	410	3085	2788	2861	162	-383	-21	C
	ATOM	716	O	MSE	A	410	30.839	14.974	-30.405	1.00	23.49		O
	ANISOU	716	O	MSE	A	410	3115	2908	2904	140	-429	26	O
	ATOM	717	N	ILE	A	411	32.750	13.711	-30.616	1.00	22.18		N
	ANISOU	717	N	ILE	A	411	3009	2728	2689	195	-345	-69	N
	ATOM	718	CA	ILE	A	411	32.822	13.744	-32.071	1.00	23.23		C
35	ANISOU	718	CA	ILE	A	411	3145	2987	2693	196	-344	-80	C
	ATOM	719	CB	ILE	A	411	34.201	13.201	-32.577	1.00	24.59		C
	ANISOU	719	CB	ILE	A	411	3332	3203	2809	246	-273	-138	C
	ATOM	720	CG1	ILE	A	411	35.271	14.295	-32.388	1.00	26.32		C
40	ANISOU	720	CG1	ILE	A	411	3493	3453	3056	263	-219	-38	C
	ATOM	721	CD1	ILE	A	411	36.666	13.790	-32.234	1.00	28.71		C
	ANISOU	721	CD1	ILE	A	411	3775	3761	3371	318	-151	-95	C
	ATOM	722	CG2	ILE	A	411	34.171	12.852	-34.050	1.00	25.93		C
	ANISOU	722	CG2	ILE	A	411	3524	3504	2824	243	-266	-195	C
	ATOM	723	C	ILE	A	411	31.610	13.049	-32.705	1.00	23.32		C
45	ANISOU	723	C	ILE	A	411	3181	3033	2646	153	-406	-158	C
	ATOM	724	O	ILE	A	411	31.080	13.526	-33.698	1.00	23.80		O
	ANISOU	724	O	ILE	A	411	3225	3207	2611	139	-447	-126	O
	ATOM	725	N	LYS	A	412	31.150	11.948	-32.095	1.00	22.39		N
50	ANISOU	725	N	LYS	A	412	3103	2816	2587	126	-417	-254	N
	ATOM	726	CA	LYS	A	412	30.008	11.189	-32.619	1.00	22.44		C
	ANISOU	726	CA	LYS	A	412	3126	2844	2557	64	-473	-349	C
	ATOM	727	CB	LYS	A	412	30.065	9.720	-32.145	1.00	22.70		C
	ANISOU	727	CB	LYS	A	412	3236	2744	2644	43	-450	-472	C
	ATOM	728	CG	LYS	A	412	31.201	8.920	-32.768	1.00	22.92		C
55	ANISOU	728	CG	LYS	A	412	3324	2769	2614	105	-401	-564	C
	ATOM	729	CD	LYS	A	412	31.025	8.761	-34.293	1.00	21.99		C
	ANISOU	729	CD	LYS	A	412	3210	2800	2346	92	-424	-649	C
	ATOM	730	CE	LYS	A	412	32.028	7.811	-34.909	1.00	25.65		C
	ANISOU	730	CE	LYS	A	412	3734	3256	2754	152	-367	-778	C
60	ATOM	731	NZ	LYS	A	412	33.428	8.304	-34.688	1.00	27.17		N
	ANISOU	731	NZ	LYS	A	412	3899	3468	2955	246	-293	-708	N
	ATOM	732	C	LYS	A	412	28.666	11.875	-32.299	1.00	21.94		C
	ANISOU	732	C	LYS	A	412	2995	2803	2540	14	-538	-292	C
	ATOM	733	O	LYS	A	412	27.630	11.557	-32.849	1.00	22.69		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	733	O	LYS	A	412	3067	2958	2597	-40	-599	-352	O
	ATOM	734	N	ALA	A	413	28.709	12.869	-31.427	1.00	21.22		N
	ANISOU	734	N	ALA	A	413	2860	2671	2530	36	-525	-183	N
	ATOM	735	CA	ALA	A	413	27.536	13.650	-31.085	1.00	20.92		C
5	ANISOU	735	CA	ALA	A	413	2747	2655	2548	13	-576	-129	C
	ATOM	736	CB	ALA	A	413	27.649	14.219	-29.668	1.00	18.88		C
	ANISOU	736	CB	ALA	A	413	2470	2294	2409	26	-537	-70	C
	ATOM	737	C	ALA	A	413	27.248	14.752	-32.097	1.00	21.86		C
	ANISOU	737	C	ALA	A	413	2818	2897	2593	49	-633	-41	C
10	ATOM	738	O	ALA	A	413	26.187	15.379	-32.051	1.00	22.85		O
	ANISOU	738	O	ALA	A	413	2871	3058	2752	48	-693	-4	O
	ATOM	739	N	VAL	A	414	28.175	14.991	-33.014	1.00	22.39		N
	ANISOU	739	N	VAL	A	414	2922	3032	2556	85	-611	-4	N
	ATOM	740	CA	VAL	A	414	27.955	15.974	-34.070	1.00	23.35		C
15	ANISOU	740	CA	VAL	A	414	3019	3272	2581	117	-662	98	C
	ATOM	741	CB	VAL	A	414	29.231	16.231	-34.885	1.00	23.82		C
	ANISOU	741	CB	VAL	A	414	3127	3392	2531	144	-600	150	C
	ATOM	742	CG1	VAL	A	414	28.916	17.030	-36.162	1.00	23.49		C
	ANISOU	742	CG1	VAL	A	414	3084	3492	2348	165	-656	255	C
20	ATOM	743	CG2	VAL	A	414	30.269	16.960	-34.029	1.00	21.14		C
	ANISOU	743	CG2	VAL	A	414	2786	2952	2296	164	-520	231	C
	ATOM	744	C	VAL	A	414	26.807	15.533	-34.993	1.00	25.52		C
	ANISOU	744	C	VAL	A	414	3267	3670	2760	90	-761	34	C
	ATOM	745	O	VAL	A	414	26.724	14.372	-35.386	1.00	26.20		O
25	ANISOU	745	O	VAL	A	414	3384	3785	2785	46	-766	-102	O
	ATOM	746	N	ARG	A	415	25.914	16.474	-35.297	1.00	26.58		N
	ANISOU	746	N	ARG	A	415	3339	3868	2891	121	-844	127	N
	ATOM	747	CA	ARG	A	415	24.812	16.243	-36.203	1.00	29.14		C
	ANISOU	747	CA	ARG	A	415	3617	4335	3118	109	-958	83	C
30	ATOM	748	CB	ARG	A	415	23.449	16.436	-35.494	1.00	29.44		C
	ANISOU	748	CB	ARG	A	415	3545	4355	3286	99	-1027	62	C
	ATOM	749	CG	ARG	A	415	23.141	15.430	-34.381	1.00	29.25		C
	ANISOU	749	CG	ARG	A	415	3504	4222	3388	18	-974	-70	C
	ATOM	750	CD	ARG	A	415	23.007	14.000	-34.895	1.00	29.56		C
35	ANISOU	750	CD	ARG	A	415	3579	4300	3352	-70	-985	-236	C
	ATOM	751	NE	ARG	A	415	22.856	13.082	-33.769	1.00	29.80		N
	ANISOU	751	NE	ARG	A	415	3621	4194	3510	-150	-917	-331	N
	ATOM	752	CZ	ARG	A	415	23.825	12.317	-33.266	1.00	28.42		C
	ANISOU	752	CZ	ARG	A	415	3546	3892	3360	-167	-824	-374	C
40	ATOM	753	NH1	ARG	A	415	25.038	12.351	-33.797	1.00	29.21		N
	ANISOU	753	NH1	ARG	A	415	3727	3996	3374	-111	-782	-347	N
	ATOM	754	NH2	ARG	A	415	23.574	11.513	-32.230	1.00	25.27		N
	ANISOU	754	NH2	ARG	A	415	3164	3367	3070	-239	-772	-438	N
	ATOM	755	C	ARG	A	415	24.940	17.199	-37.386	1.00	30.32		C
45	ANISOU	755	C	ARG	A	415	3784	4614	3121	172	-1013	223	C
	ATOM	756	O	ARG	A	415	25.119	18.400	-37.205	1.00	30.57		O
	ANISOU	756	O	ARG	A	415	3812	4599	3205	231	-1007	381	O
	ATOM	757	N	GLY	A	416	24.846	16.660	-38.592	1.00	31.60		N
	ANISOU	757	N	GLY	A	416	3973	4936	3096	156	-1066	164	N
50	ATOM	758	CA	GLY	A	416	25.049	17.449	-39.795	1.00	32.75		C
	ANISOU	758	CA	GLY	A	416	4156	5224	3063	209	-1110	301	C
	ATOM	759	C	GLY	A	416	26.516	17.725	-40.084	1.00	32.51		C
	ANISOU	759	C	GLY	A	416	4216	5174	2960	216	-984	379	C
	ATOM	760	O	GLY	A	416	27.397	17.335	-39.318	1.00	30.64		O
55	ANISOU	760	O	GLY	A	416	4002	4814	2824	191	-871	323	O
	ATOM	761	N	ASP	A	417	26.766	18.388	-41.211	1.00	34.28		N
	ANISOU	761	N	ASP	A	417	4487	5534	3002	249	-1005	511	N
	ATOM	762	CA	ASP	A	417	28.113	18.751	-41.645	1.00	35.22		C
	ANISOU	762	CA	ASP	A	417	4682	5669	3032	244	-879	601	C
60	ATOM	763	CB	ASP	A	417	28.165	18.916	-43.173	1.00	37.33		C
	ANISOU	763	CB	ASP	A	417	5008	6157	3018	256	-915	671	C
	ATOM	764	CG	ASP	A	417	28.224	17.574	-43.905	1.00	40.79		C
	ANISOU	764	CG	ASP	A	417	5468	6743	3286	216	-916	453	C
	ATOM	765	OD1	ASP	A	417	28.476	16.530	-43.243	1.00	40.15		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	765	OD1	ASP	A	417	5373	6567	3315	180	-861	264	O
	ATOM	766	OD2	ASP	A	417	28.023	17.556	-45.146	1.00	44.28		O
	ANISOU	766	OD2	ASP	A	417	5951	7394	3481	223	-973	470	O
	ATOM	767	C	ASP	A	417	28.588	20.023	-40.949	1.00	34.37		C
5	ANISOU	767	C	ASP	A	417	4575	5408	3075	269	-821	788	C
	ATOM	768	O	ASP	A	417	27.782	20.865	-40.553	1.00	33.70		O
	ANISOU	768	O	ASP	A	417	4453	5250	3100	314	-901	893	O
	ATOM	769	N	LEU	A	418	29.902	20.142	-40.795	1.00	34.15		N
10	ANISOU	769	N	LEU	A	418	4581	5331	3061	239	-680	814	N
	ATOM	770	CA	LEU	A	418	30.506	21.331	-40.188	1.00	34.32		C
	ANISOU	770	CA	LEU	A	418	4607	5210	3223	240	-613	976	C
	ATOM	771	CB	LEU	A	418	31.439	20.937	-39.032	1.00	32.56		C
	ANISOU	771	CB	LEU	A	418	4354	4852	3167	206	-504	872	C
	ATOM	772	CG	LEU	A	418	30.818	20.136	-37.877	1.00	32.15		C
15	ANISOU	772	CG	LEU	A	418	4251	4695	3270	212	-546	713	C
	ATOM	773	CD1	LEU	A	418	31.869	19.758	-36.847	1.00	32.10		C
	ANISOU	773	CD1	LEU	A	418	4227	4578	3390	188	-444	632	C
	ATOM	774	CD2	LEU	A	418	29.674	20.910	-37.221	1.00	32.15		C
20	ANISOU	774	CD2	LEU	A	418	4210	4598	3407	247	-640	782	C
	ATOM	775	C	LEU	A	418	31.217	22.207	-41.237	1.00	36.42		C
	ANISOU	775	C	LEU	A	418	4940	5563	3335	227	-553	1165	C
	ATOM	776	O	LEU	A	418	32.148	21.768	-41.919	1.00	36.22		O
	ANISOU	776	O	LEU	A	418	4945	5656	3162	188	-454	1130	O
	ATOM	777	N	ASN	A	419	30.740	23.444	-41.374	1.00	38.22		N
25	ANISOU	777	N	ASN	A	419	5193	5731	3598	263	-611	1367	N
	ATOM	778	CA	ASN	A	419	31.215	24.360	-42.413	1.00	40.94		C
	ANISOU	778	CA	ASN	A	419	5619	6147	3791	250	-570	1584	C
	ATOM	779	CB	ASN	A	419	30.272	24.322	-43.627	1.00	42.84		C
30	ANISOU	779	CB	ASN	A	419	5901	6577	3800	306	-702	1654	C
	ATOM	780	CG	ASN	A	419	30.365	23.011	-44.413	1.00	43.28		C
	ANISOU	780	CG	ASN	A	419	5958	6853	3634	281	-699	1469	C
	ATOM	781	OD1	ASN	A	419	31.429	22.652	-44.933	1.00	42.07		O
	ANISOU	781	OD1	ASN	A	419	5839	6798	3349	224	-567	1436	O
	ATOM	782	ND2	ASN	A	419	29.243	22.307	-44.522	1.00	41.71		N
35	ANISOU	782	ND2	ASN	A	419	5716	6735	3396	320	-841	1339	N
	ATOM	783	C	ASN	A	419	31.355	25.811	-41.928	1.00	41.80		C
	ANISOU	783	C	ASN	A	419	5754	6059	4070	255	-549	1788	C
	ATOM	784	O	ASN	A	419	31.184	26.739	-42.727	1.00	43.13		O
	ANISOU	784	O	ASN	A	419	5997	6247	4142	277	-579	2006	O
40	ATOM	785	N	PHE	A	420	31.654	25.990	-40.633	1.00	40.43		N
	ANISOU	785	N	PHE	A	420	5526	5694	4142	235	-501	1717	N
	ATOM	786	CA	PHE	A	420	31.813	27.317	-40.017	1.00	41.44		C
	ANISOU	786	CA	PHE	A	420	5674	5609	4463	231	-477	1867	C
	ATOM	787	CB	PHE	A	420	31.969	27.229	-38.484	1.00	38.75		C
45	ANISOU	787	CB	PHE	A	420	5258	5093	4371	217	-448	1720	C
	ATOM	788	CG	PHE	A	420	30.717	26.787	-37.763	1.00	38.53		C
	ANISOU	788	CG	PHE	A	420	5167	5033	4438	296	-567	1596	C
	ATOM	789	CD1	PHE	A	420	30.638	25.508	-37.189	1.00	35.77		C
50	ANISOU	789	CD1	PHE	A	420	4757	4741	4094	283	-566	1382	C
	ATOM	790	CE1	PHE	A	420	29.480	25.098	-36.517	1.00	35.30		C
	ANISOU	790	CE1	PHE	A	420	4636	4656	4121	336	-660	1273	C
	ATOM	791	CZ	PHE	A	420	28.390	25.961	-36.410	1.00	36.31		C
	ANISOU	791	CZ	PHE	A	420	4745	4716	4335	416	-759	1362	C
	ATOM	792	CE2	PHE	A	420	28.453	27.236	-36.976	1.00	37.91		C
55	ANISOU	792	CE2	PHE	A	420	5009	4854	4542	452	-773	1570	C
	ATOM	793	CD2	PHE	A	420	29.615	27.647	-37.648	1.00	38.57		C
	ANISOU	793	CD2	PHE	A	420	5173	4948	4536	385	-676	1694	C
	ATOM	794	C	PHE	A	420	32.985	28.099	-40.621	1.00	43.58		C
	ANISOU	794	C	PHE	A	420	6013	5871	4673	144	-345	2038	C
60	ATOM	795	O	PHE	A	420	34.016	27.544	-40.971	1.00	43.69		O
	ANISOU	795	O	PHE	A	420	6017	6000	4582	67	-227	1979	O
	ATOM	796	N	VAL	A	421	32.815	29.402	-40.734	1.00	46.01		N
	ANISOU	796	N	VAL	A	421	6388	6035	5060	155	-361	2250	N
	ATOM	797	CA	VAL	A	421	33.827	30.281	-41.275	1.00	48.42		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	797	CA	VAL	A	421	6767	6301	5331	58	-235	2439	C
	ATOM	798	CB	VAL	A	421	33.415	30.657	-42.715	1.00	50.72		C
	ANISOU	798	CB	VAL	A	421	7168	6727	5375	95	-285	2662	C
	ATOM	799	CG1	VAL	A	421	33.405	32.139	-42.946	1.00	53.63		C
5	ANISOU	799	CG1	VAL	A	421	7644	6908	5824	89	-278	2939	C
	ATOM	800	CG2	VAL	A	421	34.260	29.882	-43.738	1.00	50.83		C
	ANISOU	800	CG2	VAL	A	421	7196	6999	5117	16	-175	2634	C
	ATOM	801	C	VAL	A	421	33.969	31.474	-40.304	1.00	49.05		C
	ANISOU	801	C	VAL	A	421	6856	6092	5690	35	-213	2513	C
10	ATOM	802	O	VAL	A	421	33.147	31.634	-39.405	1.00	48.40		O
	ANISOU	802	O	VAL	A	421	6734	5873	5784	117	-308	2435	O
	ATOM	803	N	ASN	A	422	35.019	32.281	-40.431	1.00	50.78		N
	ANISOU	803	N	ASN	A	422	7118	6220	5956	-86	-79	2641	N
	ATOM	804	CA	ASN	A	422	35.104	33.500	-39.619	1.00	51.41		C
15	ANISOU	804	CA	ASN	A	422	7224	6012	6298	-114	-65	2718	C
	ATOM	805	CB	ASN	A	422	36.417	33.548	-38.825	1.00	50.54		C
	ANISOU	805	CB	ASN	A	422	7039	5832	6330	-263	80	2603	C
	ATOM	806	CG	ASN	A	422	37.651	33.599	-39.710	1.00	53.01		C
	ANISOU	806	CG	ASN	A	422	7370	6272	6500	-410	242	2706	C
20	ATOM	807	OD1	ASN	A	422	38.708	33.120	-39.316	1.00	54.15		O
	ANISOU	807	OD1	ASN	A	422	7415	6486	6672	-510	351	2564	O
	ATOM	808	ND2	ASN	A	422	37.536	34.195	-40.891	1.00	54.93		N
	ANISOU	808	ND2	ASN	A	422	7734	6550	6586	-424	260	2956	N
	ATOM	809	C	ASN	A	422	34.855	34.791	-40.412	1.00	54.51		C
25	ANISOU	809	C	ASN	A	422	7760	6272	6679	-107	-77	3020	C
	ATOM	810	O	ASN	A	422	34.565	34.742	-41.619	1.00	55.83		O
	ANISOU	810	O	ASN	A	422	8008	6590	6613	-71	-108	3185	O
	ATOM	811	N	ARG	A	423	34.971	35.936	-39.726	1.00	55.63		N
	ANISOU	811	N	ARG	A	423	7940	6128	7070	-139	-56	3090	N
30	ATOM	812	CA	ARG	A	423	34.778	37.275	-40.329	1.00	58.60		C
	ANISOU	812	CA	ARG	A	423	8467	6310	7489	-134	-63	3384	C
	ATOM	813	CB	ARG	A	423	35.154	38.368	-39.309	1.00	59.00		C
	ANISOU	813	CB	ARG	A	423	8531	6029	7855	-205	-10	3374	C
	ATOM	814	CG	ARG	A	423	35.137	39.808	-39.824	1.00	63.01		C
35	ANISOU	814	CG	ARG	A	423	9207	6282	8454	-228	9	3672	C
	ATOM	815	CD	ARG	A	423	35.119	40.813	-38.669	1.00	63.11		C
	ANISOU	815	CD	ARG	A	423	9229	5943	8808	-243	11	3608	C
	ATOM	816	NE	ARG	A	423	35.372	42.173	-39.147	1.00	69.55		N
	ANISOU	816	NE	ARG	A	423	10211	6488	9728	-310	65	3886	N
40	ATOM	817	CZ	ARG	A	423	35.212	43.291	-38.432	1.00	71.04		C
	ANISOU	817	CZ	ARG	A	423	10463	6323	10208	-303	54	3903	C
	ATOM	818	NH1	ARG	A	423	34.780	43.251	-37.173	1.00	69.69		N
	ANISOU	818	NH1	ARG	A	423	10195	6035	10247	-226	-8	3649	N
	ATOM	819	NH2	ARG	A	423	35.491	44.463	-38.983	1.00	73.29		N
45	ANISOU	819	NH2	ARG	A	423	10914	6362	10570	-377	112	4175	N
	ATOM	820	C	ARG	A	423	35.554	37.441	-41.644	1.00	60.66		C
	ANISOU	820	C	ARG	A	423	8824	6708	7516	-250	52	3610	C
	ATOM	821	O	ARG	A	423	34.991	37.878	-42.656	1.00	63.13		O
	ANISOU	821	O	ARG	A	423	9263	7049	7676	-176	-13	3852	O
50	ATOM	822	N	ALA	A	424	36.833	37.059	-41.619	1.00	60.09		N
	ANISOU	822	N	ALA	A	424	8685	6740	7406	-424	220	3525	N
	ATOM	823	CA	ALA	A	424	37.733	37.087	-42.782	1.00	61.86		C
	ANISOU	823	CA	ALA	A	424	8968	7132	7403	-560	366	3695	C
	ATOM	824	CB	ALA	A	424	39.184	37.099	-42.313	1.00	61.84		C
55	ANISOU	824	CB	ALA	A	424	8869	7119	7507	-766	558	3590	C
	ATOM	825	C	ALA	A	424	37.525	35.953	-43.803	1.00	61.47		C
	ANISOU	825	C	ALA	A	424	8907	7435	7014	-498	342	3661	C
	ATOM	826	O	ALA	A	424	38.302	35.834	-44.758	1.00	63.06		O
	ANISOU	826	O	ALA	A	424	9142	7818	7001	-608	476	3765	O
60	ATOM	827	N	ASN	A	425	36.503	35.117	-43.583	1.00	59.19		N
	ANISOU	827	N	ASN	A	425	8565	7245	6681	-334	181	3501	N
	ATOM	828	CA	ASN	A	425	36.066	34.070	-44.533	1.00	58.70		C
	ANISOU	828	CA	ASN	A	425	8501	7493	6310	-257	119	3455	C
	ATOM	829	CB	ASN	A	425	35.834	34.650	-45.946	1.00	61.60		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	829	CB	ASN	A	425	9027	7961	6417	-245	108	3760	C
	ATOM	830	CG	ASN	A	425	35.025	33.719	-46.851	1.00	61.89		C
	ANISOU	830	CG	ASN	A	425	9073	8290	6153	-127	-18	3714	C
	ATOM	831	OD1	ASN	A	425	34.099	33.032	-46.410	1.00	60.11		O
5	ANISOU	831	OD1	ASN	A	425	8770	8100	5969	-2	-169	3531	O
	ATOM	832	ND2	ASN	A	425	35.377	33.700	-48.125	1.00	65.09		N
	ANISOU	832	ND2	ASN	A	425	9572	8911	6249	-176	49	3875	N
	ATOM	833	C	ASN	A	425	36.992	32.848	-44.543	1.00	56.85		C
	ANISOU	833	C	ASN	A	425	8150	7489	5962	-338	240	3221	C
10	ATOM	834	O	ASN	A	425	37.088	32.101	-45.516	1.00	57.64		O
	ANISOU	834	O	ASN	A	425	8263	7855	5782	-333	263	3202	O
	ATOM	835	N	GLN	A	426	37.662	32.653	-43.424	1.00	54.65		N
	ANISOU	835	N	GLN	A	426	7757	7103	5906	-403	310	3033	N
	ATOM	836	CA	GLN	A	426	38.574	31.539	-43.259	1.00	52.90		C
15	ANISOU	836	CA	GLN	A	426	7412	7061	5626	-461	416	2803	C
	ATOM	837	CB	GLN	A	426	39.823	31.999	-42.501	1.00	53.02		C
	ANISOU	837	CB	GLN	A	426	7345	6954	5845	-609	567	2761	C
	ATOM	838	CG	GLN	A	426	40.496	33.214	-43.170	1.00	57.14		C
	ANISOU	838	CG	GLN	A	426	7957	7403	6350	-755	700	3030	C
20	ATOM	839	CD	GLN	A	426	41.953	33.340	-42.795	1.00	59.04		C
	ANISOU	839	CD	GLN	A	426	8085	7648	6699	-930	886	2958	C
	ATOM	840	OE1	GLN	A	426	42.294	33.478	-41.614	1.00	58.44		O
	ANISOU	840	OE1	GLN	A	426	7913	7417	6874	-964	882	2816	O
	ATOM	841	NE2	GLN	A	426	42.825	33.277	-43.793	1.00	60.49		N
25	ANISOU	841	NE2	GLN	A	426	8269	8028	6687	-1044	1051	3047	N
	ATOM	842	C	GLN	A	426	37.859	30.413	-42.543	1.00	49.11		C
	ANISOU	842	C	GLN	A	426	6847	6621	5192	-339	290	2547	C
	ATOM	843	O	GLN	A	426	37.235	30.626	-41.508	1.00	47.36		O
	ANISOU	843	O	GLN	A	426	6597	6214	5183	-278	192	2479	O
30	ATOM	844	N	ARG	A	427	37.920	29.226	-43.133	1.00	48.00		N
	ANISOU	844	N	ARG	A	427	6674	6721	4843	-307	298	2408	N
	ATOM	845	CA	ARG	A	427	37.341	28.025	-42.550	1.00	45.29		C
	ANISOU	845	CA	ARG	A	427	6256	6425	4525	-212	198	2160	C
35	ATOM	846	CB	ARG	A	427	37.621	26.831	-43.471	1.00	45.82		C
	ANISOU	846	CB	ARG	A	427	6312	6763	4335	-202	242	2034	C
	ATOM	847	CG	ARG	A	427	37.173	25.507	-42.909	1.00	43.52		C
	ANISOU	847	CG	ARG	A	427	5952	6510	4074	-124	162	1771	C
	ATOM	848	CD	ARG	A	427	37.185	24.344	-43.919	1.00	44.50		C
	ANISOU	848	CD	ARG	A	427	6088	6884	3937	-97	174	1641	C
40	ATOM	849	NE	ARG	A	427	36.589	23.168	-43.281	1.00	42.09		N
	ANISOU	849	NE	ARG	A	427	5732	6558	3701	-26	80	1406	N
	ATOM	850	CZ	ARG	A	427	35.305	22.813	-43.382	1.00	41.80		C
	ANISOU	850	CZ	ARG	A	427	5721	6535	3625	43	-78	1366	C
	ATOM	851	NH1	ARG	A	427	34.472	23.522	-44.138	1.00	40.53		N
45	ANISOU	851	NH1	ARG	A	427	5630	6425	3343	70	-173	1541	N
	ATOM	852	NH2	ARG	A	427	34.859	21.734	-42.737	1.00	38.54		N
	ANISOU	852	NH2	ARG	A	427	5262	6088	3294	83	-141	1153	N
	ATOM	853	C	ARG	A	427	37.941	27.795	-41.156	1.00	42.92		C
	ANISOU	853	C	ARG	A	427	5846	5984	4476	-242	239	1985	C
50	ATOM	854	O	ARG	A	427	39.158	27.682	-41.033	1.00	43.19		O
	ANISOU	854	O	ARG	A	427	5815	6060	4536	-330	378	1932	O
	ATOM	855	N	LEU	A	428	37.109	27.762	-40.111	1.00	40.68		N
	ANISOU	855	N	LEU	A	428	5537	5548	4373	-169	120	1900	N
55	ATOM	856	CA	LEU	A	428	37.620	27.491	-38.771	1.00	38.47		C
	ANISOU	856	CA	LEU	A	428	5162	5153	4302	-189	146	1733	C
	ATOM	857	CB	LEU	A	428	36.507	27.485	-37.706	1.00	37.16		C
	ANISOU	857	CB	LEU	A	428	4983	4836	4300	-103	12	1656	C
	ATOM	858	CG	LEU	A	428	35.520	28.644	-37.563	1.00	38.47		C
	ANISOU	858	CG	LEU	A	428	5210	4834	4572	-57	-80	1807	C
60	ATOM	859	CD1	LEU	A	428	34.640	28.465	-36.331	1.00	36.49		C
	ANISOU	859	CD1	LEU	A	428	4911	4461	4493	17	-177	1674	C
	ATOM	860	CD2	LEU	A	428	36.231	29.983	-37.520	1.00	40.33		C
	ANISOU	860	CD2	LEU	A	428	5484	4917	4922	-147	4	1968	C
	ATOM	861	C	LEU	A	428	38.327	26.130	-38.791	1.00	37.36		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	861	C	LEU	A	428	4947	5175	4073	-187	206	1533	C
	ATOM	862	O	LEU	A	428	37.927	25.217	-39.528	1.00	37.44		O
	ANISOU	862	O	LEU	A	428	4980	5342	3905	-134	173	1466	O
	ATOM	863	N	ASN	A	429	39.393	26.000	-38.005	1.00	36.22		N
5	ANISOU	863	N	ASN	A	429	4713	4996	4055	-240	291	1432	N
	ATOM	864	CA	ASN	A	429	40.027	24.699	-37.838	1.00	35.15		C
	ANISOU	864	CA	ASN	A	429	4501	4981	3874	-209	331	1232	C
	ATOM	865	CB	ASN	A	429	41.422	24.797	-37.154	1.00	35.29		C
	ANISOU	865	CB	ASN	A	429	4406	4986	4018	-278	438	1162	C
10	ATOM	866	CG	ASN	A	429	41.376	25.137	-35.654	1.00	34.45		C
	ANISOU	866	CG	ASN	A	429	4253	4696	4142	-277	377	1100	C
	ATOM	867	OD1	ASN	A	429	40.351	25.025	-34.971	1.00	33.81		O
	ANISOU	867	OD1	ASN	A	429	4210	4506	4130	-211	263	1066	O
	ATOM	868	ND2	ASN	A	429	42.531	25.532	-35.132	1.00	32.90		N
15	ANISOU	868	ND2	ASN	A	429	3961	4484	4057	-356	458	1073	N
	ATOM	869	C	ASN	A	429	39.062	23.680	-37.199	1.00	32.57		C
	ANISOU	869	C	ASN	A	429	4181	4618	3577	-107	207	1081	C
	ATOM	870	O	ASN	A	429	38.051	24.074	-36.619	1.00	31.85		O
	ANISOU	870	O	ASN	A	429	4121	4399	3582	-74	105	1113	O
20	ATOM	871	N	PRO	A	430	39.325	22.378	-37.376	1.00	31.96		N
	ANISOU	871	N	PRO	A	430	4076	4654	3413	-60	223	919	N
	ATOM	872	CA	PRO	A	430	38.489	21.306	-36.827	1.00	30.42		C
	ANISOU	872	CA	PRO	A	430	3895	4422	3243	19	122	773	C
	ATOM	873	CB	PRO	A	430	39.374	20.073	-36.998	1.00	30.52		C
25	ANISOU	873	CB	PRO	A	430	3865	4539	3194	51	191	608	C
	ATOM	874	CG	PRO	A	430	40.115	20.354	-38.256	1.00	32.63		C
	ANISOU	874	CG	PRO	A	430	4130	4972	3296	8	302	673	C
	ATOM	875	CD	PRO	A	430	40.439	21.822	-38.174	1.00	33.57		C
	ANISOU	875	CD	PRO	A	430	4239	5029	3487	-78	346	859	C
30	ATOM	876	C	PRO	A	430	38.030	21.452	-35.362	1.00	28.84		C
	ANISOU	876	C	PRO	A	430	3672	4045	3243	38	48	733	C
	ATOM	877	O	PRO	A	430	36.844	21.250	-35.072	1.00	28.54		O
	ANISOU	877	O	PRO	A	430	3669	3949	3226	76	-51	715	O
	ATOM	878	N	MSE	A	431	38.938	21.798	-34.454	1.00	27.42		N
35	ANISOU	878	N	MSE	A	431	3425	3793	3198	8	97	713	N
	ATOM	879	CA	MSE	A	431	38.573	21.963	-33.044	1.00	25.88		C
	ANISOU	879	CA	MSE	A	431	3213	3450	3172	23	33	670	C
	ATOM	880	CB	MSE	A	431	39.832	22.116	-32.159	1.00	25.62		C
	ANISOU	880	CB	MSE	A	431	3094	3390	3252	-8	89	615	C
40	ATOM	881	CG	MSE	A	431	40.705	20.833	-32.079	1.00	26.44		C
	ANISOU	881	CG	MSE	A	431	3147	3586	3315	45	124	475	C
	ATOM	882	SE	MSE	A	431	39.842	19.246	-31.234	0.90	30.28		SE
	ANISOU	882	SE	MSE	A	431	3685	4010	3809	150	26	327	SE
	ATOM	883	CE	MSE	A	431	39.652	20.084	-29.473	1.00	25.02		C
45	ANISOU	883	CE	MSE	A	431	2993	3190	3324	126	-33	340	C
	ATOM	884	C	MSE	A	431	37.575	23.100	-32.781	1.00	25.36		C
	ANISOU	884	C	MSE	A	431	3187	3264	3186	9	-30	783	C
	ATOM	885	O	MSE	A	431	36.673	22.960	-31.939	1.00	24.38		O
	ANISOU	885	O	MSE	A	431	3073	3052	3140	47	-107	735	O
50	ATOM	886	N	HIS	A	432	37.743	24.212	-33.483	1.00	26.43		N
	ANISOU	886	N	HIS	A	432	3345	3391	3306	-42	7	933	N
	ATOM	887	CA	HIS	A	432	36.804	25.342	-33.406	1.00	27.85		C
	ANISOU	887	CA	HIS	A	432	3573	3450	3560	-37	-53	1055	C
	ATOM	888	CB	HIS	A	432	37.483	26.636	-33.864	1.00	29.15		C
55	ANISOU	888	CB	HIS	A	432	3755	3560	3759	-119	20	1213	C
	ATOM	889	CG	HIS	A	432	38.458	27.164	-32.859	1.00	31.05		C
	ANISOU	889	CG	HIS	A	432	3933	3702	4163	-191	77	1164	C
	ATOM	890	ND1	HIS	A	432	39.711	26.614	-32.671	1.00	31.07		N
	ANISOU	890	ND1	HIS	A	432	3853	3795	4157	-238	156	1070	N
60	ATOM	891	CE1	HIS	A	432	40.338	27.277	-31.714	1.00	33.02		C
	ANISOU	891	CE1	HIS	A	432	4046	3937	4562	-300	177	1035	C
	ATOM	892	NE2	HIS	A	432	39.529	28.221	-31.255	1.00	32.01		N
	ANISOU	892	NE2	HIS	A	432	3972	3642	4547	-295	121	1094	N
	ATOM	893	CD2	HIS	A	432	38.348	28.170	-31.956	1.00	32.70		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	893	CD2	HIS	A	432	4141	3736	4548	-220	58	1179	C
	ATOM	894	C	HIS	A	432	35.510	25.078	-34.165	1.00	27.83		C
	ANISOU	894	C	HIS	A	432	3625	3502	3447	29	-143	1098	C
	ATOM	895	O	HIS	A	432	34.466	25.587	-33.800	1.00	28.93		O
5	ANISOU	895	O	HIS	A	432	3780	3549	3665	73	-223	1134	O
	ATOM	896	N	GLN	A	433	35.608	24.283	-35.217	1.00	28.16		N
	ANISOU	896	N	GLN	A	433	3686	3705	3308	38	-128	1081	N
	ATOM	897	CA	GLN	A	433	34.467	23.712	-35.940	1.00	29.30		C
	ANISOU	897	CA	GLN	A	433	3866	3942	3324	95	-220	1070	C
10	ATOM	898	CB	GLN	A	433	35.053	22.746	-36.985	1.00	30.36		C
	ANISOU	898	CB	GLN	A	433	4014	4260	3263	84	-165	1008	C
	ATOM	899	CG	GLN	A	433	34.400	22.595	-38.320	1.00	34.65		C
	ANISOU	899	CG	GLN	A	433	4611	4954	3599	106	-217	1065	C
	ATOM	900	CD	GLN	A	433	34.134	23.881	-39.054	1.00	37.03		C
15	ANISOU	900	CD	GLN	A	433	4967	5253	3848	101	-235	1288	C
	ATOM	901	OE1	GLN	A	433	32.987	24.307	-39.137	1.00	38.30		O
	ANISOU	901	OE1	GLN	A	433	5148	5383	4022	154	-351	1359	O
	ATOM	902	NE2	GLN	A	433	35.176	24.486	-39.632	1.00	38.30		N
	ANISOU	902	NE2	GLN	A	433	5153	5454	3945	38	-121	1405	N
20	ATOM	903	C	GLN	A	433	33.551	22.973	-34.938	1.00	27.21		C
	ANISOU	903	C	GLN	A	433	3569	3614	3155	140	-301	930	C
	ATOM	904	O	GLN	A	433	32.367	23.270	-34.843	1.00	26.79		O
	ANISOU	904	O	GLN	A	433	3518	3526	3136	182	-393	960	O
	ATOM	905	N	LEU	A	434	34.134	22.047	-34.166	1.00	25.47		N
25	ANISOU	905	N	LEU	A	434	3317	3379	2983	132	-261	785	N
	ATOM	906	CA	LEU	A	434	33.444	21.324	-33.076	1.00	23.90		C
	ANISOU	906	CA	LEU	A	434	3095	3107	2877	157	-313	662	C
	ATOM	907	CB	LEU	A	434	34.364	20.255	-32.466	1.00	21.96		C
	ANISOU	907	CB	LEU	A	434	2834	2862	2649	154	-258	530	C
30	ATOM	908	CG	LEU	A	434	34.764	19.139	-33.439	1.00	23.59		C
	ANISOU	908	CG	LEU	A	434	3064	3192	2709	164	-230	450	C
	ATOM	909	CD1	LEU	A	434	35.976	18.335	-32.918	1.00	20.60		C
	ANISOU	909	CD1	LEU	A	434	2659	2806	2361	179	-162	347	C
	ATOM	910	CD2	LEU	A	434	33.550	18.247	-33.779	1.00	19.71		C
35	ANISOU	910	CD2	LEU	A	434	2602	2734	2153	179	-308	372	C
	ATOM	911	C	LEU	A	434	32.955	22.243	-31.952	1.00	23.68		C
	ANISOU	911	C	LEU	A	434	3044	2938	3017	164	-342	696	C
	ATOM	912	O	LEU	A	434	31.826	22.090	-31.488	1.00	22.82		O
	ANISOU	912	O	LEU	A	434	2922	2795	2954	191	-409	658	O
40	ATOM	913	N	LEU	A	435	33.830	23.153	-31.512	1.00	23.88		N
	ANISOU	913	N	LEU	A	435	3056	2886	3130	132	-286	752	N
	ATOM	914	CA	LEU	A	435	33.499	24.163	-30.507	1.00	25.30		C
	ANISOU	914	CA	LEU	A	435	3221	2926	3468	134	-304	776	C
	ATOM	915	CB	LEU	A	435	34.675	25.123	-30.289	1.00	25.47		C
45	ANISOU	915	CB	LEU	A	435	3231	2880	3567	76	-233	832	C
	ATOM	916	CG	LEU	A	435	34.639	26.078	-29.094	1.00	25.12		C
	ANISOU	916	CG	LEU	A	435	3169	2684	3693	62	-237	814	C
	ATOM	917	CD1	LEU	A	435	34.703	25.341	-27.754	1.00	24.17		C
	ANISOU	917	CD1	LEU	A	435	3012	2549	3622	73	-247	664	C
50	ATOM	918	CD2	LEU	A	435	35.784	27.023	-29.203	1.00	25.51		C
	ANISOU	918	CD2	LEU	A	435	3211	2680	3803	-15	-167	880	C
	ATOM	919	C	LEU	A	435	32.245	24.976	-30.853	1.00	27.05		C
	ANISOU	919	C	LEU	A	435	3458	3104	3717	181	-377	868	C
	ATOM	920	O	LEU	A	435	31.290	25.013	-30.067	1.00	27.13		O
55	ANISOU	920	O	LEU	A	435	3441	3056	3810	219	-426	813	O
	ATOM	921	N	ARG	A	436	32.256	25.645	-32.008	1.00	29.13		N
	ANISOU	921	N	ARG	A	436	3760	3400	3908	183	-382	1011	N
	ATOM	922	CA	ARG	A	436	31.117	26.464	-32.400	1.00	30.76		C
	ANISOU	922	CA	ARG	A	436	3982	3566	4140	248	-463	1117	C
60	ATOM	923	CB	ARG	A	436	31.376	27.299	-33.659	1.00	33.08		C
	ANISOU	923	CB	ARG	A	436	4340	3883	4346	244	-457	1307	C
	ATOM	924	CG	ARG	A	436	32.474	28.404	-33.560	1.00	40.00		C
	ANISOU	924	CG	ARG	A	436	5252	4636	5311	174	-367	1413	C
	ATOM	925	CD	ARG	A	436	32.607	29.153	-32.189	1.00	47.23		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	925	CD	ARG	A	436	6140	5358	6447	160	-347	1351	C
	ATOM	926	NE	ARG	A	436	34.019	29.442	-31.860	1.00	51.94		N
	ANISOU	926	NE	ARG	A	436	6729	5911	7097	53	-242	1339	N
	ATOM	927	CZ	ARG	A	436	34.460	30.070	-30.761	1.00	55.22		C
5	ANISOU	927	CZ	ARG	A	436	7119	6181	7681	10	-211	1275	C
	ATOM	928	NH1	ARG	A	436	33.623	30.495	-29.823	1.00	56.84		N
	ANISOU	928	NH1	ARG	A	436	7313	6263	8019	70	-265	1212	N
	ATOM	929	NH2	ARG	A	436	35.766	30.280	-30.592	1.00	56.92		N
	ANISOU	929	NH2	ARG	A	436	7311	6387	7930	-96	-122	1262	N
10	ATOM	930	C	ARG	A	436	29.860	25.608	-32.560	1.00	29.85		C
	ANISOU	930	C	ARG	A	436	3833	3546	3961	304	-554	1040	C
	ATOM	931	O	ARG	A	436	28.781	26.041	-32.179	1.00	29.79		O
	ANISOU	931	O	ARG	A	436	3791	3486	4041	365	-622	1042	O
	ATOM	932	N	HIS	A	437	30.000	24.397	-33.106	1.00	28.56		N
15	ANISOU	932	N	HIS	A	437	3672	3522	3657	280	-551	961	N
	ATOM	933	CA	HIS	A	437	28.855	23.524	-33.256	1.00	27.62		C
	ANISOU	933	CA	HIS	A	437	3517	3491	3485	308	-633	872	C
	ATOM	934	CB	HIS	A	437	29.238	22.173	-33.872	1.00	26.97		C
20	ANISOU	934	CB	HIS	A	437	3455	3538	3253	269	-613	771	C
	ATOM	935	CG	HIS	A	437	28.094	21.203	-33.939	1.00	24.96		C
	ANISOU	935	CG	HIS	A	437	3163	3358	2963	273	-691	657	C
	ATOM	936	ND1	HIS	A	437	27.096	21.289	-34.889	1.00	23.43		N
	ANISOU	936	ND1	HIS	A	437	2950	3277	2675	305	-793	694	N
	ATOM	937	CE1	HIS	A	437	26.222	20.315	-34.704	1.00	23.02		C
25	ANISOU	937	CE1	HIS	A	437	2852	3273	2623	283	-843	560	C
	ATOM	938	NE2	HIS	A	437	26.611	19.602	-33.660	1.00	24.74		N
	ANISOU	938	NE2	HIS	A	437	3071	3399	2929	238	-771	453	N
	ATOM	939	CD2	HIS	A	437	27.787	20.134	-33.169	1.00	22.63		C
30	ANISOU	939	CD2	HIS	A	437	2844	3039	2717	240	-683	510	C
	ATOM	940	C	HIS	A	437	28.175	23.327	-31.894	1.00	26.83		C
	ANISOU	940	C	HIS	A	437	3359	3302	3534	317	-643	763	C
	ATOM	941	O	HIS	A	437	26.971	23.545	-31.765	1.00	27.43		O
	ANISOU	941	O	HIS	A	437	3383	3382	3658	363	-717	757	O
	ATOM	942	N	PHE	A	438	28.958	22.972	-30.878	1.00	25.29		N
35	ANISOU	942	N	PHE	A	438	3167	3035	3407	276	-569	682	N
	ATOM	943	CA	PHE	A	438	28.394	22.684	-29.559	1.00	24.57		C
	ANISOU	943	CA	PHE	A	438	3034	2877	3426	274	-566	579	C
	ATOM	944	CB	PHE	A	438	29.261	21.668	-28.812	1.00	22.50		C
40	ANISOU	944	CB	PHE	A	438	2794	2601	3155	227	-502	477	C
	ATOM	945	CG	PHE	A	438	29.231	20.302	-29.427	1.00	20.80		C
	ANISOU	945	CG	PHE	A	438	2601	2477	2826	203	-510	405	C
	ATOM	946	CD1	PHE	A	438	28.021	19.574	-29.486	1.00	20.00		C
	ANISOU	946	CD1	PHE	A	438	2472	2420	2708	192	-562	337	C
	ATOM	947	CE1	PHE	A	438	27.970	18.314	-30.056	1.00	18.22		C
45	ANISOU	947	CE1	PHE	A	438	2274	2260	2389	160	-571	256	C
	ATOM	948	CZ	PHE	A	438	29.155	17.745	-30.605	1.00	20.73		C
	ANISOU	948	CZ	PHE	A	438	2649	2605	2624	156	-525	238	C
	ATOM	949	CE2	PHE	A	438	30.357	18.468	-30.569	1.00	17.04		C
50	ANISOU	949	CE2	PHE	A	438	2194	2113	2167	174	-469	308	C
	ATOM	950	PHE	A	438	30.383	19.739	-29.965	1.00	19.46		C	
	ANISOU	950	CD2	PHE	A	438	2473	2349	2573	188	-464	392	C
	ATOM	951	C	PHE	A	438	28.046	23.929	-28.731	1.00	25.24		C
	ANISOU	951	C	PHE	A	438	3090	2842	3658	311	-567	615	C
	ATOM	952	O	PHE	A	438	27.189	23.875	-27.871	1.00	24.41		O
55	ANISOU	952	O	PHE	A	438	2936	2710	3630	328	-580	543	O
	ATOM	953	N	GLN	A	439	28.691	25.057	-29.040	1.00	27.21		N
	ANISOU	953	N	GLN	A	439	3372	3021	3947	320	-548	723	N
	ATOM	954	CA	GLN	A	439	28.316	26.353	-28.476	1.00	28.57		C
60	ANISOU	954	CA	GLN	A	439	3530	3062	4264	365	-557	766	C
	ATOM	955	CB	GLN	A	439	29.395	27.400	-28.724	1.00	29.66		C
	ANISOU	955	CB	GLN	A	439	3721	3102	4446	335	-509	870	C
	ATOM	956	CG	GLN	A	439	30.531	27.306	-27.690	1.00	30.49		C
	ANISOU	956	CG	GLN	A	439	3826	3151	4608	264	-433	781	C
	ATOM	957	CD	GLN	A	439	31.679	28.234	-27.997	1.00	34.96		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	957	CD	GLN	A	439	4429	3638	5214	207	-379	871	C
	ATOM	958	OE1	GLN	A	439	31.762	28.782	-29.090	1.00	38.23		O
	ANISOU	958	OE1	GLN	A	439	4884	4053	5587	208	-383	1013	O
	ATOM	959	NE2	GLN	A	439	32.570	28.423	-27.029	1.00	35.77		N
5	ANISOU	959	NE2	GLN	A	439	4515	3679	5395	149	-329	791	N
	ATOM	960	C	GLN	A	439	26.934	26.813	-28.925	1.00	29.99		C
	ANISOU	960	C	GLN	A	439	3669	3257	4470	454	-644	815	C
	ATOM	961	O	GLN	A	439	26.223	27.399	-28.120	1.00	30.12		O
10	ANISOU	961	O	GLN	A	439	3639	3192	4612	505	-655	772	O
	ATOM	962	N	LYS	A	440	26.528	26.494	-30.162	1.00	31.18		N
	ANISOU	962	N	LYS	A	440	3825	3525	4496	477	-708	887	N
	ATOM	963	CA	LYS	A	440	25.142	26.739	-30.603	1.00	33.51		C
	ANISOU	963	CA	LYS	A	440	4058	3873	4799	568	-811	916	C
	ATOM	964	CB	LYS	A	440	24.983	26.655	-32.140	1.00	35.28		C
15	ANISOU	964	CB	LYS	A	440	4316	4227	4864	593	-887	1034	C
	ATOM	965	CG	LYS	A	440	25.813	27.704	-32.903	1.00	37.77		C
	ANISOU	965	CG	LYS	A	440	4728	4471	5152	603	-867	1220	C
	ATOM	966	CD	LYS	A	440	25.401	27.909	-34.364	1.00	39.08		C
20	ANISOU	966	CD	LYS	A	440	4927	4756	5164	659	-961	1367	C
	ATOM	967	CE	LYS	A	440	26.117	29.152	-34.913	1.00	43.76		C
	ANISOU	967	CE	LYS	A	440	5623	5235	5768	670	-931	1574	C
	ATOM	968	NZ	LYS	A	440	25.782	29.513	-36.329	1.00	47.40		N
	ANISOU	968	NZ	LYS	A	440	6140	5801	6067	730	-1019	1756	N
	ATOM	969	C	LYS	A	440	24.114	25.822	-29.905	1.00	32.70		C
25	ANISOU	969	C	LYS	A	440	3858	3844	4721	562	-831	761	C
	ATOM	970	O	LYS	A	440	23.029	26.285	-29.495	1.00	33.55		O
	ANISOU	970	O	LYS	A	440	3882	3936	4931	635	-876	735	O
	ATOM	971	N	ASP	A	441	24.440	24.539	-29.780	1.00	30.72		N
30	ANISOU	971	N	ASP	A	441	3617	3671	4384	475	-794	659	N
	ATOM	972	CA	ASP	A	441	23.533	23.580	-29.155	1.00	30.83		C
	ANISOU	972	CA	ASP	A	441	3554	3747	4415	443	-800	522	C
	ATOM	973	CB	ASP	A	441	22.400	23.160	-30.119	1.00	33.58		C
	ANISOU	973	CB	ASP	A	441	3830	4241	4688	466	-905	515	C
	ATOM	974	CG	ASP	A	441	21.496	22.044	-29.536	1.00	36.33		C
35	ANISOU	974	CG	ASP	A	441	4094	4658	5053	398	-900	365	C
	ATOM	975	OD1	ASP	A	441	20.945	22.224	-28.422	1.00	37.04		O
	ANISOU	975	OD1	ASP	A	441	4116	4697	5259	402	-859	301	O
	ATOM	976	OD2	ASP	A	441	21.344	20.987	-30.206	1.00	39.15		O
40	ANISOU	976	OD2	ASP	A	441	4455	5117	5303	335	-932	308	O
	ATOM	977	C	ASP	A	441	24.280	22.357	-28.620	1.00	28.33		C
	ANISOU	977	C	ASP	A	441	3285	3430	4047	345	-724	424	C
	ATOM	978	O	ASP	A	441	24.976	21.649	-29.360	1.00	27.35		O
	ANISOU	978	O	ASP	A	441	3222	3360	3809	305	-718	428	O
	ATOM	979	N	ALA	A	442	24.125	22.122	-27.320	1.00	26.96		N
45	ANISOU	979	N	ALA	A	442	3088	3198	3956	316	-666	338	N
	ATOM	980	CA	ALA	A	442	24.818	21.037	-26.645	1.00	24.82		C
	ANISOU	980	CA	ALA	A	442	2872	2908	3650	240	-598	261	C
	ATOM	981	CB	ALA	A	442	25.668	21.599	-25.523	1.00	23.21		C
50	ANISOU	981	CB	ALA	A	442	2703	2600	3517	243	-531	259	C
	ATOM	982	C	ALA	A	442	23.960	19.870	-26.145	1.00	24.67		C
	ANISOU	982	C	ALA	A	442	2817	2932	3624	175	-587	156	C
	ATOM	983	O	ALA	A	442	24.488	19.030	-25.378	1.00	25.14		O
	ANISOU	983	O	ALA	A	442	2932	2949	3670	120	-527	105	O
	ATOM	984	N	LYS	A	443	22.691	19.779	-26.585	1.00	24.95		N
55	ANISOU	984	N	LYS	A	443	2761	3052	3668	177	-646	129	N
	ATOM	985	CA	LYS	A	443	21.742	18.689	-26.217	1.00	25.03		C
	ANISOU	985	CA	LYS	A	443	2718	3111	3680	93	-634	28	C
	ATOM	986	CB	LYS	A	443	20.371	18.874	-26.875	1.00	27.31		C
	ANISOU	986	CB	LYS	A	443	2874	3514	3986	110	-718	6	C
60	ATOM	987	CG	LYS	A	443	19.531	19.967	-26.291	1.00	31.52		C
	ANISOU	987	CG	LYS	A	443	3294	4049	4632	188	-724	14	C
	ATOM	988	CD	LYS	A	443	18.276	20.175	-27.156	1.00	38.16		C
	ANISOU	988	CD	LYS	A	443	3995	5022	5481	230	-832	4	C
	ATOM	989	CE	LYS	A	443	17.658	21.570	-26.901	1.00	44.11		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	989	CE	LYS	A	443	4650	5761	6348	365	-863	48	C
	ATOM	990	NZ	LYS	A	443	16.692	21.975	-27.987	1.00	44.43		N
	ANISOU	990	NZ	LYS	A	443	4575	5926	6381	450	-1000	80	N
	ATOM	991	C	LYS	A	443	22.191	17.276	-26.526	1.00	23.86		C
5	ANISOU	991	C	LYS	A	443	2652	2965	3449	5	-617	-26	C
	ATOM	992	O	LYS	A	443	22.087	16.413	-25.659	1.00	22.54		O
	ANISOU	992	O	LYS	A	443	2510	2753	3301	-71	-554	-86	O
	ATOM	993	N	VAL	A	444	22.654	17.043	-27.761	1.00	23.85		N
	ANISOU	993	N	VAL	A	444	2695	3013	3353	17	-669	-5	N
10	ATOM	994	CA	VAL	A	444	23.079	15.707	-28.183	1.00	23.44		C
	ANISOU	994	CA	VAL	A	444	2724	2958	3226	-53	-656	-74	C
	ATOM	995	CB	VAL	A	444	23.278	15.593	-29.728	1.00	24.08		C
	ANISOU	995	CB	VAL	A	444	2823	3139	3186	-33	-728	-69	C
	ATOM	996	CG1	VAL	A	444	23.640	14.169	-30.129	1.00	23.87		C
15	ANISOU	996	CG1	VAL	A	444	2877	3100	3093	-104	-710	-171	C
	ATOM	997	CG2	VAL	A	444	22.026	16.031	-30.447	1.00	24.33		C
	ANISOU	997	CG2	VAL	A	444	2743	3297	3206	-20	-828	-70	C
	ATOM	998	C	VAL	A	444	24.327	15.306	-27.408	1.00	22.67		C
	ANISOU	998	C	VAL	A	444	2733	2748	3133	-54	-574	-66	C
20	ATOM	999	O	VAL	A	444	24.445	14.151	-26.968	1.00	24.02		O
	ANISOU	999	O	VAL	A	444	2963	2860	3303	-117	-534	-131	O
	ATOM	1000	N	LEU	A	445	25.228	16.270	-27.203	1.00	20.80		N
	ANISOU	1000	N	LEU	A	445	2516	2477	2910	16	-553	14	N
	ATOM	1001	CA	LEU	A	445	26.470	16.029	-26.491	1.00	19.22		C
25	ANISOU	1001	CA	LEU	A	445	2395	2194	2715	28	-491	22	C
	ATOM	1002	CB	LEU	A	445	27.355	17.284	-26.540	1.00	18.43		C
	ANISOU	1002	CB	LEU	A	445	2290	2081	2632	92	-482	107	C
	ATOM	1003	CG	LEU	A	445	28.698	17.335	-25.788	1.00	16.91		C
	ANISOU	1003	CG	LEU	A	445	2147	1823	2456	111	-430	119	C
30	ATOM	1004	CD1	LEU	A	445	29.714	16.292	-26.272	1.00	15.64		C
	ANISOU	1004	CD1	LEU	A	445	2050	1668	2225	114	-410	86	C
	ATOM	1005	CD2	LEU	A	445	29.301	18.716	-25.861	1.00	17.13		C
	ANISOU	1005	CD2	LEU	A	445	2149	1839	2522	148	-425	195	C
	ATOM	1006	C	LEU	A	445	26.221	15.634	-25.038	1.00	19.21		C
35	ANISOU	1006	C	LEU	A	445	2405	2118	2774	-10	-439	-11	C
	ATOM	1007	O	LEU	A	445	26.803	14.665	-24.554	1.00	20.41		O
	ANISOU	1007	O	LEU	A	445	2635	2211	2909	-32	-404	-39	O
	ATOM	1008	N	PHE	A	446	25.386	16.416	-24.350	1.00	18.58		N
	ANISOU	1008	N	PHE	A	446	2252	2045	2761	-8	-434	-3	N
40	ATOM	1009	CA	PHE	A	446	25.072	16.215	-22.948	1.00	17.93		C
	ANISOU	1009	CA	PHE	A	446	2174	1919	2722	-43	-376	-31	C
	ATOM	1010	CB	PHE	A	446	24.302	17.424	-22.372	1.00	18.01		C
	ANISOU	1010	CB	PHE	A	446	2089	1949	2806	-10	-370	-27	C
	ATOM	1011	CG	PHE	A	446	25.186	18.610	-21.966	1.00	17.40		C
45	ANISOU	1011	CG	PHE	A	446	2025	1826	2762	59	-363	15	C
	ATOM	1012	CD1	PHE	A	446	26.531	18.664	-22.307	1.00	16.25		C
	ANISOU	1012	CD1	PHE	A	446	1946	1647	2580	85	-369	55	C
	ATOM	1013	CE1	PHE	A	446	27.333	19.740	-21.958	1.00	16.45		C
	ANISOU	1013	CE1	PHE	A	446	1974	1630	2646	127	-361	84	C
50	ATOM	1014	CZ	PHE	A	446	26.800	20.806	-21.285	1.00	17.43		C
	ANISOU	1014	CZ	PHE	A	446	2046	1728	2849	153	-350	69	C
	ATOM	1015	CE2	PHE	A	446	25.447	20.791	-20.941	1.00	21.09		C
	ANISOU	1015	CE2	PHE	A	446	2441	2224	3346	147	-342	25	C
	ATOM	1016	CD2	PHE	A	446	24.639	19.701	-21.302	1.00	18.75		C
55	ANISOU	1016	CD2	PHE	A	446	2128	1987	3008	97	-348	2	C
	ATOM	1017	C	PHE	A	446	24.270	14.927	-22.727	1.00	18.39		C
	ANISOU	1017	C	PHE	A	446	2246	1974	2768	-139	-353	-89	C
	ATOM	1018	O	PHE	A	446	24.607	14.160	-21.843	1.00	18.65		O
	ANISOU	1018	O	PHE	A	446	2357	1942	2788	-177	-302	-95	O
60	ATOM	1019	N	GLN	A	447	23.240	14.694	-23.545	1.00	18.81		N
	ANISOU	1019	N	GLN	A	447	2227	2095	2824	-180	-394	-128	N
	ATOM	1020	CA	GLN	A	447	22.379	13.508	-23.457	1.00	19.67		C
	ANISOU	1020	CA	GLN	A	447	2333	2203	2937	-294	-374	-195	C
	ATOM	1021	CB	GLN	A	447	21.108	13.676	-24.326	1.00	19.41		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1021	CB	GLN	A	447	2168	2284	2922	-326	-437	-243	C
	ATOM	1022	CG	GLN	A	447	20.183	14.825	-23.916	1.00	20.98		C
	ANISOU	1022	CG	GLN	A	447	2223	2556	3190	-282	-442	-234	C
	ATOM	1023	CD	GLN	A	447	19.493	14.638	-22.559	1.00	23.91		C
5	ANISOU	1023	CD	GLN	A	447	2554	2915	3616	-353	-348	-267	C
	ATOM	1024	OE1	GLN	A	447	19.925	13.841	-21.725	1.00	20.75		O
	ANISOU	1024	OE1	GLN	A	447	2258	2433	3195	-418	-273	-264	O
	ATOM	1025	NE2	GLN	A	447	18.419	15.397	-22.335	1.00	26.39		N
10	ANISOU	1025	NE2	GLN	A	447	2715	3316	3997	-331	-350	-295	N
	ATOM	1026	C	GLN	A	447	23.084	12.169	-23.771	1.00	20.15		C
	ANISOU	1026	C	GLN	A	447	2524	2184	2950	-339	-364	-221	C
	ATOM	1027	O	GLN	A	447	22.659	11.125	-23.307	1.00	21.51		O
	ANISOU	1027	O	GLN	A	447	2739	2297	3136	-437	-322	-259	O
	ATOM	1028	N	ASN	A	448	24.170	12.210	-24.531	1.00	20.43		N
15	ANISOU	1028	N	ASN	A	448	2621	2207	2934	-265	-396	-202	N
	ATOM	1029	CA	ASN	A	448	24.872	11.006	-24.958	1.00	22.00		C
	ANISOU	1029	CA	ASN	A	448	2933	2333	3092	-282	-391	-242	C
	ATOM	1030	CB	ASN	A	448	25.032	10.974	-26.496	1.00	22.08		C
20	ANISOU	1030	CB	ASN	A	448	2930	2422	3036	-256	-453	-284	C
	ATOM	1031	CG	ASN	A	448	23.720	10.673	-27.209	1.00	23.31		C
	ANISOU	1031	CG	ASN	A	448	3009	2660	3190	-343	-504	-359	C
	ATOM	1032	OD1	ASN	A	448	23.280	9.533	-27.269	1.00	24.47		O
	ANISOU	1032	OD1	ASN	A	448	3195	2755	3349	-439	-495	-443	O
	ATOM	1033	ND2	ASN	A	448	23.088	11.703	-27.735	1.00	23.68		N
25	ANISOU	1033	ND2	ASN	A	448	2941	2828	3226	-310	-563	-330	N
	ATOM	1034	C	ASN	A	448	26.213	10.800	-24.295	1.00	21.90		C
	ANISOU	1034	C	ASN	A	448	3021	2230	3070	-213	-353	-198	C
	ATOM	1035	O	ASN	A	448	26.856	9.772	-24.513	1.00	23.82		O
30	ANISOU	1035	O	ASN	A	448	3361	2395	3293	-206	-344	-230	O
	ATOM	1036	N	TRP	A	449	26.606	11.740	-23.448	1.00	22.09		N
	ANISOU	1036	N	TRP	A	449	3019	2260	3112	-160	-334	-133	N
	ATOM	1037	CA	TRP	A	449	27.908	11.699	-22.745	1.00	22.12		C
	ANISOU	1037	CA	TRP	A	449	3095	2205	3105	-89	-313	-92	C
35	ATOM	1038	CB	TRP	A	449	28.184	13.060	-22.066	1.00	21.28		C
	ANISOU	1038	CB	TRP	A	449	2925	2138	3020	-41	-308	-42	C
	ATOM	1039	CG	TRP	A	449	29.534	13.158	-21.367	1.00	21.14		C
	ANISOU	1039	CG	TRP	A	449	2955	2087	2990	28	-301	-10	C
	ATOM	1040	CD1	TRP	A	449	29.786	12.971	-20.040	1.00	20.23		C
40	ANISOU	1040	CD1	TRP	A	449	2886	1931	2868	31	-278	10	C
	ATOM	1041	NE1	TRP	A	449	31.129	13.124	-19.779	1.00	19.99		N
	ANISOU	1041	NE1	TRP	A	449	2874	1899	2823	107	-295	28	N
	ATOM	1042	CE2	TRP	A	449	31.780	13.406	-20.950	1.00	20.43		C
	ANISOU	1042	CE2	TRP	A	449	2892	1990	2881	146	-314	19	C
45	ATOM	1043	CD2	TRP	A	449	30.800	13.453	-21.976	1.00	19.62		C
	ANISOU	1043	CD2	TRP	A	449	2757	1916	2781	100	-319	1	C
	ATOM	1044	CE3	TRP	A	449	31.205	13.729	-23.288	1.00	18.99		C
	ANISOU	1044	CE3	TRP	A	449	2646	1890	2681	125	-335	-3	C
	ATOM	1045	CZ3	TRP	A	449	32.565	13.992	-23.531	1.00	20.81		C
50	ANISOU	1045	CZ3	TRP	A	449	2865	2143	2899	187	-331	10	C
	ATOM	1046	CH2	TRP	A	449	33.515	13.972	-22.478	1.00	18.26		C
	ANISOU	1046	CH2	TRP	A	449	2554	1793	2591	230	-327	19	C
	ATOM	1047	CZ2	TRP	A	449	33.141	13.677	-21.188	1.00	18.76		C
45	ANISOU	1047	CZ2	TRP	A	449	2659	1805	2663	215	-327	25	C
	ATOM	1048	C	TRP	A	449	28.112	10.540	-21.757	1.00	22.76		C
55	ANISOU	1048	C	TRP	A	449	3285	2175	3186	-114	-275	-87	C
	ATOM	1049	O	TRP	A	449	29.253	10.071	-21.571	1.00	24.65		O
	ANISOU	1049	O	TRP	A	449	3599	2358	3407	-44	-278	-71	O
	ATOM	1050	N	GLY	A	450	27.057	10.056	-21.115	1.00	22.54		N
60	ANISOU	1050	N	GLY	A	450	3270	2117	3179	-211	-240	-94	N
	ATOM	1051	CA	GLY	A	450	27.269	9.021	-20.083	1.00	21.83		C
	ANISOU	1051	CA	GLY	A	450	3301	1913	3081	-237	-199	-61	C
	ATOM	1052	C	GLY	A	450	26.923	9.581	-18.715	1.00	21.43		C
	ANISOU	1052	C	GLY	A	450	3233	1890	3018	-259	-155	-11	C
	ATOM	1053	O	GLY	A	450	27.192	10.758	-18.436	1.00	20.21		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1053	O	GLY	A	450	3005	1815	2860	-202	-167	1	O
	ATOM	1054	N	ILE	A	451	26.284	8.751	-17.889	1.00	21.10		N
	ANISOU	1054	N	ILE	A	451	3262	1784	2970	-352	-98	14	N
	ATOM	1055	CA	ILE	A	451	25.818	9.147	-16.578	1.00	20.69		C
5	ANISOU	1055	CA	ILE	A	451	3202	1772	2887	-392	-39	54	C
	ATOM	1056	CB	ILE	A	451	24.237	9.164	-16.503	1.00	21.84		C
	ANISOU	1056	CB	ILE	A	451	3255	1973	3069	-531	24	13	C
	ATOM	1057	CG1	ILE	A	451	23.720	10.086	-15.389	1.00	20.59		C
10	ANISOU	1057	CG1	ILE	A	451	3025	1914	2885	-542	83	19	C
	ATOM	1058	CD1	ILE	A	451	23.706	11.556	-15.790	1.00	19.64		C
	ANISOU	1058	CD1	ILE	A	451	2765	1897	2800	-456	40	-28	C
	ATOM	1059	CG2	ILE	A	451	23.649	7.766	-16.361	1.00	22.44		C
	ANISOU	1059	CG2	ILE	A	451	3427	1942	3156	-663	78	26	C
	ATOM	1060	C	ILE	A	451	26.458	8.155	-15.621	1.00	22.07		C
15	ANISOU	1060	C	ILE	A	451	3539	1838	3008	-382	-18	134	C
	ATOM	1061	O	ILE	A	451	26.781	7.044	-16.013	1.00	22.36		O
	ANISOU	1061	O	ILE	A	451	3682	1753	3060	-385	-30	146	O
	ATOM	1062	N	GLU	A	452	26.683	8.553	-14.378	1.00	22.05		N
20	ANISOU	1062	N	GLU	A	452	3565	1877	2938	-359	8	187	N
	ATOM	1063	CA	GLU	A	452	27.397	7.691	-13.451	1.00	23.30		C
	ANISOU	1063	CA	GLU	A	452	3882	1946	3025	-326	10	280	C
	ATOM	1064	CB	GLU	A	452	28.909	8.005	-13.455	1.00	22.10		C
	ANISOU	1064	CB	GLU	A	452	3748	1802	2846	-164	-79	296	C
	ATOM	1065	CG	GLU	A	452	29.322	9.401	-12.931	1.00	21.20		C
25	ANISOU	1065	CG	GLU	A	452	3532	1826	2696	-103	-103	268	C
	ATOM	1066	CD	GLU	A	452	30.841	9.593	-12.871	1.00	22.68		C
	ANISOU	1066	CD	GLU	A	452	3732	2026	2861	37	-190	281	C
	ATOM	1067	OE1	GLU	A	452	31.592	8.596	-12.982	1.00	27.30		O
30	ANISOU	1067	OE1	GLU	A	452	4414	2519	3440	105	-229	328	O
	ATOM	1068	OE2	GLU	A	452	31.303	10.728	-12.689	1.00	23.21		O
	ANISOU	1068	OE2	GLU	A	452	3706	2189	2922	81	-220	240	O
	ATOM	1069	C	GLU	A	452	26.827	7.884	-12.057	1.00	24.23		C
	ANISOU	1069	C	GLU	A	452	4026	2124	3057	-392	85	331	C
	ATOM	1070	O	GLU	A	452	26.298	8.943	-11.755	1.00	22.41		O
35	ANISOU	1070	O	GLU	A	452	3678	2018	2819	-412	115	279	O
	ATOM	1071	N	HIS	A	453	26.937	6.859	-11.220	1.00	26.35		N
	ANISOU	1071	N	HIS	A	453	4453	2300	3257	-423	117	434	N
	ATOM	1072	CA	HIS	A	453	26.636	7.037	-9.814	1.00	29.05		C
40	ANISOU	1072	CA	HIS	A	453	4843	2716	3480	-466	183	497	C
	ATOM	1073	CB	HIS	A	453	26.420	5.688	-9.121	1.00	31.54		C
	ANISOU	1073	CB	HIS	A	453	5346	2900	3737	-546	242	627	C
	ATOM	1074	CG	HIS	A	453	25.586	5.793	-7.881	1.00	37.83		C
	ANISOU	1074	CG	HIS	A	453	6167	3786	4420	-660	356	679	C
	ATOM	1075	ND1	HIS	A	453	26.069	5.479	-6.623	1.00	42.46		N
45	ANISOU	1075	ND1	HIS	A	453	6901	4383	4849	-627	364	804	N
	ATOM	1076	CE1	HIS	A	453	25.122	5.697	-5.727	1.00	45.28		C
	ANISOU	1076	CE1	HIS	A	453	7243	4847	5115	-752	487	817	C
	ATOM	1077	NE2	HIS	A	453	24.054	6.168	-6.351	1.00	44.67		N
50	ANISOU	1077	NE2	HIS	A	453	6999	4830	5145	-855	557	700	N
	ATOM	1078	CD2	HIS	A	453	24.320	6.241	-7.697	1.00	40.72		C
	ANISOU	1078	CD2	HIS	A	453	6418	4258	4796	-798	469	618	C
	ATOM	1079	C	HIS	A	453	27.767	7.838	-9.144	1.00	28.67		C
	ANISOU	1079	C	HIS	A	453	4790	2760	3345	-324	106	504	C
	ATOM	1080	O	HIS	A	453	28.940	7.782	-9.559	1.00	28.14		O
55	ANISOU	1080	O	HIS	A	453	4741	2654	3297	-194	5	509	O
	ATOM	1081	N	ILE	A	454	27.423	8.618	-8.132	1.00	29.08		N
	ANISOU	1081	N	ILE	A	454	4802	2945	3304	-350	154	488	N
	ATOM	1082	CA	ILE	A	454	28.448	9.403	-7.440	1.00	28.83		C
	ANISOU	1082	CA	ILE	A	454	4760	3009	3183	-232	78	475	C
60	ATOM	1083	CB	ILE	A	454	28.400	10.945	-7.822	1.00	27.51		C
	ANISOU	1083	CB	ILE	A	454	4412	2956	3086	-201	60	334	C
	ATOM	1084	CG1	ILE	A	454	27.220	11.666	-7.174	1.00	27.31		C
	ANISOU	1084	CG1	ILE	A	454	4309	3040	3029	-292	168	268	C
	ATOM	1085	CD1	ILE	A	454	27.215	13.162	-7.375	1.00	25.56		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1085	CD1	ILE	A	454	3937	2905	2872	-246	148	138	C
	ATOM	1086	CG2	ILE	A	454	28.360	11.131	-9.313	1.00	26.45		C
	ANISOU	1086	CG2	ILE	A	454	4180	2762	3106	-186	25	277	C
	ATOM	1087	C	ILE	A	454	28.381	9.208	-5.937	1.00	30.68		C
5	ANISOU	1087	C	ILE	A	454	5104	3314	3238	-258	123	553	C
	ATOM	1088	O	ILE	A	454	27.341	8.876	-5.395	1.00	32.05		O
	ANISOU	1088	O	ILE	A	454	5312	3505	3359	-381	239	587	O
	ATOM	1089	N	ASP	A	455	29.506	9.410	-5.269	1.00	32.23		N
10	ANISOU	1089	N	ASP	A	455	5348	3565	3333	-144	29	580	N
	ATOM	1090	CA	ASP	A	455	29.570	9.458	-3.811	1.00	34.84		C
	ANISOU	1090	CA	ASP	A	455	5769	4006	3465	-149	49	635	C
	ATOM	1091	CB	ASP	A	455	30.984	9.101	-3.357	1.00	36.54		C
	ANISOU	1091	CB	ASP	A	455	6075	4220	3587	-3	-92	712	C
	ATOM	1092	CG	ASP	A	455	31.449	7.732	-3.876	1.00	40.61		C
15	ANISOU	1092	CG	ASP	A	455	6722	4552	4157	51	-140	845	C
	ATOM	1093	OD1	ASP	A	455	30.664	6.746	-3.860	1.00	45.61		O
	ANISOU	1093	OD1	ASP	A	455	7471	5067	4792	-46	-50	945	O
	ATOM	1094	OD2	ASP	A	455	32.617	7.641	-4.302	1.00	44.13		O
20	ANISOU	1094	OD2	ASP	A	455	7150	4967	4651	190	-265	841	O
	ATOM	1095	C	ASP	A	455	29.193	10.845	-3.264	1.00	34.43		C
	ANISOU	1095	C	ASP	A	455	5588	4124	3368	-173	89	493	C
	ATOM	1096	O	ASP	A	455	29.396	11.863	-3.913	1.00	33.12		O
	ANISOU	1096	O	ASP	A	455	5280	3987	3318	-134	49	366	O
	ATOM	1097	N	ASN	A	456	28.616	10.872	-2.073	1.00	36.47		N
25	ANISOU	1097	N	ASN	A	456	5907	4491	3459	-241	178	516	N
	ATOM	1098	CA	ASN	A	456	28.410	12.114	-1.357	1.00	36.78		C
	ANISOU	1098	CA	ASN	A	456	5852	4697	3426	-245	209	376	C
	ATOM	1099	CB	ASN	A	456	27.498	11.878	-0.155	1.00	38.76		C
30	ANISOU	1099	CB	ASN	A	456	6179	5058	3489	-349	349	415	C
	ATOM	1100	CG	ASN	A	456	26.107	11.425	-0.555	1.00	39.81		C
	ANISOU	1100	CG	ASN	A	456	6277	5142	3709	-491	505	433	C
	ATOM	1101	OD1	ASN	A	456	25.486	11.995	-1.468	1.00	37.31		O
	ANISOU	1101	OD1	ASN	A	456	5803	4798	3573	-513	535	321	O
	ATOM	1102	ND2	ASN	A	456	25.598	10.397	0.136	1.00	39.68		N
35	ANISOU	1102	ND2	ASN	A	456	6402	5117	3558	-591	604	578	N
	ATOM	1103	C	ASN	A	456	29.751	12.683	-0.903	1.00	36.67		C
	ANISOU	1103	C	ASN	A	456	5840	4760	3333	-121	63	333	C
	ATOM	1104	O	ASN	A	456	30.413	12.110	-0.036	1.00	37.97		O
	ANISOU	1104	O	ASN	A	456	6134	4970	3323	-74	2	435	O
40	ATOM	1105	N	VAL	A	457	30.161	13.779	-1.535	1.00	35.06		N
	ANISOU	1105	N	VAL	A	457	5490	4565	3266	-71	2	190	N
	ATOM	1106	CA	VAL	A	457	31.320	14.556	-1.101	1.00	34.96		C
	ANISOU	1106	CA	VAL	A	457	5441	4642	3201	18	-121	106	C
	ATOM	1107	CB	VAL	A	457	32.418	14.572	-2.196	1.00	33.72		C
45	ANISOU	1107	CB	VAL	A	457	5219	4392	3202	106	-247	107	C
	ATOM	1108	CG1	VAL	A	457	33.621	15.370	-1.740	1.00	33.63		C
	ANISOU	1108	CG1	VAL	A	457	5151	4481	3146	179	-372	14	C
	ATOM	1109	CG2	VAL	A	457	32.816	13.127	-2.554	1.00	35.71		C
50	ANISOU	1109	CG2	VAL	A	457	5589	4533	3446	151	-290	281	C
	ATOM	1110	C	VAL	A	457	30.848	15.978	-0.779	1.00	34.15		C
	ANISOU	1110	C	VAL	A	457	5219	4633	3121	-16	-68	-85	C
	ATOM	1111	O	VAL	A	457	30.251	16.622	-1.639	1.00	32.78		O
	ANISOU	1111	O	VAL	A	457	4932	4395	3126	-42	-17	-167	O
	ATOM	1112	N	MSE	A	458	31.088	16.452	0.451	1.00	35.25		N
55	ANISOU	1112	N	MSE	A	458	5390	4923	3079	-11	-81	-157	N
	ATOM	1113	CA	MSE	A	458	30.699	17.815	0.846	1.00	34.91		C
	ANISOU	1113	CA	MSE	A	458	5246	4964	3055	-34	-32	-361	C
	ATOM	1114	CB	MSE	A	458	30.871	18.047	2.353	1.00	37.58		C
	ANISOU	1114	CB	MSE	A	458	5655	5487	3136	-39	-33	-424	C
60	ATOM	1115	CG	MSE	A	458	30.252	19.378	2.825	1.00	36.62		C
	ANISOU	1115	CG	MSE	A	458	5440	5445	3030	-71	49	-651	C
	ATOM	1116	SE	MSE	A	458	30.457	19.706	4.676	0.90	40.81		SE
	ANISOU	1116	SE	MSE	A	458	6058	6227	3221	-80	51	-762	SE
	ATOM	1117	CE	MSE	A	458	29.473	21.279	4.926	1.00	43.27		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1117	CE	MSE	A	458	6238	6576	3626	-113	185	-1053	C
	ATOM	1118	C	MSE	A	458	31.466	18.877	0.071	1.00	33.44		C
	ANISOU	1118	C	MSE	A	458	4933	4714	3057	13	-127	-485	C
	ATOM	1119	O	MSE	A	458	32.657	18.724	-0.155	1.00	34.08		O
5	ANISOU	1119	O	MSE	A	458	5016	4783	3152	71	-259	-451	O
	ATOM	1120	N	GLY	A	459	30.783	19.943	-0.342	1.00	32.49		N
	ANISOU	1120	N	GLY	A	459	4703	4553	3090	-12	-57	-623	N
	ATOM	1121	CA	GLY	A	459	31.402	21.007	-1.139	1.00	31.36		C
10	ANISOU	1121	CA	GLY	A	459	4449	4324	3141	18	-129	-728	C
	ATOM	1122	C	GLY	A	459	31.266	20.849	-2.641	1.00	30.19		C
	ANISOU	1122	C	GLY	A	459	4243	4025	3204	28	-132	-646	C
	ATOM	1123	O	GLY	A	459	31.810	21.635	-3.395	1.00	28.91		O
	ANISOU	1123	O	GLY	A	459	4001	3786	3198	47	-186	-701	O
	ATOM	1124	N	MSE	A	460	30.504	19.844	-3.079	1.00	30.67		N
15	ANISOU	1124	N	MSE	A	460	4344	4046	3265	4	-68	-519	N
	ATOM	1125	CA	MSE	A	460	30.479	19.418	-4.475	1.00	30.71		C
	ANISOU	1125	CA	MSE	A	460	4316	3927	3427	14	-86	-427	C
	ATOM	1126	CB	MSE	A	460	31.612	18.422	-4.661	1.00	30.18		C
20	ANISOU	1126	CB	MSE	A	460	4321	3842	3305	58	-185	-308	C
	ATOM	1127	CG	MSE	A	460	32.091	18.176	-6.021	1.00	31.46		C
	ANISOU	1127	CG	MSE	A	460	4442	3899	3611	88	-234	-249	C
	ATOM	1128	SE	MSE	A	460	33.476	16.771	-5.852	0.90	37.35		SE
	ANISOU	1128	SE	MSE	A	460	5293	4649	4248	165	-348	-114	SE
	ATOM	1129	CE	MSE	A	460	34.825	17.837	-4.917	1.00	35.43		C
25	ANISOU	1129	CE	MSE	A	460	4991	4531	3939	209	-461	-235	C
	ATOM	1130	C	MSE	A	460	29.152	18.715	-4.753	1.00	28.46		C
	ANISOU	1130	C	MSE	A	460	4042	3618	3154	-41	24	-362	C
	ATOM	1131	O	MSE	A	460	28.575	18.079	-3.850	1.00	28.50		O
30	ANISOU	1131	O	MSE	A	460	4120	3694	3015	-88	97	-325	O
	ATOM	1132	N	VAL	A	461	28.671	18.840	-5.989	1.00	25.91		N
	ANISOU	1132	N	VAL	A	461	3643	3204	2995	-44	34	-348	N
	ATOM	1133	CA	VAL	A	461	27.446	18.159	-6.436	1.00	25.77		C
	ANISOU	1133	CA	VAL	A	461	3614	3165	3014	-103	121	-296	C
	ATOM	1134	CB	VAL	A	461	26.129	19.057	-6.389	1.00	26.21		C
35	ANISOU	1134	CB	VAL	A	461	3552	3258	3149	-125	217	-406	C
	ATOM	1135	CG1	VAL	A	461	25.667	19.320	-4.974	1.00	28.85		C
	ANISOU	1135	CG1	VAL	A	461	3904	3710	3347	-154	306	-485	C
	ATOM	1136	CG2	VAL	A	461	26.293	20.405	-7.139	1.00	25.60		C
40	ANISOU	1136	CG2	VAL	A	461	3368	3122	3236	-60	167	-496	C
	ATOM	1137	C	VAL	A	461	27.621	17.605	-7.849	1.00	24.27		C
	ANISOU	1137	C	VAL	A	461	3411	2873	2939	-92	69	-216	C
	ATOM	1138	O	VAL	A	461	28.436	18.099	-8.633	1.00	22.83		O
	ANISOU	1138	O	VAL	A	461	3191	2640	2843	-37	-10	-224	O
	ATOM	1139	N	GLY	A	462	26.837	16.583	-8.174	1.00	23.87		N
45	ANISOU	1139	N	GLY	A	462	3388	2795	2886	-154	122	-147	N
	ATOM	1140	CA	GLY	A	462	26.661	16.169	-9.564	1.00	21.99		C
	ANISOU	1140	CA	GLY	A	462	3116	2478	2763	-158	90	-107	C
	ATOM	1141	C	GLY	A	462	25.731	17.096	-10.366	1.00	21.21		C
50	ANISOU	1141	C	GLY	A	462	2876	2387	2797	-156	109	-179	C
	ATOM	1142	O	GLY	A	462	25.023	17.917	-9.803	1.00	21.23		O
	ANISOU	1142	O	GLY	A	462	2805	2448	2813	-158	166	-260	O
	ATOM	1143	N	VAL	A	463	25.746	16.937	-11.686	1.00	19.62		N
	ANISOU	1143	N	VAL	A	463	2639	2130	2686	-142	58	-151	N
	ATOM	1144	CA	VAL	A	463	24.947	17.731	-12.581	1.00	19.75		C
55	ANISOU	1144	CA	VAL	A	463	2533	2153	2820	-125	52	-195	C
	ATOM	1145	CB	VAL	A	463	25.767	18.971	-13.157	1.00	19.50		C
	ANISOU	1145	CB	VAL	A	463	2461	2085	2865	-37	-19	-215	C
	ATOM	1146	CG1	VAL	A	463	26.906	18.526	-14.079	1.00	18.45		C
60	ANISOU	1146	CG1	VAL	A	463	2382	1899	2729	-11	-93	-148	C
	ATOM	1147	CG2	VAL	A	463	24.903	19.884	-13.892	1.00	20.87		C
	ANISOU	1147	CG2	VAL	A	463	2520	2259	3151	-5	-26	-248	C
	ATOM	1148	C	VAL	A	463	24.402	16.803	-13.675	1.00	19.21		C
	ANISOU	1148	C	VAL	A	463	2454	2061	2785	-173	38	-153	C
	ATOM	1149	O	VAL	A	463	25.117	15.975	-14.245	1.00	17.34		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1149	O	VAL	A	463	2295	1770	2523	-173	-6	-98	O
	ATOM	1150	N	LEU	A	464	23.113	16.938	-13.952	1.00	20.10		N
	ANISOU	1150	N	LEU	A	464	2460	2221	2955	-211	75	-193	N
	ATOM	1151	CA	LEU	A	464	22.451	16.147	-14.993	1.00	20.06		C
5	ANISOU	1151	CA	LEU	A	464	2423	2214	2986	-267	55	-179	C
	ATOM	1152	CB	LEU	A	464	20.978	15.896	-14.611	1.00	20.50		C
	ANISOU	1152	CB	LEU	A	464	2379	2345	3065	-356	136	-228	C
	ATOM	1153	CG	LEU	A	464	20.640	15.224	-13.271	1.00	20.46		C
	ANISOU	1153	CG	LEU	A	464	2432	2366	2978	-451	249	-224	C
10	ATOM	1154	CD1	LEU	A	464	19.137	15.006	-13.119	1.00	21.72		C
	ANISOU	1154	CD1	LEU	A	464	2461	2614	3178	-551	334	-280	C
	ATOM	1155	CD2	LEU	A	464	21.359	13.932	-13.071	1.00	18.35		C
	ANISOU	1155	CD2	LEU	A	464	2330	2012	2629	-510	252	-143	C
	ATOM	1156	C	LEU	A	464	22.547	16.908	-16.326	1.00	19.95		C
15	ANISOU	1156	C	LEU	A	464	2335	2196	3048	-190	-34	-178	C
	ATOM	1157	O	LEU	A	464	22.865	18.083	-16.323	1.00	19.98		O
	ANISOU	1157	O	LEU	A	464	2302	2195	3096	-107	-60	-189	O
	ATOM	1158	N	PRO	A	465	22.308	16.229	-17.470	1.00	20.59		N
	ANISOU	1158	N	PRO	A	465	2409	2275	3140	-222	-82	-163	N
20	ATOM	1159	CA	PRO	A	465	22.309	16.897	-18.783	1.00	21.07		C
	ANISOU	1159	CA	PRO	A	465	2405	2352	3247	-154	-167	-151	C
	ATOM	1160	CB	PRO	A	465	21.839	15.803	-19.740	1.00	21.49		C
	ANISOU	1160	CB	PRO	A	465	2459	2425	3283	-226	-198	-161	C
	ATOM	1161	CG	PRO	A	465	22.268	14.552	-19.122	1.00	20.52		C
25	ANISOU	1161	CG	PRO	A	465	2456	2236	3104	-304	-147	-152	C
	ATOM	1162	CD	PRO	A	465	22.139	14.772	-17.616	1.00	21.10		C
	ANISOU	1162	CD	PRO	A	465	2542	2310	3163	-323	-62	-154	C
	ATOM	1163	C	PRO	A	465	21.445	18.147	-18.919	1.00	22.58		C
	ANISOU	1163	C	PRO	A	465	2460	2598	3522	-89	-184	-180	C
30	ATOM	1164	O	PRO	A	465	21.848	19.088	-19.645	1.00	22.93		O
	ANISOU	1164	O	PRO	A	465	2489	2623	3600	-1	-247	-143	O
	ATOM	1165	N	ASP	A	466	20.288	18.182	-18.246	1.00	23.41		N
	ANISOU	1165	N	ASP	A	466	2467	2765	3663	-127	-125	-240	N
	ATOM	1166	CA	ASP	A	466	19.484	19.423	-18.181	1.00	24.48		C
35	ANISOU	1166	CA	ASP	A	466	2467	2944	3890	-41	-132	-280	C
	ATOM	1167	CB	ASP	A	466	17.987	19.137	-17.935	1.00	25.77		C
	ANISOU	1167	CB	ASP	A	466	2481	3214	4096	-97	-86	-353	C
	ATOM	1168	CG	ASP	A	466	17.711	18.432	-16.596	1.00	27.78		C
	ANISOU	1168	CG	ASP	A	466	2762	3494	4300	-205	43	-396	C
40	ATOM	1169	OD1	ASP	A	466	18.616	18.350	-15.739	1.00	29.82		O
	ANISOU	1169	OD1	ASP	A	466	3148	3692	4490	-212	88	-374	O
	ATOM	1170	OD2	ASP	A	466	16.564	17.962	-16.383	1.00	29.01		O
	ANISOU	1170	OD2	ASP	A	466	2805	3739	4477	-288	100	-451	O
	ATOM	1171	C	ASP	A	466	20.026	20.476	-17.185	1.00	24.43		C
45	ANISOU	1171	C	ASP	A	466	2490	2886	3906	30	-90	-302	C
	ATOM	1172	O	ASP	A	466	19.377	21.498	-16.948	1.00	24.93		O
	ANISOU	1172	O	ASP	A	466	2453	2967	4054	106	-80	-352	O
	ATOM	1173	N	MSE	A	467	21.206	20.210	-16.610	1.00	24.00		N
	ANISOU	1173	N	MSE	A	467	2568	2770	3780	9	-70	-275	N
50	ATOM	1174	CA	MSE	A	467	21.905	21.152	-15.710	1.00	24.32		C
	ANISOU	1174	CA	MSE	A	467	2648	2764	3829	63	-45	-305	C
	ATOM	1175	CB	MSE	A	467	22.058	22.557	-16.331	1.00	24.10		C
	ANISOU	1175	CB	MSE	A	467	2574	2675	3907	171	-105	-297	C
	ATOM	1176	CG	MSE	A	467	23.071	22.602	-17.472	1.00	23.28		C
55	ANISOU	1176	CG	MSE	A	467	2537	2512	3797	191	-185	-203	C
	ATOM	1177	SE	MSE	A	467	24.823	21.862	-16.977	0.90	26.00		SE
	ANISOU	1177	SE	MSE	A	467	3030	2817	4031	137	-179	-170	SE
	ATOM	1178	CE	MSE	A	467	25.294	23.125	-15.564	1.00	22.62		C
	ANISOU	1178	CE	MSE	A	467	2609	2344	3643	172	-138	-259	C
60	ATOM	1179	C	MSE	A	467	21.320	21.226	-14.313	1.00	25.38		C
	ANISOU	1179	C	MSE	A	467	2754	2951	3936	34	55	-390	C
	ATOM	1180	O	MSE	A	467	21.736	22.059	-13.507	1.00	26.95		O
	ANISOU	1180	O	MSE	A	467	2972	3126	4141	78	79	-444	O
	ATOM	1181	N	THR	A	468	20.388	20.320	-14.021	1.00	25.59		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1181	N	THR	A	468	2740	3056	3927	-51	119	-408	N
	ATOM	1182	CA	THR	A	468	19.830	20.146	-12.684	1.00	25.97		C
	ANISOU	1182	CA	THR	A	468	2773	3176	3917	-106	235	-475	C
	ATOM	1183	CB	THR	A	468	18.559	19.255	-12.705	1.00	27.06		C
5	ANISOU	1183	CB	THR	A	468	2822	3405	4054	-209	304	-491	C
	ATOM	1184	OG1	THR	A	468	17.500	19.937	-13.395	1.00	30.40		O
	ANISOU	1184	OG1	THR	A	468	3070	3880	4602	-149	278	-546	O
	ATOM	1185	CG2	THR	A	468	18.066	18.937	-11.284	1.00	30.00		C
10	ANISOU	1185	CG2	THR	A	468	3200	3861	4340	-288	444	-541	C
	ATOM	1186	C	THR	A	468	20.882	19.520	-11.783	1.00	24.91		C
	ANISOU	1186	C	THR	A	468	2799	3016	3650	-153	260	-435	C
	ATOM	1187	O	THR	A	468	21.500	18.510	-12.160	1.00	23.50		O
	ANISOU	1187	O	THR	A	468	2721	2793	3415	-201	223	-351	O
	ATOM	1188	N	PRO	A	469	21.109	20.120	-10.592	1.00	25.19		N
15	ANISOU	1188	N	PRO	A	469	2858	3082	3631	-131	315	-501	N
	ATOM	1189	CA	PRO	A	469	22.089	19.534	-9.669	1.00	24.77		C
	ANISOU	1189	CA	PRO	A	469	2952	3026	3434	-167	326	-461	C
	ATOM	1190	CB	PRO	A	469	22.210	20.588	-8.551	1.00	24.83		C
20	ANISOU	1190	CB	PRO	A	469	2946	3078	3409	-120	369	-571	C
	ATOM	1191	CG	PRO	A	469	20.960	21.302	-8.583	1.00	26.70		C
	ANISOU	1191	CG	PRO	A	469	3035	3365	3743	-94	434	-668	C
	ATOM	1192	CD	PRO	A	469	20.505	21.340	-10.031	1.00	25.78		C
	ANISOU	1192	CD	PRO	A	469	2830	3197	3768	-64	364	-622	C
	ATOM	1193	C	PRO	A	469	21.549	18.221	-9.098	1.00	25.27		C
25	ANISOU	1193	C	PRO	A	469	3071	3142	3390	-285	412	-407	C
	ATOM	1194	O	PRO	A	469	20.345	18.033	-8.949	1.00	25.16		O
	ANISOU	1194	O	PRO	A	469	2965	3199	3396	-348	501	-444	O
	ATOM	1195	N	SER	A	470	22.455	17.313	-8.793	1.00	24.98		N
30	ANISOU	1195	N	SER	A	470	3182	3064	3245	-314	385	-316	N
	ATOM	1196	CA	SER	A	470	22.073	16.051	-8.215	1.00	25.82		C
	ANISOU	1196	CA	SER	A	470	3375	3189	3248	-425	463	-243	C
	ATOM	1197	CB	SER	A	470	21.885	14.999	-9.301	1.00	25.56		C
	ANISOU	1197	CB	SER	A	470	3359	3073	3278	-482	430	-169	C
	ATOM	1198	OG	SER	A	470	21.558	13.741	-8.711	1.00	26.57		O
35	ANISOU	1198	OG	SER	A	470	3590	3189	3315	-600	509	-90	O
	ATOM	1199	C	SER	A	470	23.142	15.585	-7.255	1.00	25.97		C
	ANISOU	1199	C	SER	A	470	3556	3199	3112	-413	444	-175	C
	ATOM	1200	O	SER	A	470	24.333	15.726	-7.510	1.00	24.16		O
40	ANISOU	1200	O	SER	A	470	3385	2915	2880	-333	339	-148	O
	ATOM	1201	N	THR	A	471	22.695	15.018	-6.149	1.00	27.91		N
	ANISOU	1201	N	THR	A	471	3869	3513	3224	-495	547	-143	N
	ATOM	1202	CA	THR	A	471	23.597	14.451	-5.161	1.00	29.38		C
	ANISOU	1202	CA	THR	A	471	4221	3704	3238	-487	529	-57	C
	ATOM	1203	CB	THR	A	471	23.171	14.821	-3.704	1.00	30.73		C
45	ANISOU	1203	CB	THR	A	471	4408	4020	3246	-523	638	-106	C
	ATOM	1204	OG1	THR	A	471	21.791	14.497	-3.513	1.00	33.75		O
	ANISOU	1204	OG1	THR	A	471	4724	4465	3636	-644	787	-120	O
	ATOM	1205	CG2	THR	A	471	23.366	16.340	-3.446	1.00	32.23		C
50	ANISOU	1205	CG2	THR	A	471	4493	4284	3469	-432	612	-268	C
	ATOM	1206	C	THR	A	471	23.718	12.925	-5.361	1.00	29.30		C
	ANISOU	1206	C	THR	A	471	4350	3591	3193	-555	530	94	C
	ATOM	1207	O	THR	A	471	24.416	12.246	-4.615	1.00	30.80		O
	ANISOU	1207	O	THR	A	471	4695	3763	3244	-545	509	197	O
	ATOM	1208	N	GLU	A	472	23.057	12.397	-6.388	1.00	28.16		N
55	ANISOU	1208	N	GLU	A	472	4152	3371	3176	-619	544	105	N
	ATOM	1209	CA	GLU	A	472	22.982	10.945	-6.598	1.00	28.80		C
	ANISOU	1209	CA	GLU	A	472	4360	3336	3246	-706	563	226	C
	ATOM	1210	CB	GLU	A	472	21.524	10.456	-6.513	1.00	30.19		C
	ANISOU	1210	CB	GLU	A	472	4475	3546	3451	-873	704	218	C
60	ATOM	1211	CG	GLU	A	472	20.831	10.674	-5.152	1.00	34.77		C
	ANISOU	1211	CG	GLU	A	472	5053	4266	3892	-953	848	212	C
	ATOM	1212	CD	GLU	A	472	19.477	11.392	-5.276	1.00	40.82		C
	ANISOU	1212	CD	GLU	A	472	5606	5160	4744	-1019	952	79	C
	ATOM	1213	OE1	GLU	A	472	18.438	10.760	-5.008	1.00	43.43		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1213	OE1	GLU	A	472	5909	5526	5067	-1176	1085	99	O
	ATOM	1214	OE2	GLU	A	472	19.441	12.599	-5.641	1.00	42.85		O
	ANISOU	1214	OE2	GLU	A	472	5717	5482	5083	-914	904	-45	O
	ATOM	1215	C	GLU	A	472	23.616	10.535	-7.934	1.00	26.87		C
5	ANISOU	1215	C	GLU	A	472	4128	2959	3124	-647	448	242	C
	ATOM	1216	O	GLU	A	472	24.293	9.534	-8.021	1.00	26.79		O
	ANISOU	1216	O	GLU	A	472	4261	2832	3087	-633	404	339	O
	ATOM	1217	N	MSE	A	473	23.414	11.334	-8.971	1.00	25.30		N
	ANISOU	1217	N	MSE	A	473	3780	2780	3052	-603	399	145	N
10	ATOM	1218	CA	MSE	A	473	23.895	10.993	-10.300	1.00	23.42		C
	ANISOU	1218	CA	MSE	A	473	3540	2442	2915	-559	305	147	C
	ATOM	1219	CB	MSE	A	473	22.729	10.564	-11.227	1.00	24.39		C
	ANISOU	1219	CB	MSE	A	473	3575	2550	3143	-667	341	105	C
	ATOM	1220	CG	MSE	A	473	21.879	9.393	-10.755	1.00	22.32		C
15	ANISOU	1220	CG	MSE	A	473	3383	2245	2854	-828	445	157	C
	ATOM	1221	SE	MSE	A	473	22.758	7.582	-10.747	0.90	27.95		SE
	ANISOU	1221	SE	MSE	A	473	4356	2738	3528	-855	419	296	SE
	ATOM	1222	CE	MSE	A	473	23.101	7.399	-12.636	1.00	20.44		C
	ANISOU	1222	CE	MSE	A	473	3347	1704	2713	-798	301	216	C
20	ATOM	1223	C	MSE	A	473	24.575	12.199	-10.916	1.00	22.43		C
	ANISOU	1223	C	MSE	A	473	3320	2354	2848	-433	214	81	C
	ATOM	1224	O	MSE	A	473	24.300	13.376	-10.550	1.00	22.03		O
	ANISOU	1224	O	MSE	A	473	3168	2395	2807	-401	232	9	O
	ATOM	1225	N	SER	A	474	25.430	11.929	-11.891	1.00	20.89		N
25	ANISOU	1225	N	SER	A	474	3156	2083	2699	-366	125	99	N
	ATOM	1226	CA	SER	A	474	26.072	13.028	-12.627	1.00	19.23		C
	ANISOU	1226	CA	SER	A	474	2857	1900	2551	-266	47	49	C
	ATOM	1227	CB	SER	A	474	27.291	13.535	-11.840	1.00	18.96		C
	ANISOU	1227	CB	SER	A	474	2868	1886	2448	-177	2	61	C
30	ATOM	1228	OG	SER	A	474	27.784	14.746	-12.377	1.00	16.50		O
	ANISOU	1228	OG	SER	A	474	2462	1603	2203	-107	-50	7	O
	ATOM	1229	C	SER	A	474	26.509	12.576	-14.024	1.00	18.90		C
	ANISOU	1229	C	SER	A	474	2818	1792	2572	-236	-19	56	C
	ATOM	1230	O	SER	A	474	26.803	11.396	-14.234	1.00	17.99		O
35	ANISOU	1230	O	SER	A	474	2805	1592	2438	-253	-27	99	O
	ATOM	1231	N	MSE	A	475	26.581	13.518	-14.969	1.00	18.62		N
	ANISOU	1231	N	MSE	A	475	2681	1790	2605	-186	-65	13	N
	ATOM	1232	CA	MSE	A	475	27.294	13.281	-16.212	1.00	19.11		C
	ANISOU	1232	CA	MSE	A	475	2751	1815	2697	-138	-129	20	C
40	ATOM	1233	CB	MSE	A	475	27.395	14.576	-17.035	1.00	19.24		C
	ANISOU	1233	CB	MSE	A	475	2658	1880	2771	-84	-169	-7	C
	ATOM	1234	CG	MSE	A	475	26.060	14.982	-17.637	1.00	19.93		C
	ANISOU	1234	CG	MSE	A	475	2644	2015	2915	-127	-159	-41	C
	ATOM	1235	SE	MSE	A	475	26.115	16.409	-18.957	0.90	21.44		SE
45	ANISOU	1235	SE	MSE	A	475	2727	2246	3173	-52	-225	-41	SE
	ATOM	1236	CE	MSE	A	475	26.632	17.884	-17.856	1.00	18.53		C
	ANISOU	1236	CE	MSE	A	475	2330	1873	2838	6	-208	-53	C
	ATOM	1237	C	MSE	A	475	28.676	12.781	-15.867	1.00	18.97		C
	ANISOU	1237	C	MSE	A	475	2830	1750	2629	-68	-163	61	C
50	ATOM	1238	O	MSE	A	475	29.338	13.335	-14.995	1.00	18.37		O
	ANISOU	1238	O	MSE	A	475	2759	1703	2518	-23	-174	68	O
	ATOM	1239	N	ARG	A	476	29.102	11.717	-16.541	1.00	19.82		N
	ANISOU	1239	N	ARG	A	476	3007	1787	2736	-55	-185	76	N
	ATOM	1240	CA	ARG	A	476	30.380	11.052	-16.273	1.00	20.30		C
55	ANISOU	1240	CA	ARG	A	476	3158	1796	2760	27	-221	112	C
	ATOM	1241	CB	ARG	A	476	30.630	10.005	-17.344	1.00	20.86		C
	ANISOU	1241	CB	ARG	A	476	3281	1790	2855	42	-238	98	C
	ATOM	1242	CG	ARG	A	476	32.003	9.337	-17.254	1.00	24.78		C
	ANISOU	1242	CG	ARG	A	476	3849	2233	3333	153	-279	122	C
60	ATOM	1243	CD	ARG	A	476	32.373	8.494	-18.498	1.00	24.21		C
	ANISOU	1243	CD	ARG	A	476	3807	2100	3292	190	-293	77	C
	ATOM	1244	NE	ARG	A	476	31.927	9.009	-19.813	1.00	28.63		N
	ANISOU	1244	NE	ARG	A	476	4278	2724	3877	152	-291	14	N
	ATOM	1245	CZ	ARG	A	476	32.680	9.734	-20.648	1.00	28.25		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1245	CZ	ARG	A	476	4147	2758	3829	211	-311	-11	C
	ATOM	1246	NH1	ARG	A	476	33.921	10.119	-20.292	1.00	26.44		N
	ANISOU	1246	NH1	ARG	A	476	3889	2565	3593	303	-333	8	N
	ATOM	1247	NH2	ARG	A	476	32.181	10.089	-21.830	1.00	24.34		N
5	ANISOU	1247	NH2	ARG	A	476	3593	2320	3336	173	-310	-52	N
	ATOM	1248	C	ARG	A	476	31.621	11.984	-16.096	1.00	19.03		C
	ANISOU	1248	C	ARG	A	476	2942	1696	2591	121	-269	108	C
	ATOM	1249	O	ARG	A	476	32.010	12.709	-17.012	1.00	16.62		O
10	ANISOU	1249	O	ARG	A	476	2556	1432	2328	149	-291	79	O
	ATOM	1250	N	GLY	A	477	32.221	11.942	-14.899	1.00	18.74		N
	ANISOU	1250	N	GLY	A	477	2952	1671	2495	159	-285	140	N
	ATOM	1251	CA	GLY	A	477	33.429	12.703	-14.578	1.00	17.97		C
	ANISOU	1251	CA	GLY	A	477	2803	1637	2389	236	-337	126	C
	ATOM	1252	C	GLY	A	477	33.226	14.205	-14.333	1.00	17.20		C
15	ANISOU	1252	C	GLY	A	477	2603	1614	2317	207	-329	77	C
	ATOM	1253	O	GLY	A	477	34.210	14.931	-14.151	1.00	15.87		O
	ANISOU	1253	O	GLY	A	477	2380	1495	2157	250	-370	52	O
	ATOM	1254	N	ILE	A	478	31.964	14.675	-14.355	1.00	16.13		N
20	ANISOU	1254	N	ILE	A	478	2436	1485	2208	135	-277	56	N
	ATOM	1255	CA	ILE	A	478	31.645	16.097	-14.197	1.00	15.15		C
	ANISOU	1255	CA	ILE	A	478	2221	1406	2129	118	-266	4	C
	ATOM	1256	CB	ILE	A	478	30.602	16.635	-15.259	1.00	15.06		C
	ANISOU	1256	CB	ILE	A	478	2137	1385	2200	83	-240	-12	C
	ATOM	1257	CG1	ILE	A	478	30.870	16.165	-16.718	1.00	12.67		C
25	ANISOU	1257	CG1	ILE	A	478	1829	1058	1927	99	-266	15	C
	ATOM	1258	CD1	ILE	A	478	32.254	16.479	-17.326	1.00	8.92		C
	ANISOU	1258	CD1	ILE	A	478	1332	591	1465	154	-306	24	C
	ATOM	1259	CG2	ILE	A	478	30.433	18.171	-15.129	1.00	15.73		C
30	ANISOU	1259	CG2	ILE	A	478	2137	1489	2350	90	-237	-59	C
	ATOM	1260	C	ILE	A	478	31.087	16.390	-12.800	1.00	16.26		C
	ANISOU	1260	C	ILE	A	478	2381	1587	2209	87	-228	-24	C
	ATOM	1261	O	ILE	A	478	30.163	15.703	-12.334	1.00	16.78		O
	ANISOU	1261	O	ILE	A	478	2496	1650	2231	35	-175	-4	O
35	ATOM	1262	N	ARG	A	479	31.657	17.401	-12.128	1.00	16.30		N
	ANISOU	1262	N	ARG	A	479	2348	1635	2210	108	-251	-77	N
	ATOM	1263	CA	ARG	A	479	31.158	17.854	-10.825	1.00	16.29		C
	ANISOU	1263	CA	ARG	A	479	2357	1689	2145	82	-213	-129	C
	ATOM	1264	CB	ARG	A	479	32.041	17.347	-9.667	1.00	17.20		C
40	ANISOU	1264	CB	ARG	A	479	2549	1855	2130	110	-254	-112	C
	ATOM	1265	CG	ARG	A	479	32.242	15.837	-9.578	1.00	17.87		C
	ANISOU	1265	CG	ARG	A	479	2744	1910	2135	125	-266	-8	C
	ATOM	1266	CD	ARG	A	479	30.940	15.106	-9.170	1.00	19.88		C
	ANISOU	1266	CD	ARG	A	479	3064	2151	2338	51	-176	33	C
	ATOM	1267	NE	ARG	A	479	31.198	13.695	-8.923	1.00	22.90		N
45	ANISOU	1267	NE	ARG	A	479	3575	2483	2644	61	-187	138	N
	ATOM	1268	CZ	ARG	A	479	31.224	12.743	-9.866	1.00	24.84		C
	ANISOU	1268	CZ	ARG	A	479	3860	2631	2948	66	-195	193	C
	ATOM	1269	NH1	ARG	A	479	30.991	13.014	-11.161	1.00	21.80		N
50	ANISOU	1269	NH1	ARG	A	479	3392	2208	2681	57	-195	153	N
	ATOM	1270	NH2	ARG	A	479	31.452	11.491	-9.507	1.00	27.04		N
	ANISOU	1270	NH2	ARG	A	479	4270	2843	3162	80	-203	287	N
	ATOM	1271	C	ARG	A	479	31.081	19.369	-10.792	1.00	16.55		C
	ANISOU	1271	C	ARG	A	479	2300	1729	2259	85	-209	-222	C
55	ATOM	1272	O	ARG	A	479	31.858	20.053	-11.462	1.00	16.48		O
	ANISOU	1272	O	ARG	A	479	2240	1691	2330	108	-255	-234	O
	ATOM	1273	N	VAL	A	480	30.163	19.894	-9.992	1.00	17.45		N
	ANISOU	1273	N	VAL	A	480	2396	1878	2356	59	-149	-289	N
	ATOM	1274	CA	VAL	A	480	30.056	21.335	-9.776	1.00	17.94		C
60	ANISOU	1274	CA	VAL	A	480	2387	1932	2497	69	-142	-394	C
	ATOM	1275	CB	VAL	A	480	28.637	21.841	-10.120	1.00	17.22		C
	ANISOU	1275	CB	VAL	A	480	2229	1821	2494	62	-74	-429	C
	ATOM	1276	CG1	VAL	A	480	28.491	23.277	-9.739	1.00	18.86		C
	ANISOU	1276	CG1	VAL	A	480	2378	2004	2783	87	-61	-546	C
	ATOM	1277	CG2	VAL	A	480	28.341	21.649	-11.590	1.00	16.12		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1277	CG2	VAL	A	480	2051	1622	2451	72	-96	-352	C
	ATOM	1278	C	VAL	A	480	30.431	21.686	-8.330	1.00	19.46		C
	ANISOU	1278	C	VAL	A	480	2611	2200	2583	64	-140	-483	C
	ATOM	1279	O	VAL	A	480	29.897	21.106	-7.379	1.00	20.11		O
5	ANISOU	1279	O	VAL	A	480	2745	2355	2539	41	-90	-485	O
	ATOM	1280	N	SER	A	481	31.353	22.635	-8.168	1.00	20.47		N
	ANISOU	1280	N	SER	A	481	2707	2315	2754	77	-194	-558	N
	ATOM	1281	CA	SER	A	481	31.759	23.081	-6.858	1.00	22.30		C
10	ANISOU	1281	CA	SER	A	481	2960	2626	2887	70	-207	-666	C
	ATOM	1282	CB	SER	A	481	33.078	23.835	-6.956	1.00	22.36		C
	ANISOU	1282	CB	SER	A	481	2929	2614	2953	72	-292	-723	C
	ATOM	1283	OG	SER	A	481	33.419	24.393	-5.699	1.00	24.36		O
	ANISOU	1283	OG	SER	A	481	3192	2948	3117	58	-312	-855	O
	ATOM	1284	C	SER	A	481	30.670	23.933	-6.189	1.00	24.56		C
15	ANISOU	1284	C	SER	A	481	3218	2926	3189	60	-123	-791	C
	ATOM	1285	O	SER	A	481	30.019	24.767	-6.836	1.00	23.76		O
	ANISOU	1285	O	SER	A	481	3052	2737	3240	74	-89	-829	O
	ATOM	1286	N	LYS	A	482	30.448	23.692	-4.903	1.00	27.48		N
20	ANISOU	1286	N	LYS	A	482	3637	3408	3395	45	-89	-850	N
	ATOM	1287	CA	LYS	A	482	29.583	24.554	-4.094	1.00	31.02		C
	ANISOU	1287	CA	LYS	A	482	4056	3893	3836	41	-6	-1002	C
	ATOM	1288	CB	LYS	A	482	28.838	23.725	-3.047	1.00	32.27		C
	ANISOU	1288	CB	LYS	A	482	4275	4186	3798	12	78	-988	C
	ATOM	1289	CG	LYS	A	482	27.735	22.854	-3.618	1.00	32.74		C
25	ANISOU	1289	CG	LYS	A	482	4325	4232	3881	-11	159	-873	C
	ATOM	1290	CD	LYS	A	482	27.113	22.055	-2.499	1.00	40.38		C
	ANISOU	1290	CD	LYS	A	482	5361	5334	4646	-60	252	-853	C
	ATOM	1291	CE	LYS	A	482	25.586	22.137	-2.501	1.00	43.54		C
30	ANISOU	1291	CE	LYS	A	482	5686	5766	5094	-88	391	-897	C
	ATOM	1292	NZ	LYS	A	482	25.001	21.133	-1.548	1.00	47.71		N
	ANISOU	1292	NZ	LYS	A	482	6289	6419	5421	-161	493	-835	N
	ATOM	1293	C	LYS	A	482	30.357	25.666	-3.391	1.00	33.07		C
	ANISOU	1293	C	LYS	A	482	4304	4164	4099	42	-55	-1167	C
	ATOM	1294	O	LYS	A	482	29.775	26.460	-2.686	1.00	34.72		O
35	ANISOU	1294	O	LYS	A	482	4492	4396	4304	45	7	-1320	O
	ATOM	1295	N	MSE	A	483	31.670	25.718	-3.556	1.00	34.66		N
	ANISOU	1295	N	MSE	A	483	4509	4352	4306	37	-163	-1151	N
	ATOM	1296	CA	MSE	A	483	32.448	26.793	-2.918	1.00	37.65		C
40	ANISOU	1296	CA	MSE	A	483	4866	4739	4700	19	-216	-1322	C
	ATOM	1297	CB	MSE	A	483	33.914	26.410	-2.812	1.00	37.80		C
	ANISOU	1297	CB	MSE	A	483	4893	4819	4650	7	-340	-1286	C
	ATOM	1298	CG	MSE	A	483	34.138	25.073	-2.119	1.00	39.83		C
	ANISOU	1298	CG	MSE	A	483	5231	5224	4679	26	-372	-1178	C
	ATOM	1299	SE	MSE	A	483	33.330	25.128	-0.344	0.90	47.98		SE
45	ANISOU	1299	SE	MSE	A	483	6338	6432	5460	13	-299	-1311	SE
	ATOM	1300	CE	MSE	A	483	34.165	26.683	0.484	1.00	37.03		C
	ANISOU	1300	CE	MSE	A	483	4897	5079	4093	-21	-371	-1592	C
	ATOM	1301	C	MSE	A	483	32.325	28.052	-3.738	1.00	38.73		C
	ANISOU	1301	C	MSE	A	483	4933	4704	5077	19	-203	-1393	C
50	ATOM	1302	O	MSE	A	483	32.588	27.979	-4.960	1.00	38.53		O
	ANISOU	1302	O	MSE	A	483	4879	4574	5187	23	-229	-1272	O
	ATOM	1303	OXT	MSE	A	483	31.982	29.121	-3.192	1.00	40.68		O
	ANISOU	1303	OXT	MSE	A	483	5163	4914	5380	17	-166	-1568	O
55	ATOM	1304	N	SER	B	320	6.053	17.488	-14.523	1.00	52.35		N
	ANISOU	1304	N	SER	B	320	7545	5144	7203	2251	154	-336	N
	ATOM	1305	CA	SER	B	320	6.175	16.006	-14.678	1.00	50.09		C
	ANISOU	1305	CA	SER	B	320	6969	5155	6909	2037	116	-339	C
	ATOM	1306	CB	SER	B	320	5.622	15.284	-13.442	1.00	49.98		C
	ANISOU	1306	CB	SER	B	320	6809	5295	6886	2058	243	-458	C
60	ATOM	1307	OG	SER	B	320	6.227	14.008	-13.284	1.00	47.08		O
	ANISOU	1307	OG	SER	B	320	6311	5089	6488	1786	217	-488	O
	ATOM	1308	C	SER	B	320	5.493	15.472	-15.958	1.00	50.02		C
	ANISOU	1308	C	SER	B	320	6692	5379	6934	2091	11	-208	C
	ATOM	1309	O	SER	B	320	4.593	16.118	-16.530	1.00	52.10		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1309	O	SER	B	320	6909	5650	7236	2351	-17	-120	O
	ATOM	1310	N	SER	B	321	5.933	14.292	-16.391	1.00	47.01		N
	ANISOU	1310	N	SER	B	321	6145	5184	6533	1852	-52	-200	N
	ATOM	1311	CA	SER	B	321	5.467	13.682	-17.637	1.00	46.52		C
5	ANISOU	1311	CA	SER	B	321	5861	5338	6476	1841	-166	-97	C
	ATOM	1312	CB	SER	B	321	6.558	13.805	-18.715	1.00	45.54		C
	ANISOU	1312	CB	SER	B	321	5887	5120	6297	1664	-270	-17	C
	ATOM	1313	OG	SER	B	321	6.312	12.943	-19.816	1.00	45.99		O
	ANISOU	1313	OG	SER	B	321	5744	5402	6326	1586	-373	48	O
10	ATOM	1314	C	SER	B	321	5.048	12.212	-17.426	1.00	44.12		C
	ANISOU	1314	C	SER	B	321	5267	5313	6185	1707	-153	-150	C
	ATOM	1315	O	SER	B	321	5.732	11.476	-16.721	1.00	42.89		O
	ANISOU	1315	O	SER	B	321	5134	5155	6007	1511	-100	-235	O
	ATOM	1316	N	SER	B	322	3.928	11.813	-18.037	1.00	43.82		N
15	ANISOU	1316	N	SER	B	322	4963	5507	6179	1810	-209	-96	N
	ATOM	1317	CA	SER	B	322	3.371	10.454	-17.924	1.00	42.09		C
	ANISOU	1317	CA	SER	B	322	4461	5551	5981	1676	-201	-140	C
	ATOM	1318	CB	SER	B	322	2.114	10.463	-17.059	1.00	43.94		C
	ANISOU	1318	CB	SER	B	322	4489	5924	6284	1855	-88	-176	C
20	ATOM	1319	OG	SER	B	322	2.445	10.678	-15.713	1.00	46.56		O
	ANISOU	1319	OG	SER	B	322	4969	6115	6605	1864	69	-271	O
	ATOM	1320	C	SER	B	322	2.996	9.800	-19.256	1.00	40.57		C
	ANISOU	1320	C	SER	B	322	4083	5563	5770	1602	-354	-68	C
	ATOM	1321	O	SER	B	322	2.599	10.477	-20.210	1.00	42.21		O
25	ANISOU	1321	O	SER	B	322	4284	5791	5965	1754	-465	32	O
	ATOM	1322	N	PHE	B	323	3.081	8.475	-19.284	1.00	36.89		N
	ANISOU	1322	N	PHE	B	323	3479	5243	5295	1374	-362	-122	N
	ATOM	1323	CA	PHE	B	323	2.551	7.663	-20.374	1.00	36.10		C
	ANISOU	1323	CA	PHE	B	323	3178	5364	5176	1279	-495	-90	C
30	ATOM	1324	CB	PHE	B	323	3.513	7.627	-21.574	1.00	34.59		C
	ANISOU	1324	CB	PHE	B	323	3153	5104	4888	1159	-613	-44	C
	ATOM	1325	CG	PHE	B	323	4.919	7.274	-21.200	1.00	30.95		C
	ANISOU	1325	CG	PHE	B	323	2900	4468	4391	973	-541	-102	C
	ATOM	1326	CD1	PHE	B	323	5.340	5.953	-21.231	1.00	26.79		C
35	ANISOU	1326	CD1	PHE	B	323	2326	4009	3845	748	-533	-173	C
	ATOM	1327	CE1	PHE	B	323	6.630	5.629	-20.870	1.00	28.42		C
	ANISOU	1327	CE1	PHE	B	323	2700	4071	4027	608	-472	-218	C
	ATOM	1328	CZ	PHE	B	323	7.524	6.648	-20.464	1.00	28.42		C
	ANISOU	1328	CZ	PHE	B	323	2907	3870	4021	662	-426	-198	C
40	ATOM	1329	CE2	PHE	B	323	7.088	7.988	-20.442	1.00	27.51		C
	ANISOU	1329	CE2	PHE	B	323	2862	3668	3922	862	-434	-134	C
	ATOM	1330	CD2	PHE	B	323	5.813	8.277	-20.801	1.00	27.06		C
	ANISOU	1330	CD2	PHE	B	323	2650	3742	3890	1028	-486	-86	C
	ATOM	1331	C	PHE	B	323	2.265	6.253	-19.873	1.00	35.08		C
45	ANISOU	1331	C	PHE	B	323	2870	5383	5074	1071	-439	-175	C
	ATOM	1332	O	PHE	B	323	2.618	5.888	-18.744	1.00	33.74		O
	ANISOU	1332	O	PHE	B	323	2759	5134	4925	997	-303	-245	O
	ATOM	1333	N	SER	B	324	1.618	5.474	-20.725	1.00	35.51		N
	ANISOU	1333	N	SER	B	324	2724	5647	5120	971	-553	-167	N
50	ATOM	1334	CA	SER	B	324	1.270	4.093	-20.446	1.00	35.61		C
	ANISOU	1334	CA	SER	B	324	2576	5797	5160	747	-521	-240	C
	ATOM	1335	CB	SER	B	324	-0.200	3.869	-20.791	1.00	38.02		C
	ANISOU	1335	CB	SER	B	324	2544	6381	5520	785	-594	-217	C
	ATOM	1336	OG	SER	B	324	-0.802	2.894	-19.960	1.00	41.46		O
55	ANISOU	1336	OG	SER	B	324	2800	6931	6024	634	-483	-279	O
	ATOM	1337	C	SER	B	324	2.182	3.210	-21.320	1.00	33.97		C
	ANISOU	1337	C	SER	B	324	2498	5542	4866	521	-606	-273	C
	ATOM	1338	O	SER	B	324	2.389	3.498	-22.500	1.00	34.44		O
	ANISOU	1338	O	SER	B	324	2615	5622	4850	539	-742	-227	O
60	ATOM	1339	N	PHE	B	325	2.760	2.167	-20.734	1.00	31.78		N
	ANISOU	1339	N	PHE	B	325	2289	5194	4592	327	-518	-348	N
	ATOM	1340	CA	PHE	B	325	3.513	1.176	-21.491	1.00	29.85		C
	ANISOU	1340	CA	PHE	B	325	2148	4915	4278	124	-577	-395	C
	ATOM	1341	CB	PHE	B	325	4.972	1.610	-21.693	1.00	28.12		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1341	CB	PHE	B	325	2192	4498	3995	143	-561	-383	C
	ATOM	1342	CG	PHE	B	325	5.770	0.673	-22.571	1.00	26.86		C
	ANISOU	1342	CG	PHE	B	325	2137	4311	3757	-27	-608	-429	C
	ATOM	1343	CD1	PHE	B	325	5.458	0.518	-23.931	1.00	28.72		C
5	ANISOU	1343	CD1	PHE	B	325	2340	4663	3908	-68	-746	-422	C
	ATOM	1344	CE1	PHE	B	325	6.190	-0.356	-24.743	1.00	28.43		C
	ANISOU	1344	CE1	PHE	B	325	2420	4597	3784	-214	-772	-481	C
	ATOM	1345	CZ	PHE	B	325	7.263	-1.082	-24.196	1.00	26.96		C
	ANISOU	1345	CZ	PHE	B	325	2368	4261	3612	-302	-660	-539	C
10	ATOM	1346	CE2	PHE	B	325	7.581	-0.933	-22.850	1.00	23.52		C
	ANISOU	1346	CE2	PHE	B	325	1951	3720	3265	-259	-543	-533	C
	ATOM	1347	CD2	PHE	B	325	6.831	-0.057	-22.045	1.00	25.04		C
	ANISOU	1347	CD2	PHE	B	325	2043	3944	3527	-131	-518	-483	C
	ATOM	1348	C	PHE	B	325	3.456	-0.162	-20.770	1.00	29.26		C
15	ANISOU	1348	C	PHE	B	325	2036	4838	4242	-75	-486	-471	C
	ATOM	1349	O	PHE	B	325	3.759	-0.239	-19.586	1.00	27.73		O
	ANISOU	1349	O	PHE	B	325	1904	4545	4086	-67	-351	-485	O
	ATOM	1350	N	GLY	B	326	3.028	-1.202	-21.487	1.00	30.19		N
	ANISOU	1350	N	GLY	B	326	2067	5063	4339	-256	-565	-518	N
20	ATOM	1351	CA	GLY	B	326	2.970	-2.562	-20.950	1.00	30.07		C
	ANISOU	1351	CA	GLY	B	326	2049	5020	4356	-471	-488	-587	C
	ATOM	1352	C	GLY	B	326	2.057	-2.782	-19.754	1.00	31.33		C
	ANISOU	1352	C	GLY	B	326	2041	5253	4609	-494	-364	-580	C
	ATOM	1353	O	GLY	B	326	2.288	-3.706	-18.964	1.00	30.80		O
25	ANISOU	1353	O	GLY	B	326	2046	5095	4563	-632	-253	-612	O
	ATOM	1354	N	GLY	B	327	1.029	-1.938	-19.624	1.00	32.09		N
	ANISOU	1354	N	GLY	B	327	1922	5515	4756	-348	-374	-531	N
	ATOM	1355	CA	GLY	B	327	0.118	-1.987	-18.486	1.00	33.34		C
	ANISOU	1355	CA	GLY	B	327	1900	5769	4998	-337	-231	-519	C
30	ATOM	1356	C	GLY	B	327	0.542	-1.183	-17.265	1.00	31.95		C
	ANISOU	1356	C	GLY	B	327	1846	5467	4829	-154	-76	-495	C
	ATOM	1357	O	GLY	B	327	-0.117	-1.257	-16.216	1.00	33.59		O
	ANISOU	1357	O	GLY	B	327	1940	5738	5083	-142	73	-490	O
	ATOM	1358	N	PHE	B	328	1.609	-0.399	-17.411	1.00	29.32		N
35	ANISOU	1358	N	PHE	B	328	1738	4962	4439	-22	-107	-482	N
	ATOM	1359	CA	PHE	B	328	2.156	0.428	-16.338	1.00	28.13		C
	ANISOU	1359	CA	PHE	B	328	1744	4669	4277	135	12	-473	C
	ATOM	1360	CB	PHE	B	328	3.628	0.057	-16.050	1.00	25.60		C
	ANISOU	1360	CB	PHE	B	328	1698	4135	3894	50	27	-499	C
40	ATOM	1361	CG	PHE	B	328	3.793	-1.258	-15.358	1.00	25.59		C
	ANISOU	1361	CG	PHE	B	328	1733	4099	3890	-141	113	-529	C
	ATOM	1362	CD1	PHE	B	328	3.840	-1.329	-13.968	1.00	25.50		C
	ANISOU	1362	CD1	PHE	B	328	1790	4033	3866	-125	261	-531	C
	ATOM	1363	CE1	PHE	B	328	3.965	-2.559	-13.319	1.00	24.09		C
45	ANISOU	1363	CE1	PHE	B	328	1665	3812	3675	-297	342	-539	C
	ATOM	1364	CZ	PHE	B	328	4.054	-3.706	-14.047	1.00	24.40		C
	ANISOU	1364	CZ	PHE	B	328	1699	3843	3728	-482	279	-556	C
	ATOM	1365	CE2	PHE	B	328	4.005	-3.655	-15.450	1.00	25.53		C
	ANISOU	1365	CE2	PHE	B	328	1777	4043	3882	-505	132	-574	C
50	ATOM	1366	CD2	PHE	B	328	3.876	-2.433	-16.092	1.00	24.35		C
	ANISOU	1366	CD2	PHE	B	328	1565	3954	3731	-335	49	-556	C
	ATOM	1367	C	PHE	B	328	2.093	1.894	-16.718	1.00	28.62		C
	ANISOU	1367	C	PHE	B	328	1826	4711	4336	382	-44	-429	C
	ATOM	1368	O	PHE	B	328	2.399	2.262	-17.854	1.00	28.17		O
55	ANISOU	1368	O	PHE	B	328	1811	4646	4248	412	-185	-399	O
	ATOM	1369	N	THR	B	329	1.690	2.727	-15.760	1.00	29.74		N
	ANISOU	1369	N	THR	B	329	1959	4837	4502	563	74	-425	N
	ATOM	1370	CA	THR	B	329	1.801	4.169	-15.900	1.00	29.75		C
	ANISOU	1370	CA	THR	B	329	2059	4747	4498	808	49	-391	C
60	ATOM	1371	CB	THR	B	329	0.751	4.914	-15.031	1.00	32.29		C
	ANISOU	1371	CB	THR	B	329	2253	5145	4871	1029	182	-390	C
	ATOM	1372	OG1	THR	B	329	-0.576	4.482	-15.374	1.00	31.53		O
	ANISOU	1372	OG1	THR	B	329	1818	5316	4846	1033	168	-364	O
	ATOM	1373	CG2	THR	B	329	0.846	6.411	-15.230	1.00	31.75		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1373	CG2	THR	B	329	2316	4948	4799	1297	153	-356	C
	ATOM	1374	C	THR	B	329	3.223	4.532	-15.485	1.00	28.41		C
	ANISOU	1374	C	THR	B	329	2200	4331	4263	781	67	-416	C
	ATOM	1375	O	THR	B	329	3.629	4.259	-14.350	1.00	29.14		O
5	ANISOU	1375	O	THR	B	329	2399	4343	4330	729	183	-463	O
	ATOM	1376	N	PHE	B	330	3.995	5.073	-16.429	1.00	27.40		N
	ANISOU	1376	N	PHE	B	330	2210	4099	4102	796	-52	-380	N
	ATOM	1377	CA	PHE	B	330	5.301	5.664	-16.167	1.00	25.35		C
	ANISOU	1377	CA	PHE	B	330	2219	3620	3794	784	-48	-393	C
10	ATOM	1378	CB	PHE	B	330	6.178	5.570	-17.410	1.00	24.18		C
	ANISOU	1378	CB	PHE	B	330	2153	3429	3605	684	-174	-355	C
	ATOM	1379	CG	PHE	B	330	6.737	4.194	-17.671	1.00	21.46		C
	ANISOU	1379	CG	PHE	B	330	1782	3132	3238	468	-193	-390	C
	ATOM	1380	CD1	PHE	B	330	8.110	3.963	-17.574	1.00	18.03		C
15	ANISOU	1380	CD1	PHE	B	330	1514	2572	2767	358	-191	-410	C
	ATOM	1381	CE1	PHE	B	330	8.642	2.682	-17.836	1.00	18.22		C
	ANISOU	1381	CE1	PHE	B	330	1523	2625	2773	192	-201	-442	C
	ATOM	1382	CZ	PHE	B	330	7.787	1.630	-18.182	1.00	18.84		C
	ANISOU	1382	CZ	PHE	B	330	1451	2841	2869	110	-215	-462	C
20	ATOM	1383	CE2	PHE	B	330	6.396	1.859	-18.267	1.00	18.39		C
	ANISOU	1383	CE2	PHE	B	330	1214	2923	2849	186	-226	-444	C
	ATOM	1384	CD2	PHE	B	330	5.895	3.134	-18.019	1.00	20.38		C
	ANISOU	1384	CD2	PHE	B	330	1457	3165	3123	377	-214	-404	C
	ATOM	1385	C	PHE	B	330	5.142	7.118	-15.831	1.00	27.08		C
25	ANISOU	1385	C	PHE	B	330	2554	3714	4019	1002	-15	-376	C
	ATOM	1386	O	PHE	B	330	4.443	7.841	-16.532	1.00	28.76		O
	ANISOU	1386	O	PHE	B	330	2699	3969	4258	1167	-72	-316	O
	ATOM	1387	N	LYS	B	331	5.795	7.544	-14.756	1.00	27.03		N
	ANISOU	1387	N	LYS	B	331	2738	3549	3983	1008	70	-432	N
30	ATOM	1388	CA	LYS	B	331	5.856	8.956	-14.420	1.00	29.58		C
	ANISOU	1388	CA	LYS	B	331	3242	3697	4301	1189	100	-435	C
	ATOM	1389	CB	LYS	B	331	5.064	9.247	-13.135	1.00	30.49		C
	ANISOU	1389	CB	LYS	B	331	3344	3823	4419	1336	253	-500	C
	ATOM	1390	CG	LYS	B	331	5.276	10.638	-12.593	1.00	34.42		C
35	ANISOU	1390	CG	LYS	B	331	4088	4096	4893	1503	301	-536	C
	ATOM	1391	CD	LYS	B	331	4.335	10.970	-11.437	1.00	37.48		C
	ANISOU	1391	CD	LYS	B	331	4452	4511	5276	1692	469	-604	C
	ATOM	1392	CE	LYS	B	331	4.357	12.470	-11.157	1.00	44.58		C
	ANISOU	1392	CE	LYS	B	331	5601	5174	6164	1907	508	-635	C
40	ATOM	1393	NZ	LYS	B	331	3.272	12.887	-10.223	1.00	50.24		N
	ANISOU	1393	NZ	LYS	B	331	6274	5932	6884	2152	684	-696	N
	ATOM	1394	C	LYS	B	331	7.324	9.355	-14.298	1.00	28.10		C
	ANISOU	1394	C	LYS	B	331	3311	3304	4062	1062	61	-456	C
	ATOM	1395	O	LYS	B	331	8.037	8.798	-13.466	1.00	27.89		O
45	ANISOU	1395	O	LYS	B	331	3352	3249	3997	924	98	-517	O
	ATOM	1396	N	ARG	B	332	7.787	10.293	-15.132	1.00	28.13		N
	ANISOU	1396	N	ARG	B	332	3451	3172	4064	1099	-16	-397	N
	ATOM	1397	CA	ARG	B	332	9.184	10.755	-15.057	1.00	27.45		C
	ANISOU	1397	CA	ARG	B	332	3590	2899	3940	958	-50	-412	C
50	ATOM	1398	CB	ARG	B	332	9.671	11.403	-16.367	1.00	27.67		C
	ANISOU	1398	CB	ARG	B	332	3703	2846	3966	939	-143	-313	C
	ATOM	1399	CG	ARG	B	332	11.213	11.679	-16.389	1.00	27.23		C
	ANISOU	1399	CG	ARG	B	332	3826	2642	3879	736	-173	-321	C
	ATOM	1400	CD	ARG	B	332	11.712	12.014	-17.789	1.00	28.39		C
55	ANISOU	1400	CD	ARG	B	332	4015	2763	4011	677	-245	-212	C
	ATOM	1401	NE	ARG	B	332	11.084	13.243	-18.288	1.00	31.78		N
	ANISOU	1401	NE	ARG	B	332	4571	3058	4448	859	-260	-132	N
	ATOM	1402	CZ	ARG	B	332	11.095	13.644	-19.557	1.00	31.92		C
	ANISOU	1402	CZ	ARG	B	332	4626	3063	4438	881	-322	-10	C
60	ATOM	1403	NH1	ARG	B	332	11.702	12.900	-20.497	1.00	29.06		N
	ANISOU	1403	NH1	ARG	B	332	4180	2829	4034	723	-365	33	N
	ATOM	1404	NH2	ARG	B	332	10.480	14.783	-19.881	1.00	27.89		N
	ANISOU	1404	NH2	ARG	B	332	4251	2412	3935	1075	-335	69	N
	ATOM	1405	C	ARG	B	332	9.449	11.702	-13.890	1.00	28.06		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1405	C	ARG	B	332	3890	2780	3993	1015	19	-492	C
	ATOM	1406	O	ARG	B	332	8.854	12.786	-13.811	1.00	29.26		O
	ANISOU	1406	O	ARG	B	332	4150	2809	4160	1208	53	-486	O
	ATOM	1407	N	THR	B	333	10.387	11.304	-13.020	1.00	26.57		N
5	ANISOU	1407	N	THR	B	333	3782	2555	3757	850	30	-566	N
	ATOM	1408	CA	THR	B	333	10.701	12.072	-11.806	1.00	27.14		C
	ANISOU	1408	CA	THR	B	333	4076	2459	3779	868	83	-664	C
	ATOM	1409	CB	THR	B	333	10.605	11.185	-10.551	1.00	26.57		C
	ANISOU	1409	CB	THR	B	333	3954	2494	3648	824	153	-747	C
10	ATOM	1410	OG1	THR	B	333	11.447	10.029	-10.706	1.00	26.24		O
	ANISOU	1410	OG1	THR	B	333	3808	2566	3597	626	88	-725	O
	ATOM	1411	CG2	THR	B	333	9.165	10.725	-10.341	1.00	27.09		C
	ANISOU	1411	CG2	THR	B	333	3835	2720	3738	992	259	-741	C
	ATOM	1412	C	THR	B	333	12.062	12.825	-11.844	1.00	26.96		C
15	ANISOU	1412	C	THR	B	333	4273	2240	3731	703	8	-680	C
	ATOM	1413	O	THR	B	333	12.273	13.724	-11.056	1.00	27.63		O
	ANISOU	1413	O	THR	B	333	4577	2144	3775	722	33	-758	O
	ATOM	1414	N	SER	B	334	12.957	12.454	-12.768	1.00	25.38		N
	ANISOU	1414	N	SER	B	334	4008	2081	3552	536	-76	-610	N
20	ATOM	1415	CA	SER	B	334	14.274	13.108	-12.964	1.00	25.51		C
	ANISOU	1415	CA	SER	B	334	4182	1950	3561	351	-143	-605	C
	ATOM	1416	CB	SER	B	334	15.373	12.428	-12.171	1.00	24.37		C
	ANISOU	1416	CB	SER	B	334	4014	1868	3377	157	-184	-671	C
	ATOM	1417	OG	SER	B	334	15.537	13.002	-10.926	1.00	29.53		O
25	ANISOU	1417	OG	SER	B	334	4850	2400	3971	145	-173	-780	O
	ATOM	1418	C	SER	B	334	14.705	12.915	-14.375	1.00	24.24		C
	ANISOU	1418	C	SER	B	334	3928	1847	3436	271	-195	-492	C
	ATOM	1419	O	SER	B	334	14.323	11.934	-15.016	1.00	22.59		O
	ANISOU	1419	O	SER	B	334	3521	1822	3240	295	-199	-445	O
30	ATOM	1420	N	GLY	B	335	15.562	13.811	-14.833	1.00	24.97		N
	ANISOU	1420	N	GLY	B	335	4172	1782	3533	151	-230	-453	N
	ATOM	1421	CA	GLY	B	335	16.223	13.648	-16.116	1.00	24.84		C
	ANISOU	1421	CA	GLY	B	335	4086	1821	3529	33	-264	-347	C
	ATOM	1422	C	GLY	B	335	15.352	14.058	-17.286	1.00	25.60		C
35	ANISOU	1422	C	GLY	B	335	4192	1905	3631	188	-262	-234	C
	ATOM	1423	O	GLY	B	335	14.281	14.625	-17.106	1.00	27.00		O
	ANISOU	1423	O	GLY	B	335	4436	2007	3818	395	-241	-231	O
	ATOM	1424	N	SER	B	336	15.838	13.762	-18.487	1.00	25.43		N
	ANISOU	1424	N	SER	B	336	4099	1967	3594	95	-285	-138	N
40	ATOM	1425	CA	SER	B	336	15.225	14.169	-19.749	1.00	26.34		C
	ANISOU	1425	CA	SER	B	336	4242	2078	3686	207	-303	-11	C
	ATOM	1426	CB	SER	B	336	15.484	15.656	-20.048	1.00	28.83		C
	ANISOU	1426	CB	SER	B	336	4827	2128	3998	202	-299	68	C
	ATOM	1427	OG	SER	B	336	16.856	16.025	-19.901	1.00	30.57		O
45	ANISOU	1427	OG	SER	B	336	5147	2245	4224	-53	-286	57	O
	ATOM	1428	C	SER	B	336	15.816	13.280	-20.832	1.00	25.42		C
	ANISOU	1428	C	SER	B	336	3985	2145	3531	81	-316	46	C
	ATOM	1429	O	SER	B	336	16.779	12.541	-20.571	1.00	23.98		O
	ANISOU	1429	O	SER	B	336	3706	2050	3355	-85	-301	-9	O
50	ATOM	1430	N	SER	B	337	15.231	13.301	-22.031	1.00	25.43		N
	ANISOU	1430	N	SER	B	337	3968	2213	3481	171	-346	151	N
	ATOM	1431	CA	SER	B	337	15.828	12.576	-23.140	1.00	24.60		C
	ANISOU	1431	CA	SER	B	337	3774	2261	3312	52	-346	201	C
	ATOM	1432	CB	SER	B	337	15.457	11.084	-23.140	1.00	23.13		C
55	ANISOU	1432	CB	SER	B	337	3365	2304	3120	64	-359	122	C
	ATOM	1433	OG	SER	B	337	14.075	10.828	-23.373	1.00	25.51		O
	ANISOU	1433	OG	SER	B	337	3581	2702	3411	240	-413	131	O
	ATOM	1434	C	SER	B	337	15.505	13.216	-24.460	1.00	26.16		C
	ANISOU	1434	C	SER	B	337	4078	2434	3427	115	-376	348	C
60	ATOM	1435	O	SER	B	337	14.583	14.017	-24.556	1.00	27.15		O
	ANISOU	1435	O	SER	B	337	4301	2463	3552	294	-417	413	O
	ATOM	1436	N	ILE	B	338	16.325	12.882	-25.455	1.00	26.35		N
	ANISOU	1436	N	ILE	B	338	4093	2544	3376	-27	-349	404	N
	ATOM	1437	CA	ILE	B	338	16.075	13.222	-26.849	1.00	27.55		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1437	CA	ILE	B	338	4332	2727	3410	14	-377	545	C
	ATOM	1438	CB	ILE	B	338	17.191	14.129	-27.454	1.00	28.81		C
	ANISOU	1438	CB	ILE	B	338	4678	2747	3523	-152	-306	660	C
	ATOM	1439	CG1	ILE	B	338	18.579	13.472	-27.383	1.00	26.68		C
5	ANISOU	1439	CG1	ILE	B	338	4302	2568	3268	-384	-214	597	C
	ATOM	1440	CD1	ILE	B	338	19.665	14.286	-28.122	1.00	28.93		C
	ANISOU	1440	CD1	ILE	B	338	4733	2760	3499	-571	-128	723	C
	ATOM	1441	CG2	ILE	B	338	17.170	15.486	-26.777	1.00	29.60		C
10	ANISOU	1441	CG2	ILE	B	338	4987	2564	3694	-128	-302	701	C
	ATOM	1442	C	ILE	B	338	15.884	11.899	-27.586	1.00	26.88		C
	ANISOU	1442	C	ILE	B	338	4074	2894	3245	3	-398	501	C
	ATOM	1443	O	ILE	B	338	16.186	10.856	-27.040	1.00	24.81		O
	ANISOU	1443	O	ILE	B	338	3658	2737	3031	-63	-370	378	O
	ATOM	1444	N	LYS	B	339	15.351	11.936	-28.800	1.00	29.34		N
15	ANISOU	1444	N	LYS	B	339	4428	3294	3428	73	-455	600	N
	ATOM	1445	CA	LYS	B	339	15.109	10.715	-29.550	1.00	29.97		C
	ANISOU	1445	CA	LYS	B	339	4375	3601	3413	56	-486	546	C
	ATOM	1446	CB	LYS	B	339	13.657	10.595	-30.002	1.00	31.00		C
20	ANISOU	1446	CB	LYS	B	339	4446	3844	3489	232	-625	574	C
	ATOM	1447	CG	LYS	B	339	12.575	10.731	-28.976	1.00	33.08		C
	ANISOU	1447	CG	LYS	B	339	4606	4083	3882	388	-683	524	C
	ATOM	1448	CD	LYS	B	339	11.246	10.804	-29.743	1.00	39.25		C
	ANISOU	1448	CD	LYS	B	339	5331	4998	4584	558	-828	596	C
	ATOM	1449	CE	LYS	B	339	10.060	11.092	-28.864	1.00	42.38		C
25	ANISOU	1449	CE	LYS	B	339	5609	5391	5103	748	-881	574	C
	ATOM	1450	NZ	LYS	B	339	8.914	11.502	-29.728	1.00	47.09		N
	ANISOU	1450	NZ	LYS	B	339	6177	6097	5618	936	-1030	689	N
	ATOM	1451	C	LYS	B	339	15.927	10.747	-30.817	1.00	31.76		C
30	ANISOU	1451	C	LYS	B	339	4705	3878	3485	-58	-431	632	C
	ATOM	1452	O	LYS	B	339	16.135	11.812	-31.422	1.00	33.75		O
	ANISOU	1452	O	LYS	B	339	5140	4018	3664	-59	-419	782	O
	ATOM	1453	N	ARG	B	340	16.350	9.566	-31.237	1.00	31.26		N
	ANISOU	1453	N	ARG	B	340	4539	3977	3361	-146	-389	540	N
	ATOM	1454	CA	ARG	B	340	16.998	9.401	-32.494	1.00	33.42		C
35	ANISOU	1454	CA	ARG	B	340	4895	4340	3462	-234	-327	598	C
	ATOM	1455	CB	ARG	B	340	18.495	9.339	-32.275	1.00	33.24		C
	ANISOU	1455	CB	ARG	B	340	4857	4283	3488	-401	-164	576	C
	ATOM	1456	CG	ARG	B	340	19.324	9.305	-33.537	1.00	37.60		C
40	ANISOU	1456	CG	ARG	B	340	5499	4922	3866	-502	-54	648	C
	ATOM	1457	CD	ARG	B	340	20.659	8.729	-33.170	1.00	40.36		C
	ANISOU	1457	CD	ARG	B	340	5728	5314	4294	-636	100	564	C
	ATOM	1458	NE	ARG	B	340	21.646	8.866	-34.226	1.00	47.19		N
	ANISOU	1458	NE	ARG	B	340	6660	6250	5019	-750	249	643	N
	ATOM	1459	CZ	ARG	B	340	22.821	8.236	-34.223	1.00	50.98		C
45	ANISOU	1459	CZ	ARG	B	340	7018	6824	5528	-847	401	575	C
	ATOM	1460	NH1	ARG	B	340	23.142	7.436	-33.197	1.00	49.64		N
	ANISOU	1460	NH1	ARG	B	340	6666	6673	5521	-835	403	436	N
	ATOM	1461	NH2	ARG	B	340	23.677	8.409	-35.235	1.00	52.82		N
50	ANISOU	1461	NH2	ARG	B	340	7309	7137	5623	-947	557	654	N
	ATOM	1462	C	ARG	B	340	16.484	8.111	-33.093	1.00	33.37		C
	ANISOU	1462	C	ARG	B	340	4794	4530	3355	-214	-380	492	C
	ATOM	1463	O	ARG	B	340	16.559	7.042	-32.483	1.00	31.57		O
	ANISOU	1463	O	ARG	B	340	4424	4358	3211	-242	-359	344	O
	ATOM	1464	N	GLU	B	341	15.934	8.230	-34.287	1.00	35.28		N
55	ANISOU	1464	N	GLU	B	341	5133	4866	3405	-168	-458	572	N
	ATOM	1465	CA	GLU	B	341	15.436	7.081	-34.986	1.00	35.48		C
	ANISOU	1465	CA	GLU	B	341	5103	5074	3304	-171	-522	469	C
	ATOM	1466	CB	GLU	B	341	14.512	7.527	-36.105	1.00	37.67		C
	ANISOU	1466	CB	GLU	B	341	5486	5442	3384	-83	-672	584	C
60	ATOM	1467	CG	GLU	B	341	14.003	6.403	-36.917	1.00	39.18		C
	ANISOU	1467	CG	GLU	B	341	5645	5825	3415	-110	-756	475	C
	ATOM	1468	CD	GLU	B	341	12.728	6.772	-37.589	1.00	43.97		C
	ANISOU	1468	CD	GLU	B	341	6272	6540	3896	5	-971	563	C
	ATOM	1469	OE1	GLU	B	341	12.775	7.040	-38.814	1.00	45.83		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1469	OE1	GLU	B	341	6670	6857	3888	4	-1010	659	O
	ATOM	1470	OE2	GLU	B	341	11.690	6.807	-36.876	1.00	44.98		O
	ANISOU	1470	OE2	GLU	B	341	6245	6681	4165	102	-1097	541	O
	ATOM	1471	C	GLU	B	341	16.615	6.290	-35.516	1.00	35.17		C
5	ANISOU	1471	C	GLU	B	341	5086	5099	3177	-298	-363	393	C
	ATOM	1472	O	GLU	B	341	17.472	6.835	-36.209	1.00	37.32		O
	ANISOU	1472	O	GLU	B	341	5483	5357	3339	-362	-251	492	O
	ATOM	1473	N	GLU	B	342	16.644	5.013	-35.154	1.00	33.75		N
10	ANISOU	1473	N	GLU	B	342	4787	4983	3052	-329	-342	219	N
	ATOM	1474	CA	GLU	B	342	17.705	4.076	-35.501	1.00	33.58		C
	ANISOU	1474	CA	GLU	B	342	4763	5018	2979	-412	-187	115	C
	ATOM	1475	CB	GLU	B	342	18.534	3.739	-34.259	1.00	32.29		C
	ANISOU	1475	CB	GLU	B	342	4466	4768	3036	-442	-80	40	C
	ATOM	1476	CG	GLU	B	342	19.606	4.754	-33.977	1.00	34.89		C
15	ANISOU	1476	CG	GLU	B	342	4812	5012	3434	-500	36	153	C
	ATOM	1477	CD	GLU	B	342	20.496	4.362	-32.851	1.00	37.32		C
	ANISOU	1477	CD	GLU	B	342	4979	5269	3931	-536	124	77	C
	ATOM	1478	OE1	GLU	B	342	20.843	5.278	-32.069	1.00	41.51		O
20	ANISOU	1478	OE1	GLU	B	342	5491	5694	4587	-569	129	148	O
	ATOM	1479	OE2	GLU	B	342	20.843	3.159	-32.724	1.00	37.32		O
	ANISOU	1479	OE2	GLU	B	342	4900	5327	3954	-527	180	-53	O
	ATOM	1480	C	GLU	B	342	17.091	2.790	-35.997	1.00	33.24		C
	ANISOU	1480	C	GLU	B	342	4709	5088	2833	-414	-253	-36	C
	ATOM	1481	O	GLU	B	342	15.936	2.497	-35.709	1.00	32.03		O
25	ANISOU	1481	O	GLU	B	342	4490	4961	2718	-376	-409	-82	O
	ATOM	1482	N	GLU	B	343	17.874	2.026	-36.750	1.00	33.79		N
	ANISOU	1482	N	GLU	B	343	4844	5224	2771	-463	-125	-118	N
	ATOM	1483	CA	GLU	B	343	17.505	0.666	-37.091	1.00	33.29		C
30	ANISOU	1483	CA	GLU	B	343	4790	5227	2632	-481	-154	-296	C
	ATOM	1484	CB	GLU	B	343	17.416	0.491	-38.604	1.00	36.07		C
	ANISOU	1484	CB	GLU	B	343	5318	5705	2683	-507	-163	-306	C
	ATOM	1485	CG	GLU	B	343	16.227	1.164	-39.223	1.00	38.05		C
	ANISOU	1485	CG	GLU	B	343	5629	6034	2792	-482	-375	-205	C
	ATOM	1486	CD	GLU	B	343	16.323	1.206	-40.720	1.00	44.38		C
35	ANISOU	1486	CD	GLU	B	343	6631	6962	3270	-507	-371	-179	C
	ATOM	1487	OE1	GLU	B	343	17.386	1.640	-41.255	1.00	46.93		O
	ANISOU	1487	OE1	GLU	B	343	7056	7285	3489	-524	-186	-100	O
	ATOM	1488	OE2	GLU	B	343	15.327	0.808	-41.360	1.00	46.73		O
40	ANISOU	1488	OE2	GLU	B	343	6979	7369	3409	-518	-553	-236	O
	ATOM	1489	C	GLU	B	343	18.493	-0.319	-36.484	1.00	31.64		C
	ANISOU	1489	C	GLU	B	343	4511	4962	2549	-492	10	-426	C
	ATOM	1490	O	GLU	B	343	19.706	-0.165	-36.609	1.00	31.47		O
	ANISOU	1490	O	GLU	B	343	4491	4938	2528	-499	188	-397	O
	ATOM	1491	N	VAL	B	344	17.937	-1.331	-35.831	1.00	30.29		N
45	ANISOU	1491	N	VAL	B	344	4273	4751	2484	-492	-54	-560	N
	ATOM	1492	CA	VAL	B	344	18.689	-2.310	-35.054	1.00	28.25		C
	ANISOU	1492	CA	VAL	B	344	3947	4413	2372	-477	67	-673	C
	ATOM	1493	CB	VAL	B	344	18.436	-2.166	-33.514	1.00	26.46		C
50	ANISOU	1493	CB	VAL	B	344	3570	4085	2396	-456	14	-647	C
	ATOM	1494	CG1	VAL	B	344	18.841	-0.786	-33.009	1.00	25.57		C
	ANISOU	1494	CG1	VAL	B	344	3398	3945	2372	-442	27	-489	C
	ATOM	1495	CG2	VAL	B	344	16.977	-2.489	-33.150	1.00	24.38		C
	ANISOU	1495	CG2	VAL	B	344	3272	3821	2170	-479	-160	-691	C
	ATOM	1496	C	VAL	B	344	18.313	-3.718	-35.484	1.00	28.72		C
55	ANISOU	1496	C	VAL	B	344	4091	4473	2347	-501	54	-854	C
	ATOM	1497	O	VAL	B	344	17.259	-3.928	-36.106	1.00	29.90		O
	ANISOU	1497	O	VAL	B	344	4309	4683	2368	-553	-89	-899	O
	ATOM	1498	N	LEU	B	345	19.158	-4.685	-35.122	1.00	27.67		N
	ANISOU	1498	N	LEU	B	345	3954	4268	2292	-464	195	-959	N
60	ATOM	1499	CA	LEU	B	345	19.009	-6.054	-35.598	1.00	28.06		C
	ANISOU	1499	CA	LEU	B	345	4127	4281	2253	-479	220	-1141	C
	ATOM	1500	CB	LEU	B	345	20.251	-6.481	-36.379	1.00	28.98		C
	ANISOU	1500	CB	LEU	B	345	4335	4421	2254	-413	431	-1204	C
	ATOM	1501	CG	LEU	B	345	20.407	-5.803	-37.751	1.00	30.75		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1501	CG	LEU	B	345	4677	4787	2220	-439	469	-1154	C
	ATOM	1502	CD1	LEU	B	345	21.733	-6.157	-38.415	1.00	30.52		C
	ANISOU	1502	CD1	LEU	B	345	4708	4796	2093	-363	717	-1205	C
	ATOM	1503	CD2	LEU	B	345	19.278	-6.215	-38.670	1.00	32.27		C
5	ANISOU	1503	CD2	LEU	B	345	5033	5030	2199	-522	316	-1251	C
	ATOM	1504	C	LEU	B	345	18.720	-6.985	-34.436	1.00	27.04		C
	ANISOU	1504	C	LEU	B	345	3939	4015	2320	-476	193	-1220	C
	ATOM	1505	O	LEU	B	345	19.387	-6.910	-33.389	1.00	25.76		O
	ANISOU	1505	O	LEU	B	345	3661	3784	2342	-410	262	-1167	O
10	ATOM	1506	N	THR	B	346	17.695	-7.823	-34.588	1.00	26.96		N
	ANISOU	1506	N	THR	B	346	4007	3970	2268	-562	81	-1336	N
	ATOM	1507	CA	THR	B	346	17.350	-8.749	-33.512	1.00	26.28		C
	ANISOU	1507	CA	THR	B	346	3888	3741	2355	-582	62	-1403	C
	ATOM	1508	CB	THR	B	346	15.887	-9.268	-33.635	1.00	26.91		C
15	ANISOU	1508	CB	THR	B	346	4000	3826	2400	-731	-111	-1483	C
	ATOM	1509	OG1	THR	B	346	15.764	-10.147	-34.762	1.00	25.20		O
	ANISOU	1509	OG1	THR	B	346	3979	3603	1992	-799	-110	-1646	O
	ATOM	1510	CG2	THR	B	346	14.906	-8.098	-33.746	1.00	25.10		C
20	ANISOU	1510	CG2	THR	B	346	3644	3748	2145	-775	-277	-1361	C
	ATOM	1511	C	THR	B	346	18.348	-9.919	-33.460	1.00	27.87		C
	ANISOU	1511	C	THR	B	346	4198	3808	2581	-499	229	-1520	C
	ATOM	1512	O	THR	B	346	19.239	-10.033	-34.325	1.00	29.40		O
	ANISOU	1512	O	THR	B	346	4483	4038	2650	-427	363	-1567	O
	ATOM	1513	N	GLY	B	347	18.192	-10.779	-32.459	1.00	27.20		N
25	ANISOU	1513	N	GLY	B	347	4111	3571	2653	-499	231	-1563	N
	ATOM	1514	CA	GLY	B	347	18.936	-12.031	-32.387	1.00	29.00		C
	ANISOU	1514	CA	GLY	B	347	4473	3639	2908	-413	367	-1680	C
	ATOM	1515	C	GLY	B	347	18.678	-12.996	-33.546	1.00	32.22		C
	ANISOU	1515	C	GLY	B	347	5117	3994	3132	-473	388	-1868	C
30	ATOM	1516	O	GLY	B	347	19.373	-14.017	-33.671	1.00	33.15		O
	ANISOU	1516	O	GLY	B	347	5381	3967	3245	-376	523	-1981	O
	ATOM	1517	N	ASN	B	348	17.675	-12.677	-34.381	1.00	32.97		N
	ANISOU	1517	N	ASN	B	348	5255	4201	3069	-625	248	-1904	N
	ATOM	1518	CA	ASN	B	348	17.405	-13.400	-35.631	1.00	35.54		C
35	ANISOU	1518	CA	ASN	B	348	5814	4519	3172	-705	242	-2083	C
	ATOM	1519	CB	ASN	B	348	15.971	-13.938	-35.629	1.00	36.61		C
	ANISOU	1519	CB	ASN	B	348	5999	4622	3290	-925	51	-2171	C
	ATOM	1520	CG	ASN	B	348	15.795	-15.108	-36.571	1.00	39.61		C
	ANISOU	1520	CG	ASN	B	348	6662	4895	3493	-1018	63	-2399	C
40	ATOM	1521	OD1	ASN	B	348	16.626	-16.016	-36.596	1.00	43.16		O
	ANISOU	1521	OD1	ASN	B	348	7285	5163	3950	-910	232	-2509	O
	ATOM	1522	ND2	ASN	B	348	14.725	-15.085	-37.373	1.00	40.71		N
	ANISOU	1522	ND2	ASN	B	348	6855	5147	3464	-1211	-120	-2476	N
	ATOM	1523	C	ASN	B	348	17.667	-12.572	-36.916	1.00	36.61		C
45	ANISOU	1523	C	ASN	B	348	5990	4852	3067	-687	255	-2062	C
	ATOM	1524	O	ASN	B	348	17.122	-12.874	-37.983	1.00	38.05		O
	ANISOU	1524	O	ASN	B	348	6341	5088	3030	-793	181	-2183	O
	ATOM	1525	N	LEU	B	349	18.513	-11.541	-36.785	1.00	35.54		N
	ANISOU	1525	N	LEU	B	349	5710	4822	2971	-566	347	-1905	N
50	ATOM	1526	CA	LEU	B	349	18.816	-10.526	-37.819	1.00	36.28		C
	ANISOU	1526	CA	LEU	B	349	5813	5105	2868	-550	371	-1824	C
	ATOM	1527	CB	LEU	B	349	19.731	-11.063	-38.920	1.00	38.60		C
	ANISOU	1527	CB	LEU	B	349	6300	5411	2954	-470	564	-1949	C
	ATOM	1528	CG	LEU	B	349	21.223	-11.340	-38.716	1.00	39.26		C
55	ANISOU	1528	CG	LEU	B	349	6348	5448	3121	-285	826	-1953	C
	ATOM	1529	CD1	LEU	B	349	21.879	-11.427	-40.098	1.00	42.73		C
	ANISOU	1529	CD1	LEU	B	349	6964	5987	3283	-234	995	-2038	C
	ATOM	1530	CD2	LEU	B	349	21.941	-10.323	-37.866	1.00	36.33		C
	ANISOU	1530	CD2	LEU	B	349	5719	5139	2944	-211	877	-1751	C
60	ATOM	1531	C	LEU	B	349	17.624	-9.803	-38.446	1.00	36.73		C
	ANISOU	1531	C	LEU	B	349	5872	5311	2775	-684	152	-1771	C
	ATOM	1532	O	LEU	B	349	17.698	-9.335	-39.579	1.00	38.72		O
	ANISOU	1532	O	LEU	B	349	6228	5696	2787	-694	154	-1759	O
	ATOM	1533	N	GLN	B	350	16.522	-9.716	-37.721	1.00	35.55		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1533	N	GLN	B	350	5604	5147	2756	-777	-33	-1735	N
	ATOM	1534	CA	GLN	B	350	15.386	-8.965	-38.230	1.00	36.17		C
	ANISOU	1534	CA	GLN	B	350	5639	5385	2719	-874	-250	-1664	C
	ATOM	1535	CB	GLN	B	350	14.078	-9.409	-37.570	1.00	35.38		C
5	ANISOU	1535	CB	GLN	B	350	5441	5259	2744	-1005	-437	-1706	C
	ATOM	1536	CG	GLN	B	350	12.839	-8.730	-38.162	1.00	37.56		C
	ANISOU	1536	CG	GLN	B	350	5649	5725	2896	-1094	-678	-1646	C
	ATOM	1537	CD	GLN	B	350	11.541	-9.112	-37.450	1.00	37.75		C
	ANISOU	1537	CD	GLN	B	350	5522	5756	3067	-1225	-850	-1674	C
10	ATOM	1538	OE1	GLN	B	350	11.541	-9.925	-36.534	1.00	37.89		O
	ANISOU	1538	OE1	GLN	B	350	5514	5620	3264	-1269	-784	-1742	O
	ATOM	1539	NE2	GLN	B	350	10.433	-8.514	-37.872	1.00	38.46		N
	ANISOU	1539	NE2	GLN	B	350	5505	6031	3077	-1284	-1067	-1612	N
	ATOM	1540	C	GLN	B	350	15.641	-7.495	-37.930	1.00	34.39		C
15	ANISOU	1540	C	GLN	B	350	5259	5249	2560	-786	-250	-1441	C
	ATOM	1541	O	GLN	B	350	15.987	-7.132	-36.801	1.00	32.10		O
	ANISOU	1541	O	GLN	B	350	4817	4883	2495	-722	-194	-1348	O
	ATOM	1542	N	THR	B	351	15.480	-6.654	-38.937	1.00	35.51		N
	ANISOU	1542	N	THR	B	351	5460	5538	2492	-786	-314	-1357	N
20	ATOM	1543	CA	THR	B	351	15.638	-5.218	-38.753	1.00	35.15		C
	ANISOU	1543	CA	THR	B	351	5308	5556	2491	-715	-325	-1141	C
	ATOM	1544	CB	THR	B	351	15.876	-4.493	-40.090	1.00	36.33		C
	ANISOU	1544	CB	THR	B	351	5605	5840	2357	-703	-319	-1061	C
	ATOM	1545	OG1	THR	B	351	17.037	-5.035	-40.720	1.00	36.38		O
25	ANISOU	1545	OG1	THR	B	351	5755	5831	2237	-677	-97	-1150	O
	ATOM	1546	CG2	THR	B	351	16.109	-3.013	-39.855	1.00	35.19		C
	ANISOU	1546	CG2	THR	B	351	5379	5719	2273	-636	-312	-830	C
	ATOM	1547	C	THR	B	351	14.428	-4.602	-38.066	1.00	34.79		C
	ANISOU	1547	C	THR	B	351	5095	5543	2579	-732	-530	-1043	C
30	ATOM	1548	O	THR	B	351	13.297	-4.781	-38.513	1.00	36.32		O
	ANISOU	1548	O	THR	B	351	5289	5835	2677	-804	-723	-1083	O
	ATOM	1549	N	LEU	B	352	14.669	-3.878	-36.979	1.00	33.75		N
	ANISOU	1549	N	LEU	B	352	4817	5341	2667	-663	-487	-922	N
	ATOM	1550	CA	LEU	B	352	13.622	-3.070	-36.344	1.00	34.12		C
35	ANISOU	1550	CA	LEU	B	352	4710	5420	2832	-640	-648	-808	C
	ATOM	1551	CB	LEU	B	352	13.362	-3.513	-34.889	1.00	32.44		C
	ANISOU	1551	CB	LEU	B	352	4345	5100	2881	-645	-632	-847	C
	ATOM	1552	CG	LEU	B	352	12.886	-4.942	-34.597	1.00	32.96		C
	ANISOU	1552	CG	LEU	B	352	4408	5119	2994	-749	-654	-1020	C
40	ATOM	1553	CD1	LEU	B	352	12.818	-5.103	-33.090	1.00	32.72		C
	ANISOU	1553	CD1	LEU	B	352	4242	4977	3214	-731	-607	-1006	C
	ATOM	1554	CD2	LEU	B	352	11.534	-5.282	-35.237	1.00	34.08		C
	ANISOU	1554	CD2	LEU	B	352	4529	5392	3028	-855	-857	-1081	C
	ATOM	1555	C	LEU	B	352	13.996	-1.589	-36.370	1.00	33.77		C
45	ANISOU	1555	C	LEU	B	352	4660	5383	2790	-547	-626	-610	C
	ATOM	1556	O	LEU	B	352	15.095	-1.217	-35.983	1.00	33.03		O
	ANISOU	1556	O	LEU	B	352	4572	5204	2773	-512	-465	-558	O
	ATOM	1557	N	LYS	B	353	13.074	-0.753	-36.832	1.00	35.44		N
	ANISOU	1557	N	LYS	B	353	4859	5692	2916	-511	-793	-499	N
50	ATOM	1558	CA	LYS	B	353	13.235	0.694	-36.758	1.00	35.60		C
	ANISOU	1558	CA	LYS	B	353	4887	5683	2957	-416	-792	-303	C
	ATOM	1559	CB	LYS	B	353	12.510	1.355	-37.917	1.00	37.98		C
	ANISOU	1559	CB	LYS	B	353	5277	6118	3036	-378	-955	-195	C
	ATOM	1560	CG	LYS	B	353	12.989	2.760	-38.252	1.00	40.38		C
55	ANISOU	1560	CG	LYS	B	353	5690	6373	3280	-298	-911	12	C
	ATOM	1561	CD	LYS	B	353	12.251	3.271	-39.513	1.00	47.52		C
	ANISOU	1561	CD	LYS	B	353	6709	7420	3925	-254	-1086	121	C
	ATOM	1562	CE	LYS	B	353	13.174	4.063	-40.450	1.00	51.30		C
	ANISOU	1562	CE	LYS	B	353	7408	7878	4205	-253	-970	266	C
60	ATOM	1563	NZ	LYS	B	353	12.550	4.327	-41.795	1.00	55.38		N
	ANISOU	1563	NZ	LYS	B	353	8074	8553	4416	-224	-1134	354	N
	ATOM	1564	C	LYS	B	353	12.636	1.177	-35.441	1.00	34.34		C
	ANISOU	1564	C	LYS	B	353	4557	5448	3042	-351	-841	-254	C
	ATOM	1565	O	LYS	B	353	11.425	1.077	-35.231	1.00	34.90		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1565	O	LYS	B	353	4510	5595	3155	-331	-997	-267	O
	ATOM	1566	N	ILE	B	354	13.478	1.693	-34.559	1.00	32.69		N
	ANISOU	1566	N	ILE	B	354	4329	5103	2987	-322	-706	-204	N
	ATOM	1567	CA	ILE	B	354	13.045	2.177	-33.262	1.00	31.87		C
5	ANISOU	1567	CA	ILE	B	354	4097	4914	3098	-258	-726	-169	C
	ATOM	1568	CB	ILE	B	354	13.522	1.253	-32.057	1.00	29.83		C
	ANISOU	1568	CB	ILE	B	354	3748	4568	3018	-309	-619	-293	C
	ATOM	1569	CG1	ILE	B	354	15.045	1.231	-31.936	1.00	29.97		C
	ANISOU	1569	CG1	ILE	B	354	3830	4502	3055	-342	-447	-296	C
10	ATOM	1570	CD1	ILE	B	354	15.560	0.674	-30.576	1.00	28.39		C
	ANISOU	1570	CD1	ILE	B	354	3540	4204	3043	-353	-362	-368	C
	ATOM	1571	CG2	ILE	B	354	12.948	-0.182	-32.167	1.00	28.73		C
	ANISOU	1571	CG2	ILE	B	354	3563	4495	2859	-389	-663	-447	C
	ATOM	1572	C	ILE	B	354	13.526	3.621	-33.042	1.00	32.17		C
15	ANISOU	1572	C	ILE	B	354	4202	4845	3176	-186	-681	-10	C
	ATOM	1573	O	ILE	B	354	14.521	4.069	-33.643	1.00	32.57		O
	ANISOU	1573	O	ILE	B	354	4377	4863	3134	-221	-582	57	O
	ATOM	1574	N	ARG	B	355	12.815	4.352	-32.186	1.00	31.65		N
	ANISOU	1574	N	ARG	B	355	4061	4720	3243	-91	-742	48	N
20	ATOM	1575	CA	ARG	B	355	13.288	5.641	-31.749	1.00	32.09		C
	ANISOU	1575	CA	ARG	B	355	4195	4629	3367	-34	-689	170	C
	ATOM	1576	CB	ARG	B	355	12.149	6.642	-31.605	1.00	34.12		C
	ANISOU	1576	CB	ARG	B	355	4439	4870	3656	122	-811	276	C
	ATOM	1577	CG	ARG	B	355	11.544	7.019	-32.964	1.00	40.68		C
25	ANISOU	1577	CG	ARG	B	355	5351	5813	4294	184	-940	384	C
	ATOM	1578	CD	ARG	B	355	10.425	7.984	-32.784	1.00	49.99		C
	ANISOU	1578	CD	ARG	B	355	6500	6978	5518	372	-1063	495	C
	ATOM	1579	NE	ARG	B	355	9.347	7.782	-33.751	1.00	57.85		N
	ANISOU	1579	NE	ARG	B	355	7438	8169	6374	442	-1246	533	N
30	ATOM	1580	CZ	ARG	B	355	8.140	8.351	-33.661	1.00	61.98		C
	ANISOU	1580	CZ	ARG	B	355	7861	8751	6936	624	-1388	610	C
	ATOM	1581	NH1	ARG	B	355	7.842	9.147	-32.628	1.00	61.47		N
	ANISOU	1581	NH1	ARG	B	355	7761	8550	7045	765	-1346	648	N
	ATOM	1582	NH2	ARG	B	355	7.220	8.116	-34.599	1.00	64.39		N
35	ANISOU	1582	NH2	ARG	B	355	8099	9264	7103	672	-1573	644	N
	ATOM	1583	C	ARG	B	355	14.040	5.442	-30.452	1.00	29.39		C
	ANISOU	1583	C	ARG	B	355	3795	4172	3199	-82	-573	96	C
	ATOM	1584	O	ARG	B	355	13.448	5.166	-29.416	1.00	29.13		O
	ANISOU	1584	O	ARG	B	355	3651	4123	3296	-44	-595	33	O
40	ATOM	1585	N	VAL	B	356	15.361	5.534	-30.531	1.00	27.06		N
	ANISOU	1585	N	VAL	B	356	3568	3818	2896	-173	-448	106	N
	ATOM	1586	CA	VAL	B	356	16.203	5.352	-29.374	1.00	24.71		C
	ANISOU	1586	CA	VAL	B	356	3213	3431	2745	-225	-354	44	C
	ATOM	1587	CB	VAL	B	356	17.660	4.989	-29.781	1.00	24.66		C
45	ANISOU	1587	CB	VAL	B	356	3228	3443	2701	-334	-221	27	C
	ATOM	1588	CG1	VAL	B	356	18.584	4.978	-28.570	1.00	22.93		C
	ANISOU	1588	CG1	VAL	B	356	2938	3141	2632	-383	-149	-14	C
	ATOM	1589	CG2	VAL	B	356	17.691	3.637	-30.499	1.00	24.39		C
	ANISOU	1589	CG2	VAL	B	356	3163	3532	2572	-358	-198	-77	C
50	ATOM	1590	C	VAL	B	356	16.195	6.627	-28.548	1.00	24.03		C
	ANISOU	1590	C	VAL	B	356	3178	3194	2758	-182	-360	122	C
	ATOM	1591	O	VAL	B	356	16.500	7.679	-29.070	1.00	25.01		O
	ANISOU	1591	O	VAL	B	356	3429	3245	2830	-189	-348	238	O
	ATOM	1592	N	HIS	B	357	15.853	6.512	-27.266	1.00	21.94		N
55	ANISOU	1592	N	HIS	B	357	2836	2873	2626	-144	-371	56	N
	ATOM	1593	CA	HIS	B	357	15.871	7.643	-26.336	1.00	21.71		C
	ANISOU	1593	CA	HIS	B	357	2873	2687	2689	-106	-368	97	C
	ATOM	1594	CB	HIS	B	357	14.798	7.476	-25.251	1.00	20.79		C
	ANISOU	1594	CB	HIS	B	357	2672	2563	2663	2	-412	33	C
60	ATOM	1595	CG	HIS	B	357	13.410	7.756	-25.737	1.00	21.75		C
	ANISOU	1595	CG	HIS	B	357	2767	2747	2751	144	-503	82	C
	ATOM	1596	ND1	HIS	B	357	12.706	8.884	-25.371	1.00	23.54		N
	ANISOU	1596	ND1	HIS	B	357	3056	2871	3017	287	-534	145	N
	ATOM	1597	CE1	HIS	B	357	11.530	8.882	-25.974	1.00	22.53		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1597	CE1	HIS	B	357	2858	2853	2849	411	-626	188	C
	ATOM	1598	NE2	HIS	B	357	11.450	7.797	-26.723	1.00	23.39		N
	ANISOU	1598	NE2	HIS	B	357	2873	3128	2886	329	-662	148	N
	ATOM	1599	CD2	HIS	B	357	12.613	7.077	-26.595	1.00	22.62		C
5	ANISOU	1599	CD2	HIS	B	357	2792	3016	2786	170	-577	78	C
	ATOM	1600	C	HIS	B	357	17.247	7.801	-25.708	1.00	20.95		C
	ANISOU	1600	C	HIS	B	357	2796	2511	2655	-232	-283	74	C
	ATOM	1601	O	HIS	B	357	17.824	6.843	-25.188	1.00	18.76		O
	ANISOU	1601	O	HIS	B	357	2417	2290	2421	-290	-244	-15	O
10	ATOM	1602	N	GLU	B	358	17.764	9.024	-25.773	1.00	21.60		N
	ANISOU	1602	N	GLU	B	358	3009	2459	2740	-276	-262	161	N
	ATOM	1603	CA	GLU	B	358	19.132	9.306	-25.328	1.00	21.12		C
	ANISOU	1603	CA	GLU	B	358	2957	2337	2730	-429	-192	153	C
	ATOM	1604	CB	GLU	B	358	19.907	9.942	-26.477	1.00	22.08		C
15	ANISOU	1604	CB	GLU	B	358	3175	2446	2769	-535	-131	268	C
	ATOM	1605	CG	GLU	B	358	20.023	9.004	-27.665	1.00	22.15		C
	ANISOU	1605	CG	GLU	B	358	3121	2631	2664	-539	-93	272	C
	ATOM	1606	CD	GLU	B	358	20.615	9.629	-28.884	1.00	24.08		C
	ANISOU	1606	CD	GLU	B	358	3477	2879	2794	-626	-23	397	C
20	ATOM	1607	OE1	GLU	B	358	20.524	10.875	-29.048	1.00	23.87		O
	ANISOU	1607	OE1	GLU	B	358	3613	2702	2753	-643	-34	513	O
	ATOM	1608	OE2	GLU	B	358	21.157	8.845	-29.705	1.00	25.65		O
	ANISOU	1608	OE2	GLU	B	358	3616	3224	2907	-671	52	379	O
	ATOM	1609	C	GLU	B	358	19.112	10.217	-24.111	1.00	21.14		C
25	ANISOU	1609	C	GLU	B	358	3040	2167	2824	-430	-215	132	C
	ATOM	1610	O	GLU	B	358	18.544	11.303	-24.159	1.00	21.17		O
	ANISOU	1610	O	GLU	B	358	3194	2027	2822	-362	-242	198	O
	ATOM	1611	N	GLY	B	359	19.685	9.752	-23.008	1.00	20.16		N
	ANISOU	1611	N	GLY	B	359	2830	2055	2773	-490	-208	36	N
30	ATOM	1612	CA	GLY	B	359	19.778	10.572	-21.819	1.00	20.57		C
	ANISOU	1612	CA	GLY	B	359	2974	1953	2890	-512	-231	-3	C
	ATOM	1613	C	GLY	B	359	19.326	9.821	-20.596	1.00	19.73		C
	ANISOU	1613	C	GLY	B	359	2783	1889	2826	-437	-258	-113	C
	ATOM	1614	O	GLY	B	359	18.499	8.922	-20.689	1.00	19.63		O
35	ANISOU	1614	O	GLY	B	359	2676	1982	2800	-330	-265	-142	O
	ATOM	1615	N	TYR	B	360	19.863	10.218	-19.445	1.00	19.73		N
	ANISOU	1615	N	TYR	B	360	2828	1801	2865	-508	-274	-174	N
	ATOM	1616	CA	TYR	B	360	19.483	9.673	-18.153	1.00	18.62		C
	ANISOU	1616	CA	TYR	B	360	2650	1681	2744	-445	-296	-271	C
40	ATOM	1617	CB	TYR	B	360	20.482	10.115	-17.053	1.00	19.15		C
	ANISOU	1617	CB	TYR	B	360	2770	1677	2830	-579	-329	-331	C
	ATOM	1618	CG	TYR	B	360	19.942	9.873	-15.646	1.00	18.18		C
	ANISOU	1618	CG	TYR	B	360	2679	1534	2694	-499	-350	-425	C
	ATOM	1619	CD1	TYR	B	360	19.945	8.585	-15.104	1.00	16.45		C
45	ANISOU	1619	CD1	TYR	B	360	2326	1457	2469	-465	-354	-465	C
	ATOM	1620	CE1	TYR	B	360	19.438	8.342	-13.850	1.00	19.36		C
	ANISOU	1620	CE1	TYR	B	360	2735	1814	2805	-398	-359	-536	C
	ATOM	1621	CZ	TYR	B	360	18.885	9.395	-13.126	1.00	19.45		C
	ANISOU	1621	CZ	TYR	B	360	2920	1679	2790	-350	-353	-585	C
50	ATOM	1622	OH	TYR	B	360	18.382	9.138	-11.873	1.00	18.88		O
	ANISOU	1622	OH	TYR	B	360	2897	1608	2666	-282	-339	-658	O
	ATOM	1623	CE2	TYR	B	360	18.840	10.677	-13.657	1.00	18.02		C
	ANISOU	1623	CE2	TYR	B	360	2881	1343	2625	-365	-349	-557	C
	ATOM	1624	CD2	TYR	B	360	19.353	10.902	-14.916	1.00	17.40		C
55	ANISOU	1624	CD2	TYR	B	360	2762	1269	2579	-442	-351	-469	C
	ATOM	1625	C	TYR	B	360	18.049	10.089	-17.759	1.00	19.14		C
	ANISOU	1625	C	TYR	B	360	2798	1672	2803	-267	-294	-288	C
	ATOM	1626	O	TYR	B	360	17.680	11.247	-17.870	1.00	21.05		O
	ANISOU	1626	O	TYR	B	360	3194	1761	3044	-218	-294	-255	O
60	ATOM	1627	N	GLU	B	361	17.263	9.137	-17.275	1.00	18.20		N
	ANISOU	1627	N	GLU	B	361	2574	1657	2683	-169	-284	-337	N
	ATOM	1628	CA	GLU	B	361	15.899	9.416	-16.844	1.00	19.16		C
	ANISOU	1628	CA	GLU	B	361	2724	1749	2806	0	-265	-357	C
	ATOM	1629	CB	GLU	B	361	14.901	9.154	-17.981	1.00	18.69		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1629	CB	GLU	B	361	2575	1784	2741	107	-272	-291	C
	ATOM	1630	CG	GLU	B	361	14.816	10.226	-19.056	1.00	20.04		C
	ANISOU	1630	CG	GLU	B	361	2852	1865	2895	146	-296	-193	C
	ATOM	1631	CD	GLU	B	361	13.917	9.795	-20.203	1.00	22.31		C
5	ANISOU	1631	CD	GLU	B	361	3033	2288	3154	236	-330	-129	C
	ATOM	1632	OE1	GLU	B	361	14.066	8.623	-20.652	1.00	20.60		O
	ANISOU	1632	OE1	GLU	B	361	2685	2224	2919	163	-336	-149	O
	ATOM	1633	OE2	GLU	B	361	13.064	10.618	-20.659	1.00	23.98		O
10	ANISOU	1633	OE2	GLU	B	361	3300	2452	3359	383	-357	-61	O
	ATOM	1634	C	GLU	B	361	15.557	8.512	-15.689	1.00	17.64		C
	ANISOU	1634	C	GLU	B	361	2458	1633	2612	27	-240	-437	C
	ATOM	1635	O	GLU	B	361	15.996	7.369	-15.651	1.00	17.76		O
	ANISOU	1635	O	GLU	B	361	2363	1760	2626	-43	-244	-451	O
	ATOM	1636	N	GLU	B	362	14.776	9.020	-14.758	1.00	18.34		N
15	ANISOU	1636	N	GLU	B	362	2620	1655	2692	137	-205	-484	N
	ATOM	1637	CA	GLU	B	362	14.217	8.208	-13.690	1.00	18.97		C
	ANISOU	1637	CA	GLU	B	362	2638	1816	2755	180	-158	-546	C
	ATOM	1638	CB	GLU	B	362	14.698	8.683	-12.317	1.00	18.78		C
20	ANISOU	1638	CB	GLU	B	362	2764	1691	2682	150	-150	-626	C
	ATOM	1639	CG	GLU	B	362	14.269	7.780	-11.129	1.00	19.81		C
	ANISOU	1639	CG	GLU	B	362	2854	1908	2765	175	-96	-679	C
	ATOM	1640	CD	GLU	B	362	14.658	8.416	-9.769	1.00	23.89		C
	ANISOU	1640	CD	GLU	B	362	3556	2321	3202	160	-92	-765	C
	ATOM	1641	OE1	GLU	B	362	15.700	8.061	-9.173	1.00	27.64		O
25	ANISOU	1641	OE1	GLU	B	362	4065	2806	3630	38	-156	-790	O
	ATOM	1642	OE2	GLU	B	362	13.946	9.338	-9.332	1.00	31.97		O
	ANISOU	1642	OE2	GLU	B	362	4699	3247	4203	278	-32	-811	O
	ATOM	1643	C	GLU	B	362	12.692	8.261	-13.751	1.00	19.33		C
30	ANISOU	1643	C	GLU	B	362	2608	1916	2818	350	-102	-537	C
	ATOM	1644	O	GLU	B	362	12.130	9.347	-13.924	1.00	21.05		O
	ANISOU	1644	O	GLU	B	362	2908	2040	3049	476	-89	-521	O
	ATOM	1645	N	PHE	B	363	12.053	7.096	-13.591	1.00	18.10		N
	ANISOU	1645	N	PHE	B	363	2298	1909	2669	352	-67	-544	N
35	ATOM	1646	CA	PHE	B	363	10.603	6.935	-13.598	1.00	19.56		C
	ANISOU	1646	CA	PHE	B	363	2355	2196	2881	481	-10	-536	C
	ATOM	1647	CB	PHE	B	363	10.160	6.097	-14.830	1.00	18.76		C
	ANISOU	1647	CB	PHE	B	363	2078	2239	2813	443	-60	-483	C
	ATOM	1648	CG	PHE	B	363	10.538	6.710	-16.149	1.00	20.16		C
40	ANISOU	1648	CG	PHE	B	363	2290	2378	2990	445	-145	-419	C
	ATOM	1649	CD1	PHE	B	363	9.671	7.585	-16.786	1.00	20.57		C
	ANISOU	1649	CD1	PHE	B	363	2324	2434	3060	595	-170	-365	C
	ATOM	1650	CE1	PHE	B	363	10.005	8.145	-17.991	1.00	22.34		C
	ANISOU	1650	CE1	PHE	B	363	2603	2620	3264	598	-247	-290	C
45	ATOM	1651	CZ	PHE	B	363	11.229	7.855	-18.587	1.00	17.85		C
	ANISOU	1651	CZ	PHE	B	363	2100	2021	2662	440	-280	-275	C
	ATOM	1652	CE2	PHE	B	363	12.100	6.988	-17.975	1.00	18.88		C
	ANISOU	1652	CE2	PHE	B	363	2224	2160	2789	301	-251	-336	C
	ATOM	1653	CD2	PHE	B	363	11.761	6.407	-16.760	1.00	18.78		C
50	ANISOU	1653	CD2	PHE	B	363	2166	2175	2793	306	-193	-403	C
	ATOM	1654	C	PHE	B	363	10.104	6.182	-12.366	1.00	19.99		C
	ANISOU	1654	C	PHE	B	363	2365	2319	2910	480	83	-588	C
	ATOM	1655	O	PHE	B	363	10.813	5.318	-11.820	1.00	19.21		O
	ANISOU	1655	O	PHE	B	363	2290	2232	2778	360	82	-608	O
55	ATOM	1656	N	THR	B	364	8.874	6.490	-11.950	1.00	21.40		N
	ANISOU	1656	N	THR	B	364	2475	2551	3103	622	169	-600	N
	ATOM	1657	CA	THR	B	364	8.094	5.540	-11.194	1.00	22.37		C
	ANISOU	1657	CA	THR	B	364	2478	2803	3219	605	268	-619	C
	ATOM	1658	CB	THR	B	364	7.228	6.189	-10.082	1.00	24.65		C
60	ANISOU	1658	CB	THR	B	364	2799	3088	3478	761	405	-666	C
	ATOM	1659	OG1	THR	B	364	6.244	7.069	-10.672	1.00	29.54		O
	ANISOU	1659	OG1	THR	B	364	3325	3737	4161	950	417	-641	O
	ATOM	1660	CG2	THR	B	364	8.077	6.917	-9.090	1.00	20.46		C
	ANISOU	1660	CG2	THR	B	364	2522	2392	2860	769	420	-732	C
	ATOM	1661	C	THR	B	364	7.200	4.826	-12.190	1.00	23.57		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1661	C	THR	B	364	2398	3119	3440	586	242	-570	C
	ATOM	1662	O	THR	B	364	6.734	5.447	-13.162	1.00	24.92		O
	ANISOU	1662	O	THR	B	364	2497	3317	3654	681	180	-530	O
	ATOM	1663	N	MSE	B	365	6.990	3.527	-11.962	1.00	23.51		N
5	ANISOU	1663	N	MSE	B	365	2289	3210	3433	455	278	-570	N
	ATOM	1664	CA	MSE	B	365	6.070	2.707	-12.758	1.00	25.28		C
	ANISOU	1664	CA	MSE	B	365	2293	3596	3716	395	258	-541	C
	ATOM	1665	CB	MSE	B	365	6.777	1.479	-13.354	1.00	23.17		C
	ANISOU	1665	CB	MSE	B	365	2037	3323	3443	205	188	-537	C
10	ATOM	1666	CG	MSE	B	365	7.959	1.767	-14.260	1.00	23.72		C
	ANISOU	1666	CG	MSE	B	365	2224	3295	3494	180	74	-527	C
	ATOM	1667	SE	MSE	B	365	9.006	0.180	-14.677	0.90	24.85		SE
	ANISOU	1667	SE	MSE	B	365	2418	3405	3619	-17	33	-540	SE
	ATOM	1668	CE	MSE	B	365	7.640	-1.058	-15.246	1.00	20.54		C
15	ANISOU	1668	CE	MSE	B	365	1672	3014	3117	-135	41	-548	C
	ATOM	1669	C	MSE	B	365	4.961	2.217	-11.835	1.00	26.07		C
	ANISOU	1669	C	MSE	B	365	2259	3817	3829	397	400	-552	C
	ATOM	1670	O	MSE	B	365	5.252	1.610	-10.808	1.00	25.95		O
	ANISOU	1670	O	MSE	B	365	2332	3765	3763	319	488	-569	O
20	ATOM	1671	N	VAL	B	366	3.699	2.486	-12.183	1.00	27.59		N
	ANISOU	1671	N	VAL	B	366	2234	4164	4084	489	424	-533	N
	ATOM	1672	CA	VAL	B	366	2.565	2.042	-11.348	1.00	29.18		C
	ANISOU	1672	CA	VAL	B	366	2265	4513	4308	484	578	-537	C
	ATOM	1673	CB	VAL	B	366	1.807	3.257	-10.708	1.00	31.18		C
25	ANISOU	1673	CB	VAL	B	366	2482	4797	4568	737	692	-550	C
	ATOM	1674	CG1	VAL	B	366	0.547	2.816	-9.890	1.00	31.65		C
	ANISOU	1674	CG1	VAL	B	366	2322	5048	4655	741	877	-550	C
	ATOM	1675	CG2	VAL	B	366	2.757	4.071	-9.830	1.00	29.76		C
	ANISOU	1675	CG2	VAL	B	366	2601	4409	4296	827	734	-597	C
30	ATOM	1676	C	VAL	B	366	1.630	1.113	-12.138	1.00	30.40		C
	ANISOU	1676	C	VAL	B	366	2151	4861	4538	349	536	-511	C
	ATOM	1677	O	VAL	B	366	1.042	1.529	-13.138	1.00	31.27		O
	ANISOU	1677	O	VAL	B	366	2097	5082	4703	424	432	-486	O
	ATOM	1678	N	GLY	B	367	1.533	-0.147	-11.709	1.00	30.76		N
35	ANISOU	1678	N	GLY	B	367	2170	4939	4578	139	604	-513	N
	ATOM	1679	CA	GLY	B	367	0.588	-1.110	-12.303	1.00	32.91		C
	ANISOU	1679	CA	GLY	B	367	2196	5388	4921	-34	581	-500	C
	ATOM	1680	C	GLY	B	367	-0.498	-1.517	-11.325	1.00	35.94		C
	ANISOU	1680	C	GLY	B	367	2401	5920	5333	-85	771	-488	C
40	ATOM	1681	O	GLY	B	367	-0.558	-0.986	-10.220	1.00	37.15		O
	ANISOU	1681	O	GLY	B	367	2625	6048	5442	44	925	-491	O
	ATOM	1682	N	LYS	B	368	-1.356	-2.458	-11.722	1.00	37.73		N
	ANISOU	1682	N	LYS	B	368	2403	6306	5626	-285	766	-478	N
	ATOM	1683	CA	LYS	B	368	-2.392	-2.977	-10.842	1.00	40.82		C
45	ANISOU	1683	CA	LYS	B	368	2606	6852	6051	-385	959	-457	C
	ATOM	1684	CB	LYS	B	368	-3.379	-3.863	-11.614	1.00	43.14		C
	ANISOU	1684	CB	LYS	B	368	2608	7343	6439	-618	896	-451	C
	ATOM	1685	CG	LYS	B	368	-4.224	-3.164	-12.650	1.00	46.39		C
	ANISOU	1685	CG	LYS	B	368	2718	7976	6933	-496	753	-448	C
50	ATOM	1686	CD	LYS	B	368	-5.098	-4.196	-13.325	1.00	53.87		C
	ANISOU	1686	CD	LYS	B	368	3403	9110	7957	-784	679	-454	C
	ATOM	1687	CE	LYS	B	368	-5.442	-3.835	-14.770	1.00	56.62		C
	ANISOU	1687	CE	LYS	B	368	3572	9602	8340	-740	427	-464	C
	ATOM	1688	NZ	LYS	B	368	-6.644	-4.642	-15.228	1.00	62.56		N
55	ANISOU	1688	NZ	LYS	B	368	3968	10621	9180	-997	377	-470	N
	ATOM	1689	C	LYS	B	368	-1.811	-3.784	-9.679	1.00	40.22		C
	ANISOU	1689	C	LYS	B	368	2770	6621	5891	-521	1112	-444	C
	ATOM	1690	O	LYS	B	368	-2.325	-3.708	-8.559	1.00	41.54		O
	ANISOU	1690	O	LYS	B	368	2901	6854	6028	-488	1318	-424	O
60	ATOM	1691	N	ARG	B	369	-0.739	-4.539	-9.950	1.00	38.40		N
	ANISOU	1691	N	ARG	B	369	2787	6190	5615	-656	1015	-452	N
	ATOM	1692	CA	ARG	B	369	-0.231	-5.556	-9.020	1.00	38.59		C
	ANISOU	1692	CA	ARG	B	369	3028	6068	5567	-815	1127	-423	C
	ATOM	1693	CB	ARG	B	369	-0.483	-6.952	-9.606	1.00	39.39		C

ES 2 454 773 T3

		ANISOU	1693	CB	ARG	B	369	3090	6155	5723	-1113	1085	-417	C
		ATOM	1694	CG	ARG	B	369	-1.889	-7.506	-9.367	1.00	43.61		C
		ANISOU	1694	CG	ARG	B	369	3344	6893	6331	-1301	1219	-390	C
		ATOM	1695	CD	ARG	B	369	-2.166	-8.798	-10.162	1.00	45.50		C
5		ANISOU	1695	CD	ARG	B	369	3542	7112	6635	-1617	1138	-405	C
		ATOM	1696	NE	ARG	B	369	-2.734	-8.513	-11.485	1.00	50.50		N
		ANISOU	1696	NE	ARG	B	369	3925	7913	7351	-1634	956	-457	N
		ATOM	1697	CZ	ARG	B	369	-2.076	-8.625	-12.642	1.00	51.55		C
		ANISOU	1697	CZ	ARG	B	369	4162	7949	7474	-1642	750	-512	C
10		ATOM	1698	NH1	ARG	B	369	-0.809	-9.053	-12.673	1.00	49.87		N
		ANISOU	1698	NH1	ARG	B	369	4281	7475	7191	-1634	707	-525	N
		ATOM	1699	NH2	ARG	B	369	-2.696	-8.327	-13.783	1.00	52.31		N
		ANISOU	1699	NH2	ARG	B	369	4025	8226	7624	-1654	588	-550	N
		ATOM	1700	C	ARG	B	369	1.251	-5.377	-8.622	1.00	35.98		C
15		ANISOU	1700	C	ARG	B	369	3036	5502	5132	-717	1074	-428	C
		ATOM	1701	O	ARG	B	369	1.835	-6.216	-7.915	1.00	36.25		O
		ANISOU	1701	O	ARG	B	369	3277	5399	5097	-821	1132	-395	O
		ATOM	1702	N	ALA	B	370	1.852	-4.282	-9.083	1.00	33.63		N
		ANISOU	1702	N	ALA	B	370	2790	5164	4825	-519	958	-462	N
20		ATOM	1703	CA	ALA	B	370	3.242	-3.951	-8.791	1.00	31.07		C
		ANISOU	1703	CA	ALA	B	370	2741	4650	4415	-426	890	-472	C
		ATOM	1704	CB	ALA	B	370	4.209	-4.861	-9.590	1.00	29.47		C
		ANISOU	1704	CB	ALA	B	370	2663	4314	4222	-553	754	-475	C
		ATOM	1705	C	ALA	B	370	3.536	-2.485	-9.087	1.00	30.13		C
25		ANISOU	1705	C	ALA	B	370	2633	4522	4291	-205	816	-506	C
		ATOM	1706	O	ALA	B	370	2.837	-1.834	-9.869	1.00	30.45		O
		ANISOU	1706	O	ALA	B	370	2489	4676	4403	-120	767	-516	O
		ATOM	1707	N	THR	B	371	4.577	-1.968	-8.447	1.00	29.21		N
		ANISOU	1707	N	THR	B	371	2743	4267	4088	-115	802	-520	N
30		ATOM	1708	CA	THR	B	371	5.070	-0.623	-8.712	1.00	28.42		C
		ANISOU	1708	CA	THR	B	371	2713	4108	3978	60	723	-553	C
		ATOM	1709	CB	THR	B	371	4.594	0.442	-7.657	1.00	29.87		C
		ANISOU	1709	CB	THR	B	371	2940	4307	4103	233	854	-584	C
		ATOM	1710	OG1	THR	B	371	5.182	0.139	-6.396	1.00	31.90		O
35		ANISOU	1710	OG1	THR	B	371	3400	4485	4238	197	929	-590	O
		ATOM	1711	CG2	THR	B	371	3.077	0.486	-7.506	1.00	29.41		C
		ANISOU	1711	CG2	THR	B	371	2640	4434	4101	284	995	-575	C
		ATOM	1712	C	THR	B	371	6.587	-0.709	-8.730	1.00	26.74		C
		ANISOU	1712	C	THR	B	371	2715	3734	3710	26	611	-559	C
40		ATOM	1713	O	THR	B	371	7.167	-1.696	-8.278	1.00	27.73		O
		ANISOU	1713	O	THR	B	371	2942	3802	3791	-84	618	-537	O
		ATOM	1714	N	ALA	B	372	7.245	0.306	-9.262	1.00	24.71		N
		ANISOU	1714	N	ALA	B	372	2524	3405	3458	120	509	-581	N
		ATOM	1715	CA	ALA	B	372	8.691	0.260	-9.366	1.00	22.74		C
45		ANISOU	1715	CA	ALA	B	372	2435	3033	3172	78	402	-584	C
		ATOM	1716	CB	ALA	B	372	9.123	-0.612	-10.575	1.00	20.88		C
		ANISOU	1716	CB	ALA	B	372	2138	2802	2995	-29	305	-563	C
		ATOM	1717	C	ALA	B	372	9.313	1.651	-9.455	1.00	21.47		C
		ANISOU	1717	C	ALA	B	372	2381	2784	2993	183	338	-614	C
50		ATOM	1718	O	ALA	B	372	8.644	2.637	-9.767	1.00	22.51		O
		ANISOU	1718	O	ALA	B	372	2465	2931	3157	299	353	-625	O
		ATOM	1719	N	ILE	B	373	10.596	1.712	-9.160	1.00	20.23		N
		ANISOU	1719	N	ILE	B	373	2368	2532	2787	140	265	-623	N
		ATOM	1720	CA	ILE	B	373	11.406	2.858	-9.509	1.00	20.10		C
55		ANISOU	1720	CA	ILE	B	373	2445	2422	2770	176	179	-644	C
		ATOM	1721	CB	ILE	B	373	12.105	3.494	-8.281	1.00	20.66		C
		ANISOU	1721	CB	ILE	B	373	2702	2404	2743	188	175	-692	C
		ATOM	1722	CG1	ILE	B	373	11.114	3.705	-7.131	1.00	21.48		C
		ANISOU	1722	CG1	ILE	B	373	2853	2532	2776	274	308	-730	C
60		ATOM	1723	CD1	ILE	B	373	11.724	4.339	-5.870	1.00	23.57		C
		ANISOU	1723	CD1	ILE	B	373	3331	2712	2913	284	306	-794	C
		ATOM	1724	CG2	ILE	B	373	12.777	4.814	-8.687	1.00	20.73		C
		ANISOU	1724	CG2	ILE	B	373	2810	2302	2764	207	96	-719	C
		ATOM	1725	C	ILE	B	373	12.440	2.357	-10.494	1.00	18.98		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1725	C	ILE	B	373	2275	2270	2668	84	75	-613	C
	ATOM	1726	O	ILE	B	373	13.084	1.346	-10.229	1.00	18.45		O
	ANISOU	1726	O	ILE	B	373	2219	2210	2582	9	57	-599	O
	ATOM	1727	N	LEU	B	374	12.551	3.049	-11.633	1.00	19.11		N
5	ANISOU	1727	N	LEU	B	374	2259	2268	2733	102	18	-597	N
	ATOM	1728	CA	LEU	B	374	13.487	2.723	-12.716	1.00	17.96		C
	ANISOU	1728	CA	LEU	B	374	2084	2123	2617	26	-60	-569	C
	ATOM	1729	CB	LEU	B	374	12.712	2.403	-14.002	1.00	17.80		C
	ANISOU	1729	CB	LEU	B	374	1942	2182	2641	33	-70	-541	C
10	ATOM	1730	CG	LEU	B	374	13.468	2.237	-15.313	1.00	17.37		C
	ANISOU	1730	CG	LEU	B	374	1867	2137	2597	-24	-132	-516	C
	ATOM	1731	CD1	LEU	B	374	14.387	1.025	-15.269	1.00	16.31		C
	ANISOU	1731	CD1	LEU	B	374	1730	2011	2458	-107	-135	-527	C
	ATOM	1732	CD2	LEU	B	374	12.488	2.104	-16.488	1.00	19.06		C
15	ANISOU	1732	CD2	LEU	B	374	1980	2438	2824	-4	-153	-495	C
	ATOM	1733	C	LEU	B	374	14.409	3.901	-12.991	1.00	18.14		C
	ANISOU	1733	C	LEU	B	374	2200	2055	2636	17	-119	-567	C
	ATOM	1734	O	LEU	B	374	13.919	5.035	-13.178	1.00	17.76		O
	ANISOU	1734	O	LEU	B	374	2202	1951	2595	91	-114	-565	O
20	ATOM	1735	N	ARG	B	375	15.721	3.625	-12.989	1.00	16.95		N
	ANISOU	1735	N	ARG	B	375	2072	1891	2478	-71	-171	-564	N
	ATOM	1736	CA	ARG	B	375	16.705	4.489	-13.602	1.00	17.47		C
	ANISOU	1736	CA	ARG	B	375	2179	1903	2558	-127	-225	-546	C
	ATOM	1737	CB	ARG	B	375	17.892	4.764	-12.677	1.00	18.12		C
25	ANISOU	1737	CB	ARG	B	375	2329	1943	2611	-204	-277	-574	C
	ATOM	1738	CG	ARG	B	375	17.604	5.831	-11.648	1.00	18.30		C
	ANISOU	1738	CG	ARG	B	375	2500	1865	2590	-178	-276	-625	C
	ATOM	1739	CD	ARG	B	375	18.705	5.872	-10.626	1.00	17.52		C
	ANISOU	1739	CD	ARG	B	375	2459	1755	2442	-267	-347	-663	C
30	ATOM	1740	NE	ARG	B	375	18.396	6.839	-9.574	1.00	20.93		N
	ANISOU	1740	NE	ARG	B	375	3063	2084	2807	-248	-345	-733	N
	ATOM	1741	CZ	ARG	B	375	18.996	6.901	-8.392	1.00	22.13		C
	ANISOU	1741	CZ	ARG	B	375	3304	2227	2876	-303	-404	-787	C
	ATOM	1742	NH1	ARG	B	375	19.955	6.037	-8.075	1.00	23.45		N
35	ANISOU	1742	NH1	ARG	B	375	3389	2494	3028	-370	-480	-765	N
	ATOM	1743	NH2	ARG	B	375	18.629	7.827	-7.528	1.00	24.29		N
	ANISOU	1743	NH2	ARG	B	375	3760	2394	3076	-279	-390	-865	N
	ATOM	1744	C	ARG	B	375	17.209	3.921	-14.913	1.00	17.41		C
	ANISOU	1744	C	ARG	B	375	2079	1958	2578	-175	-238	-505	C
40	ATOM	1745	O	ARG	B	375	17.554	2.747	-15.016	1.00	17.68		O
	ANISOU	1745	O	ARG	B	375	2043	2057	2618	-198	-232	-507	O
	ATOM	1746	N	LYS	B	376	17.327	4.788	-15.899	1.00	17.92		N
	ANISOU	1746	N	LYS	B	376	2167	1990	2651	-187	-251	-466	N
	ATOM	1747	CA	LYS	B	376	17.635	4.368	-17.233	1.00	18.44		C
45	ANISOU	1747	CA	LYS	B	376	2166	2121	2718	-219	-249	-427	C
	ATOM	1748	CB	LYS	B	376	16.313	4.249	-17.956	1.00	19.30		C
	ANISOU	1748	CB	LYS	B	376	2242	2274	2816	-141	-242	-411	C
	ATOM	1749	CG	LYS	B	376	16.410	4.111	-19.385	1.00	24.35		C
	ANISOU	1749	CG	LYS	B	376	2854	2971	3426	-163	-251	-371	C
50	ATOM	1750	CD	LYS	B	376	15.233	4.725	-20.053	1.00	25.52		C
	ANISOU	1750	CD	LYS	B	376	3010	3132	3554	-79	-279	-330	C
	ATOM	1751	CE	LYS	B	376	15.262	4.220	-21.479	1.00	24.91		C
	ANISOU	1751	CE	LYS	B	376	2899	3145	3419	-111	-296	-304	C
	ATOM	1752	NZ	LYS	B	376	16.403	4.826	-22.153	1.00	24.23		N
55	ANISOU	1752	NZ	LYS	B	376	2885	3021	3302	-176	-279	-252	N
	ATOM	1753	C	LYS	B	376	18.551	5.421	-17.892	1.00	18.68		C
	ANISOU	1753	C	LYS	B	376	2253	2098	2746	-293	-262	-380	C
	ATOM	1754	O	LYS	B	376	18.550	6.582	-17.503	1.00	19.26		O
	ANISOU	1754	O	LYS	B	376	2432	2063	2823	-300	-277	-372	O
60	ATOM	1755	N	ALA	B	377	19.344	5.004	-18.873	1.00	18.41		N
	ANISOU	1755	N	ALA	B	377	2158	2132	2704	-354	-244	-351	N
	ATOM	1756	CA	ALA	B	377	20.187	5.927	-19.633	1.00	19.30		C
	ANISOU	1756	CA	ALA	B	377	2313	2213	2809	-443	-234	-292	C
	ATOM	1757	CB	ALA	B	377	21.642	5.877	-19.139	1.00	18.88		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1757	CB	ALA	B	377	2200	2184	2791	-557	-236	-304	C
	ATOM	1758	C	ALA	B	377	20.043	5.447	-21.070	1.00	19.24		C
	ANISOU	1758	C	ALA	B	377	2269	2292	2751	-429	-199	-253	C
	ATOM	1759	O	ALA	B	377	19.145	4.641	-21.328	1.00	18.97		O
5	ANISOU	1759	O	ALA	B	377	2199	2314	2694	-354	-205	-280	O
	ATOM	1760	N	THR	B	378	20.885	5.930	-21.991	1.00	19.58		N
	ANISOU	1760	N	THR	B	378	2326	2348	2766	-514	-160	-192	N
	ATOM	1761	CA	THR	B	378	20.812	5.546	-23.409	1.00	19.32		C
	ANISOU	1761	CA	THR	B	378	2285	2401	2653	-506	-118	-155	C
10	ATOM	1762	CB	THR	B	378	21.861	6.284	-24.233	1.00	20.34		C
	ANISOU	1762	CB	THR	B	378	2444	2534	2751	-620	-56	-76	C
	ATOM	1763	OG1	THR	B	378	21.768	7.684	-23.973	1.00	20.74		O
	ANISOU	1763	OG1	THR	B	378	2618	2442	2819	-665	-85	-11	O
	ATOM	1764	CG2	THR	B	378	21.664	6.025	-25.717	1.00	20.00		C
15	ANISOU	1764	CG2	THR	B	378	2433	2574	2591	-603	-11	-31	C
	ATOM	1765	C	THR	B	378	21.001	4.033	-23.613	1.00	19.30		C
	ANISOU	1765	C	THR	B	378	2178	2513	2641	-474	-84	-227	C
	ATOM	1766	O	THR	B	378	22.120	3.502	-23.476	1.00	19.32		O
	ANISOU	1766	O	THR	B	378	2096	2570	2676	-516	-33	-250	O
20	ATOM	1767	N	ARG	B	379	19.914	3.359	-23.968	1.00	18.79		N
	ANISOU	1767	N	ARG	B	379	2122	2483	2535	-401	-113	-261	N
	ATOM	1768	CA	ARG	B	379	19.921	1.918	-24.208	1.00	19.22		C
	ANISOU	1768	CA	ARG	B	379	2121	2610	2572	-377	-84	-338	C
	ATOM	1769	CB	ARG	B	379	20.587	1.584	-25.568	1.00	20.01		C
25	ANISOU	1769	CB	ARG	B	379	2232	2791	2579	-405	-10	-331	C
	ATOM	1770	CG	ARG	B	379	19.959	2.282	-26.762	1.00	21.05		C
	ANISOU	1770	CG	ARG	B	379	2454	2950	2595	-411	-34	-267	C
	ATOM	1771	CD	ARG	B	379	20.376	1.641	-28.060	1.00	20.86		C
	ANISOU	1771	CD	ARG	B	379	2459	3018	2448	-427	38	-291	C
30	ATOM	1772	NE	ARG	B	379	19.805	0.291	-28.188	1.00	21.07		N
	ANISOU	1772	NE	ARG	B	379	2478	3077	2449	-392	21	-402	N
	ATOM	1773	CZ	ARG	B	379	20.169	-0.608	-29.110	1.00	21.75		C
	ANISOU	1773	CZ	ARG	B	379	2601	3225	2438	-392	91	-469	C
	ATOM	1774	NH1	ARG	B	379	21.092	-0.337	-30.021	1.00	20.29		N
35	ANISOU	1774	NH1	ARG	B	379	2446	3100	2163	-415	195	-434	N
	ATOM	1775	NH2	ARG	B	379	19.594	-1.797	-29.126	1.00	22.67		N
	ANISOU	1775	NH2	ARG	B	379	2735	3336	2542	-377	67	-576	N
	ATOM	1776	C	ARG	B	379	20.589	1.159	-23.045	1.00	19.24		C
	ANISOU	1776	C	ARG	B	379	2052	2596	2663	-368	-69	-390	C
40	ATOM	1777	O	ARG	B	379	21.432	0.291	-23.257	1.00	18.60		O
	ANISOU	1777	O	ARG	B	379	1921	2560	2586	-362	-11	-424	O
	ATOM	1778	N	ARG	B	380	20.187	1.503	-21.816	1.00	20.13		N
	ANISOU	1778	N	ARG	B	380	2170	2643	2835	-353	-120	-395	N
	ATOM	1779	CA	ARG	B	380	20.790	0.946	-20.598	1.00	20.31		C
45	ANISOU	1779	CA	ARG	B	380	2146	2650	2921	-343	-125	-427	C
	ATOM	1780	CB	ARG	B	380	22.100	1.697	-20.262	1.00	21.34		C
	ANISOU	1780	CB	ARG	B	380	2237	2785	3086	-409	-126	-393	C
	ATOM	1781	CG	ARG	B	380	22.872	1.156	-19.087	1.00	24.13		C
	ANISOU	1781	CG	ARG	B	380	2528	3150	3490	-396	-155	-417	C
50	ATOM	1782	CD	ARG	B	380	24.060	2.071	-18.796	1.00	33.52		C
	ANISOU	1782	CD	ARG	B	380	3664	4360	4713	-492	-179	-385	C
	ATOM	1783	NE	ARG	B	380	24.427	2.050	-17.376	1.00	40.26		N
	ANISOU	1783	NE	ARG	B	380	4504	5201	5593	-496	-257	-405	N
	ATOM	1784	CZ	ARG	B	380	25.066	3.030	-16.744	1.00	41.26		C
55	ANISOU	1784	CZ	ARG	B	380	4631	5311	5736	-597	-318	-398	C
	ATOM	1785	NH1	ARG	B	380	25.427	4.118	-17.419	1.00	44.00		N
	ANISOU	1785	NH1	ARG	B	380	4992	5636	6088	-711	-298	-363	N
	ATOM	1786	NH2	ARG	B	380	25.345	2.919	-15.441	1.00	40.13		N
	ANISOU	1786	NH2	ARG	B	380	4489	5166	5591	-596	-403	-425	N
60	ATOM	1787	C	ARG	B	380	19.822	1.058	-19.448	1.00	18.92		C
	ANISOU	1787	C	ARG	B	380	2007	2415	2767	-309	-171	-445	C
	ATOM	1788	O	ARG	B	380	19.320	2.129	-19.164	1.00	19.53		O
	ANISOU	1788	O	ARG	B	380	2136	2442	2844	-309	-199	-423	O
	ATOM	1789	N	LEU	B	381	19.535	-0.060	-18.802	1.00	19.03		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1789	N	LEU	B	381	2006	2427	2796	-274	-165	-485	N
	ATOM	1790	CA	LEU	B	381	18.844	-0.036	-17.509	1.00	18.96		C
	ANISOU	1790	CA	LEU	B	381	2029	2373	2800	-249	-186	-498	C
	ATOM	1791	CB	LEU	B	381	18.117	-1.356	-17.258	1.00	18.22		C
5	ANISOU	1791	CB	LEU	B	381	1933	2281	2708	-229	-160	-529	C
	ATOM	1792	CG	LEU	B	381	17.277	-1.567	-16.000	1.00	18.70		C
	ANISOU	1792	CG	LEU	B	381	2025	2311	2770	-212	-152	-535	C
	ATOM	1793	CD1	LEU	B	381	16.073	-2.493	-16.303	1.00	16.19		C
10	ANISOU	1793	CD1	LEU	B	381	1688	2009	2454	-232	-118	-558	C
	ATOM	1794	CD2	LEU	B	381	18.121	-2.129	-14.860	1.00	18.01		C
	ANISOU	1794	CD2	LEU	B	381	1969	2193	2680	-196	-161	-527	C
	ATOM	1795	C	LEU	B	381	19.942	0.175	-16.476	1.00	18.78		C
	ANISOU	1795	C	LEU	B	381	2006	2334	2794	-262	-216	-491	C
	ATOM	1796	O	LEU	B	381	20.876	-0.627	-16.374	1.00	18.28		O
15	ANISOU	1796	O	LEU	B	381	1898	2301	2747	-252	-214	-491	O
	ATOM	1797	N	VAL	B	382	19.839	1.265	-15.730	1.00	19.29		N
	ANISOU	1797	N	VAL	B	382	2125	2353	2851	-279	-250	-489	N
	ATOM	1798	CA	VAL	B	382	20.836	1.563	-14.675	1.00	19.54		C
	ANISOU	1798	CA	VAL	B	382	2167	2377	2881	-314	-304	-493	C
20	ATOM	1799	CB	VAL	B	382	20.934	3.093	-14.380	1.00	20.23		C
	ANISOU	1799	CB	VAL	B	382	2332	2395	2958	-372	-341	-498	C
	ATOM	1800	CG1	VAL	B	382	21.928	3.397	-13.238	1.00	19.44		C
	ANISOU	1800	CG1	VAL	B	382	2249	2295	2842	-433	-418	-518	C
	ATOM	1801	CG2	VAL	B	382	21.319	3.844	-15.652	1.00	20.85		C
25	ANISOU	1801	CG2	VAL	B	382	2392	2472	3060	-431	-323	-459	C
	ATOM	1802	C	VAL	B	382	20.465	0.761	-13.431	1.00	19.16		C
	ANISOU	1802	C	VAL	B	382	2157	2320	2803	-264	-312	-511	C
	ATOM	1803	O	VAL	B	382	21.273	0.005	-12.911	1.00	20.08		O
	ANISOU	1803	O	VAL	B	382	2241	2469	2918	-251	-343	-500	O
30	ATOM	1804	N	GLN	B	383	19.221	0.890	-12.992	1.00	18.96		N
	ANISOU	1804	N	GLN	B	383	2195	2258	2752	-228	-275	-528	N
	ATOM	1805	CA	GLN	B	383	18.755	0.178	-11.818	1.00	19.44		C
	ANISOU	1805	CA	GLN	B	383	2306	2311	2769	-193	-258	-534	C
	ATOM	1806	CB	GLN	B	383	19.339	0.796	-10.539	1.00	20.96		C
35	ANISOU	1806	CB	GLN	B	383	2581	2483	2901	-208	-319	-552	C
	ATOM	1807	CG	GLN	B	383	18.988	0.003	-9.318	1.00	28.70		C
	ANISOU	1807	CG	GLN	B	383	3630	3464	3810	-172	-301	-545	C
	ATOM	1808	CD	GLN	B	383	19.917	0.256	-8.142	1.00	38.33		C
	ANISOU	1808	CD	GLN	B	383	4920	4691	4951	-190	-395	-552	C
40	ATOM	1809	OE1	GLN	B	383	20.549	1.348	-8.009	1.00	37.76		O
	ANISOU	1809	OE1	GLN	B	383	4873	4607	4867	-246	-467	-588	O
	ATOM	1810	NE2	GLN	B	383	20.021	-0.768	-7.272	1.00	39.52		N
	ANISOU	1810	NE2	GLN	B	383	5116	4861	5041	-153	-403	-515	N
	ATOM	1811	C	GLN	B	383	17.247	0.146	-11.767	1.00	17.86		C
45	ANISOU	1811	C	GLN	B	383	2121	2104	2562	-158	-184	-546	C
	ATOM	1812	O	GLN	B	383	16.598	1.075	-12.243	1.00	16.03		O
	ANISOU	1812	O	GLN	B	383	1886	1860	2344	-140	-169	-556	O
	ATOM	1813	N	LEU	B	384	16.709	-0.958	-11.236	1.00	17.13		N
	ANISOU	1813	N	LEU	B	384	2036	2020	2452	-149	-135	-536	N
50	ATOM	1814	CA	LEU	B	384	15.291	-1.124	-11.035	1.00	17.71		C
	ANISOU	1814	CA	LEU	B	384	2096	2111	2521	-135	-54	-542	C
	ATOM	1815	CB	LEU	B	384	14.719	-2.032	-12.141	1.00	17.64		C
	ANISOU	1815	CB	LEU	B	384	2001	2134	2568	-172	-28	-537	C
	ATOM	1816	CG	LEU	B	384	13.218	-2.392	-12.135	1.00	17.32		C
55	ANISOU	1816	CG	LEU	B	384	1897	2141	2542	-192	47	-541	C
	ATOM	1817	CD1	LEU	B	384	12.346	-1.239	-12.603	1.00	13.70		C
	ANISOU	1817	CD1	LEU	B	384	1367	1735	2105	-139	48	-553	C
	ATOM	1818	CD2	LEU	B	384	12.974	-3.626	-12.969	1.00	18.57		C
	ANISOU	1818	CD2	LEU	B	384	2013	2307	2737	-267	54	-544	C
60	ATOM	1819	C	LEU	B	384	14.984	-1.751	-9.669	1.00	18.33		C
	ANISOU	1819	C	LEU	B	384	2251	2179	2533	-132	-1	-529	C
	ATOM	1820	O	LEU	B	384	15.530	-2.822	-9.331	1.00	18.89		O
	ANISOU	1820	O	LEU	B	384	2361	2229	2587	-149	-12	-496	O
	ATOM	1821	N	ILE	B	385	14.075	-1.135	-8.921	1.00	18.21		N

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1821	N	ILE	B	385	2267	2178	2475	-99	66	-548	N
	ATOM	1822	CA	ILE	B	385	13.525	-1.725	-7.689	1.00	19.18		C
	ANISOU	1822	CA	ILE	B	385	2460	2308	2520	-101	151	-530	C
	ATOM	1823	CB	ILE	B	385	13.787	-0.844	-6.427	1.00	20.69		C
5	ANISOU	1823	CB	ILE	B	385	2787	2478	2597	-54	150	-561	C
	ATOM	1824	CG1	ILE	B	385	15.258	-0.466	-6.346	1.00	21.44		C
	ANISOU	1824	CG1	ILE	B	385	2946	2535	2668	-67	10	-570	C
	ATOM	1825	CD1	ILE	B	385	15.488	0.659	-5.362	1.00	26.55		C
10	ANISOU	1825	CD1	ILE	B	385	3726	3152	3211	-43	-15	-628	C
	ATOM	1826	CG2	ILE	B	385	13.366	-1.580	-5.128	1.00	19.88		C
	ANISOU	1826	CG2	ILE	B	385	2782	2389	2383	-62	240	-529	C
	ATOM	1827	C	ILE	B	385	12.005	-1.915	-7.850	1.00	19.64		C
	ANISOU	1827	C	ILE	B	385	2419	2430	2616	-108	271	-529	C
	ATOM	1828	O	ILE	B	385	11.281	-0.951	-8.157	1.00	18.63		O
15	ANISOU	1828	O	ILE	B	385	2224	2339	2517	-49	299	-561	O
	ATOM	1829	N	VAL	B	386	11.540	-3.146	-7.645	1.00	20.36		N
	ANISOU	1829	N	VAL	B	386	2497	2531	2708	-181	338	-489	N
	ATOM	1830	CA	VAL	B	386	10.150	-3.524	-7.836	1.00	21.66		C
20	ANISOU	1830	CA	VAL	B	386	2538	2772	2919	-229	446	-483	C
	ATOM	1831	CB	VAL	B	386	9.994	-4.733	-8.805	1.00	21.60		C
	ANISOU	1831	CB	VAL	B	386	2463	2755	2991	-344	426	-466	C
	ATOM	1832	CG1	VAL	B	386	8.493	-5.016	-9.111	1.00	20.69		C
	ANISOU	1832	CG1	VAL	B	386	2180	2746	2934	-422	516	-468	C
	ATOM	1833	CG2	VAL	B	386	10.748	-4.499	-10.055	1.00	20.40		C
25	ANISOU	1833	CG2	VAL	B	386	2279	2580	2894	-326	304	-494	C
	ATOM	1834	C	VAL	B	386	9.522	-3.950	-6.522	1.00	24.28		C
	ANISOU	1834	C	VAL	B	386	2935	3125	3166	-253	584	-450	C
	ATOM	1835	O	VAL	B	386	10.124	-4.709	-5.755	1.00	24.69		O
30	ANISOU	1835	O	VAL	B	386	3130	3109	3141	-286	588	-403	O
	ATOM	1836	N	SER	B	387	8.292	-3.476	-6.306	1.00	26.04		N
	ANISOU	1836	N	SER	B	387	3043	3448	3401	-229	700	-466	N
	ATOM	1837	CA	SER	B	387	7.460	-3.856	-5.191	1.00	28.34		C
	ANISOU	1837	CA	SER	B	387	3353	3793	3620	-262	868	-434	C
	ATOM	1838	CB	SER	B	387	7.142	-2.619	-4.362	1.00	28.84		C
35	ANISOU	1838	CB	SER	B	387	3457	3899	3602	-119	947	-482	C
	ATOM	1839	OG	SER	B	387	6.509	-2.975	-3.165	1.00	32.36		O
	ANISOU	1839	OG	SER	B	387	3957	4394	3942	-143	1122	-451	O
	ATOM	1840	C	SER	B	387	6.204	-4.454	-5.815	1.00	30.08		C
40	ANISOU	1840	C	SER	B	387	3358	4122	3947	-367	949	-418	C
	ATOM	1841	O	SER	B	387	5.597	-3.846	-6.691	1.00	30.62		O
	ANISOU	1841	O	SER	B	387	3245	4280	4109	-323	915	-454	O
	ATOM	1842	N	GLY	B	388	5.827	-5.658	-5.406	1.00	31.67		N
	ANISOU	1842	N	GLY	B	388	3582	4316	4136	-517	1043	-359	N
	ATOM	1843	CA	GLY	B	388	4.716	-6.338	-6.053	1.00	33.63		C
45	ANISOU	1843	CA	GLY	B	388	3625	4660	4491	-666	1099	-348	C
	ATOM	1844	C	GLY	B	388	3.996	-7.304	-5.157	1.00	36.39		C
	ANISOU	1844	C	GLY	B	388	3994	5032	4800	-818	1277	-279	C
	ATOM	1845	O	GLY	B	388	4.534	-7.712	-4.131	1.00	36.83		O
50	ANISOU	1845	O	GLY	B	388	4267	4991	4736	-821	1336	-224	O
	ATOM	1846	N	LYS	B	389	2.775	-7.660	-5.557	1.00	39.31		N
	ANISOU	1846	N	LYS	B	389	4131	5538	5266	-952	1358	-276	N
	ATOM	1847	CA	LYS	B	389	1.905	-8.546	-4.799	1.00	42.59		C
	ANISOU	1847	CA	LYS	B	389	4517	6004	5664	-1134	1549	-207	C
	ATOM	1848	CB	LYS	B	389	0.455	-8.392	-5.270	1.00	45.19		C
55	ANISOU	1848	CB	LYS	B	389	4495	6563	6111	-1219	1629	-227	C
	ATOM	1849	CG	LYS	B	389	-0.202	-7.040	-4.873	1.00	47.63		C
	ANISOU	1849	CG	LYS	B	389	4629	7059	6410	-998	1722	-262	C
	ATOM	1850	CD	LYS	B	389	-1.671	-6.960	-5.309	1.00	49.06		C
60	ANISOU	1850	CD	LYS	B	389	4426	7496	6718	-1071	1803	-268	C
	ATOM	1851	CE	LYS	B	389	-2.366	-5.751	-4.683	1.00	52.41		C
	ANISOU	1851	CE	LYS	B	389	4699	8096	7120	-834	1950	-290	C
	ATOM	1852	NZ	LYS	B	389	-3.530	-5.319	-5.518	1.00	55.24		N
	ANISOU	1852	NZ	LYS	B	389	4659	8702	7629	-803	1926	-313	N
	ATOM	1853	C	LYS	B	389	2.346	-10.017	-4.832	1.00	42.90		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1853	C	LYS	B	389	4742	5859	5697	-1341	1534	-147	C
	ATOM	1854	O	LYS	B	389	2.093	-10.748	-3.870	1.00	44.63		O
	ANISOU	1854	O	LYS	B	389	5079	6036	5842	-1458	1691	-62	O
	ATOM	1855	N	ASP	B	390	3.002	-10.448	-5.926	1.00	41.86		N
5	ANISOU	1855	N	ASP	B	390	4658	5610	5637	-1378	1356	-187	N
	ATOM	1856	CA	ASP	B	390	3.552	-11.836	-6.076	1.00	42.33		C
	ANISOU	1856	CA	ASP	B	390	4930	5455	5698	-1538	1326	-145	C
	ATOM	1857	CB	ASP	B	390	2.436	-12.859	-6.342	1.00	44.76		C
	ANISOU	1857	CB	ASP	B	390	5124	5793	6090	-1829	1420	-127	C
10	ATOM	1858	CG	ASP	B	390	1.592	-12.508	-7.561	1.00	44.57		C
	ANISOU	1858	CG	ASP	B	390	4794	5948	6194	-1903	1333	-218	C
	ATOM	1859	OD1	ASP	B	390	2.129	-11.946	-8.525	1.00	43.20		O
	ANISOU	1859	OD1	ASP	B	390	4586	5778	6050	-1774	1162	-293	O
	ATOM	1860	OD2	ASP	B	390	0.384	-12.797	-7.556	1.00	46.53		O
15	ANISOU	1860	OD2	ASP	B	390	4828	6344	6507	-2095	1432	-208	O
	ATOM	1861	C	ASP	B	390	4.666	-11.971	-7.140	1.00	40.43		C
	ANISOU	1861	C	ASP	B	390	4791	5075	5495	-1464	1126	-205	C
	ATOM	1862	O	ASP	B	390	4.998	-10.988	-7.788	1.00	39.18		O
	ANISOU	1862	O	ASP	B	390	4534	4994	5360	-1312	1011	-272	O
20	ATOM	1863	N	GLU	B	391	5.221	-13.178	-7.325	1.00	40.63		N
	ANISOU	1863	N	GLU	B	391	5020	4893	5525	-1566	1099	-179	N
	ATOM	1864	CA	GLU	B	391	6.313	-13.425	-8.304	1.00	39.14		C
	ANISOU	1864	CA	GLU	B	391	4939	4566	5365	-1487	939	-236	C
	ATOM	1865	CB	GLU	B	391	6.913	-14.847	-8.174	1.00	40.09		C
25	ANISOU	1865	CB	GLU	B	391	5332	4428	5474	-1569	953	-186	C
	ATOM	1866	CG	GLU	B	391	8.099	-14.930	-7.176	1.00	40.49		C
	ANISOU	1866	CG	GLU	B	391	5615	4348	5420	-1384	945	-95	C
	ATOM	1867	CD	GLU	B	391	8.475	-16.353	-6.733	1.00	43.04		C
	ANISOU	1867	CD	GLU	B	391	6221	4416	5717	-1454	995	-5	C
30	ATOM	1868	OE1	GLU	B	391	8.222	-17.326	-7.492	1.00	45.74		O
	ANISOU	1868	OE1	GLU	B	391	6626	4619	6135	-1610	998	-44	O
	ATOM	1869	OE2	GLU	B	391	9.052	-16.495	-5.615	1.00	44.91		O
	ANISOU	1869	OE2	GLU	B	391	6636	4581	5848	-1347	1025	106	O
	ATOM	1870	C	GLU	B	391	5.964	-13.106	-9.762	1.00	38.03		C
35	ANISOU	1870	C	GLU	B	391	4609	4525	5316	-1529	824	-347	C
	ATOM	1871	O	GLU	B	391	6.794	-12.544	-10.477	1.00	36.08		O
	ANISOU	1871	O	GLU	B	391	4365	4273	5069	-1380	701	-400	O
	ATOM	1872	N	GLN	B	392	4.750	-13.463	-10.192	1.00	39.60		N
	ANISOU	1872	N	GLN	B	392	4640	4822	5583	-1740	863	-375	N
40	ATOM	1873	CA	GLN	B	392	4.252	-13.121	-11.535	1.00	38.76		C
	ANISOU	1873	CA	GLN	B	392	4333	4849	5544	-1791	743	-474	C
	ATOM	1874	CB	GLN	B	392	2.892	-13.797	-11.814	1.00	42.01		C
	ANISOU	1874	CB	GLN	B	392	4577	5357	6027	-2076	791	-493	C
	ATOM	1875	CG	GLN	B	392	2.290	-13.588	-13.235	1.00	44.80		C
45	ANISOU	1875	CG	GLN	B	392	4722	5861	6437	-2162	643	-595	C
	ATOM	1876	CD	GLN	B	392	3.258	-13.942	-14.391	1.00	51.20		C
	ANISOU	1876	CD	GLN	B	392	5712	6521	7222	-2125	497	-682	C
	ATOM	1877	OE1	GLN	B	392	4.031	-14.910	-14.311	1.00	53.93		O
	ANISOU	1877	OE1	GLN	B	392	6326	6621	7545	-2163	520	-686	O
50	ATOM	1878	NE2	GLN	B	392	3.209	-13.147	-15.476	1.00	51.38		N
	ANISOU	1878	NE2	GLN	B	392	5589	6692	7241	-2037	355	-747	N
	ATOM	1879	C	GLN	B	392	4.181	-11.602	-11.782	1.00	36.21		C
	ANISOU	1879	C	GLN	B	392	3816	4724	5219	-1585	678	-496	C
	ATOM	1880	O	GLN	B	392	4.634	-11.118	-12.828	1.00	34.96		O
55	ANISOU	1880	O	GLN	B	392	3629	4588	5067	-1495	542	-558	O
	ATOM	1881	N	SER	B	393	3.649	-10.860	-10.813	1.00	34.95		N
	ANISOU	1881	N	SER	B	393	3549	4690	5041	-1504	785	-445	N
	ATOM	1882	CA	SER	B	393	3.519	-9.411	-10.941	1.00	33.17		C
	ANISOU	1882	CA	SER	B	393	3168	4622	4815	-1299	742	-464	C
60	ATOM	1883	CB	SER	B	393	2.667	-8.847	-9.825	1.00	34.13		C
	ANISOU	1883	CB	SER	B	393	3167	4880	4919	-1250	901	-417	C
	ATOM	1884	OG	SER	B	393	1.467	-9.579	-9.745	1.00	38.87		O
	ANISOU	1884	OG	SER	B	393	3599	5590	5579	-1467	999	-399	O
	ATOM	1885	C	SER	B	393	4.865	-8.711	-10.949	1.00	30.03		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1885	C	SER	B	393	2939	4115	4358	-1091	657	-471	C
	ATOM	1886	O	SER	B	393	5.056	-7.742	-11.689	1.00	28.60		O
	ANISOU	1886	O	SER	B	393	2679	3999	4189	-962	554	-508	O
	ATOM	1887	N	ILE	B	394	5.786	-9.209	-10.124	1.00	28.74		N
5	ANISOU	1887	N	ILE	B	394	3005	3789	4128	-1066	696	-428	N
	ATOM	1888	CA	ILE	B	394	7.140	-8.694	-10.082	1.00	26.95		C
	ANISOU	1888	CA	ILE	B	394	2927	3464	3849	-898	609	-432	C
	ATOM	1889	CB	ILE	B	394	7.945	-9.231	-8.866	1.00	27.07		C
	ANISOU	1889	CB	ILE	B	394	3165	3341	3778	-867	665	-365	C
10	ATOM	1890	CG1	ILE	B	394	7.375	-8.668	-7.560	1.00	27.49		C
	ANISOU	1890	CG1	ILE	B	394	3213	3475	3757	-823	791	-323	C
	ATOM	1891	CD1	ILE	B	394	7.721	-9.498	-6.320	1.00	30.31		C
	ANISOU	1891	CD1	ILE	B	394	3780	3722	4015	-857	877	-236	C
	ATOM	1892	CG2	ILE	B	394	9.424	-8.817	-8.994	1.00	25.51		C
15	ANISOU	1892	CG2	ILE	B	394	3088	3060	3545	-716	547	-374	C
	ATOM	1893	C	ILE	B	394	7.863	-8.944	-11.412	1.00	25.54		C
	ANISOU	1893	C	ILE	B	394	2774	3223	3709	-900	476	-486	C
	ATOM	1894	O	ILE	B	394	8.505	-8.056	-11.939	1.00	24.61		O
	ANISOU	1894	O	ILE	B	394	2639	3128	3585	-774	387	-513	O
20	ATOM	1895	N	ALA	B	395	7.737	-10.156	-11.945	1.00	26.28		N
	ANISOU	1895	N	ALA	B	395	2921	3231	3834	-1051	474	-504	N
	ATOM	1896	CA	ALA	B	395	8.278	-10.524	-13.247	1.00	25.51		C
	ANISOU	1896	CA	ALA	B	395	2857	3077	3758	-1069	369	-571	C
	ATOM	1897	CB	ALA	B	395	8.021	-12.026	-13.536	1.00	26.45		C
25	ANISOU	1897	CB	ALA	B	395	3085	3062	3901	-1258	400	-593	C
	ATOM	1898	C	ALA	B	395	7.733	-9.662	-14.399	1.00	24.95		C
	ANISOU	1898	C	ALA	B	395	2600	3169	3712	-1056	277	-628	C
	ATOM	1899	O	ALA	B	395	8.500	-9.203	-15.243	1.00	22.82		O
	ANISOU	1899	O	ALA	B	395	2354	2893	3424	-962	190	-660	O
30	ATOM	1900	N	GLU	B	396	6.413	-9.463	-14.442	1.00	26.63		N
	ANISOU	1900	N	GLU	B	396	2622	3534	3962	-1148	299	-631	N
	ATOM	1901	CA	GLU	B	396	5.790	-8.559	-15.438	1.00	27.37		C
	ANISOU	1901	CA	GLU	B	396	2521	3803	4073	-1108	201	-664	C
	ATOM	1902	CB	GLU	B	396	4.277	-8.475	-15.213	1.00	29.22		C
35	ANISOU	1902	CB	GLU	B	396	2520	4221	4361	-1205	245	-652	C
	ATOM	1903	CG	GLU	B	396	3.527	-9.794	-15.523	1.00	32.18		C
	ANISOU	1903	CG	GLU	B	396	2860	4592	4773	-1475	256	-688	C
	ATOM	1904	CD	GLU	B	396	2.066	-9.807	-15.029	1.00	35.39		C
	ANISOU	1904	CD	GLU	B	396	3014	5189	5242	-1595	335	-660	C
40	ATOM	1905	OE1	GLU	B	396	1.642	-8.836	-14.337	1.00	37.14		O
	ANISOU	1905	OE1	GLU	B	396	3100	5536	5475	-1443	406	-611	O
	ATOM	1906	OE2	GLU	B	396	1.350	-10.800	-15.323	1.00	36.33		O
	ANISOU	1906	OE2	GLU	B	396	3073	5331	5402	-1846	335	-690	O
	ATOM	1907	C	GLU	B	396	6.422	-7.145	-15.460	1.00	25.68		C
45	ANISOU	1907	C	GLU	B	396	2306	3621	3832	-885	157	-642	C
	ATOM	1908	O	GLU	B	396	6.720	-6.591	-16.526	1.00	25.72		O
	ANISOU	1908	O	GLU	B	396	2290	3663	3819	-824	51	-666	O
	ATOM	1909	N	ALA	B	397	6.661	-6.577	-14.284	1.00	24.70		N
	ANISOU	1909	N	ALA	B	397	2225	3468	3690	-776	239	-596	N
50	ATOM	1910	CA	ALA	B	397	7.333	-5.290	-14.153	1.00	22.65		C
	ANISOU	1910	CA	ALA	B	397	2004	3200	3402	-591	205	-582	C
	ATOM	1911	CB	ALA	B	397	7.298	-4.867	-12.714	1.00	23.05		C
	ANISOU	1911	CB	ALA	B	397	2103	3231	3422	-516	311	-548	C
	ATOM	1912	C	ALA	B	397	8.789	-5.313	-14.662	1.00	21.56		C
55	ANISOU	1912	C	ALA	B	397	2019	2943	3231	-547	131	-594	C
	ATOM	1913	O	ALA	B	397	9.232	-4.375	-15.328	1.00	21.06		O
	ANISOU	1913	O	ALA	B	397	1949	2897	3156	-455	60	-597	O
	ATOM	1914	N	ILE	B	398	9.536	-6.365	-14.321	1.00	20.90		N
	ANISOU	1914	N	ILE	B	398	2071	2737	3132	-604	158	-592	N
60	ATOM	1915	CA	ILE	B	398	10.913	-6.523	-14.788	1.00	20.40		C
	ANISOU	1915	CA	ILE	B	398	2124	2579	3048	-554	103	-603	C
	ATOM	1916	CB	ILE	B	398	11.619	-7.735	-14.116	1.00	20.53		C
	ANISOU	1916	CB	ILE	B	398	2288	2459	3053	-583	148	-585	C
	ATOM	1917	CG1	ILE	B	398	11.713	-7.536	-12.597	1.00	20.53		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1917	CG1	ILE	B	398	2348	2434	3017	-534	206	-527	C
	ATOM	1918	CD1	ILE	B	398	12.047	-8.805	-11.842	1.00	22.94		C
	ANISOU	1918	CD1	ILE	B	398	2798	2613	3304	-574	257	-485	C
	ATOM	1919	CG2	ILE	B	398	13.040	-7.930	-14.677	1.00	20.38		C
5	ANISOU	1919	CG2	ILE	B	398	2352	2365	3024	-509	97	-598	C
	ATOM	1920	C	ILE	B	398	10.967	-6.589	-16.325	1.00	20.24		C
	ANISOU	1920	C	ILE	B	398	2065	2595	3029	-586	28	-652	C
	ATOM	1921	O	ILE	B	398	11.740	-5.886	-16.951	1.00	20.94		O
	ANISOU	1921	O	ILE	B	398	2167	2693	3098	-509	-23	-654	O
10	ATOM	1922	N	ILE	B	399	10.109	-7.406	-16.920	1.00	21.51		N
	ANISOU	1922	N	ILE	B	399	2184	2784	3204	-714	22	-692	N
	ATOM	1923	CA	ILE	B	399	10.015	-7.555	-18.364	1.00	20.76		C
	ANISOU	1923	CA	ILE	B	399	2067	2736	3085	-764	-55	-750	C
	ATOM	1924	CB	ILE	B	399	8.910	-8.566	-18.768	1.00	21.63		C
15	ANISOU	1924	CB	ILE	B	399	2131	2876	3211	-946	-65	-802	C
	ATOM	1925	CG1	ILE	B	399	9.288	-9.984	-18.311	1.00	22.66		C
	ANISOU	1925	CG1	ILE	B	399	2424	2832	3354	-1040	7	-825	C
	ATOM	1926	CD1	ILE	B	399	8.135	-11.012	-18.342	1.00	22.92		C
	ANISOU	1926	CD1	ILE	B	399	2427	2865	3418	-1259	24	-864	C
20	ATOM	1927	CG2	ILE	B	399	8.658	-8.506	-20.279	1.00	19.65		C
	ANISOU	1927	CG2	ILE	B	399	1844	2714	2910	-995	-171	-865	C
	ATOM	1928	C	ILE	B	399	9.770	-6.221	-19.068	1.00	21.46		C
	ANISOU	1928	C	ILE	B	399	2050	2953	3152	-676	-131	-730	C
	ATOM	1929	O	ILE	B	399	10.477	-5.901	-20.019	1.00	21.12		O
25	ANISOU	1929	O	ILE	B	399	2054	2908	3061	-632	-180	-743	O
	ATOM	1930	N	VAL	B	400	8.760	-5.470	-18.605	1.00	22.28		N
	ANISOU	1930	N	VAL	B	400	2017	3161	3287	-643	-129	-693	N
	ATOM	1931	CA	VAL	B	400	8.423	-4.134	-19.122	1.00	21.58		C
	ANISOU	1931	CA	VAL	B	400	1838	3175	3186	-529	-194	-658	C
30	ATOM	1932	CB	VAL	B	400	7.122	-3.570	-18.448	1.00	22.39		C
	ANISOU	1932	CB	VAL	B	400	1773	3394	3339	-487	-166	-626	C
	ATOM	1933	CG1	VAL	B	400	6.830	-2.142	-18.873	1.00	21.87		C
	ANISOU	1933	CG1	VAL	B	400	1642	3400	3267	-328	-226	-580	C
	ATOM	1934	CG2	VAL	B	400	5.918	-4.465	-18.794	1.00	22.46		C
35	ANISOU	1934	CG2	VAL	B	400	1633	3525	3378	-639	-188	-659	C
	ATOM	1935	C	VAL	B	400	9.588	-3.144	-19.029	1.00	20.81		C
	ANISOU	1935	C	VAL	B	400	1846	2997	3063	-403	-194	-622	C
	ATOM	1936	O	VAL	B	400	9.846	-2.400	-19.974	1.00	21.60		O
	ANISOU	1936	O	VAL	B	400	1956	3127	3125	-349	-261	-603	O
40	ATOM	1937	N	ALA	B	401	10.301	-3.154	-17.909	1.00	20.61		N
	ANISOU	1937	N	ALA	B	401	1904	2873	3052	-370	-125	-610	N
	ATOM	1938	CA	ALA	B	401	11.458	-2.262	-17.687	1.00	19.84		C
	ANISOU	1938	CA	ALA	B	401	1899	2702	2937	-283	-131	-583	C
	ATOM	1939	CB	ALA	B	401	11.879	-2.301	-16.225	1.00	19.17		C
45	ANISOU	1939	CB	ALA	B	401	1879	2544	2860	-259	-68	-573	C
	ATOM	1940	C	ALA	B	401	12.637	-2.629	-18.608	1.00	19.90		C
	ANISOU	1940	C	ALA	B	401	1979	2670	2913	-310	-158	-597	C
	ATOM	1941	O	ALA	B	401	13.278	-1.758	-19.177	1.00	18.35		O
	ANISOU	1941	O	ALA	B	401	1809	2471	2693	-267	-189	-571	O
50	ATOM	1942	N	MSE	B	402	12.894	-3.931	-18.781	1.00	20.40		N
	ANISOU	1942	N	MSE	B	402	2079	2699	2974	-381	-136	-638	N
	ATOM	1943	CA	MSE	B	402	13.954	-4.385	-19.707	1.00	20.55		C
	ANISOU	1943	CA	MSE	B	402	2161	2687	2958	-388	-140	-664	C
	ATOM	1944	CB	MSE	B	402	14.214	-5.888	-19.546	1.00	21.32		C
55	ANISOU	1944	CB	MSE	B	402	2329	2705	3066	-438	-96	-712	C
	ATOM	1945	CG	MSE	B	402	14.859	-6.269	-18.205	1.00	19.84		C
	ANISOU	1945	CG	MSE	B	402	2193	2430	2916	-395	-51	-679	C
	ATOM	1946	SE	MSE	B	402	15.005	-8.198	-18.086	0.90	23.84		SE
	ANISOU	1946	SE	MSE	B	402	2821	2801	3435	-446	4	-723	SE
60	ATOM	1947	CE	MSE	B	402	16.111	-8.378	-16.488	1.00	20.10		C
	ANISOU	1947	CE	MSE	B	402	2411	2243	2983	-338	29	-648	C
	ATOM	1948	C	MSE	B	402	13.680	-4.012	-21.179	1.00	20.87		C
	ANISOU	1948	C	MSE	B	402	2183	2810	2939	-405	-194	-677	C
	ATOM	1949	O	MSE	B	402	14.567	-3.492	-21.882	1.00	21.13		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1949	O	MSE	B	402	2248	2848	2930	-371	-196	-660	O
	ATOM	1950	N	VAL	B	403	12.449	-4.240	-21.642	1.00	20.78		N
	ANISOU	1950	N	VAL	B	403	2109	2873	2913	-463	-241	-701	N
	ATOM	1951	CA	VAL	B	403	12.053	-3.857	-22.988	1.00	19.97		C
5	ANISOU	1951	CA	VAL	B	403	1987	2866	2733	-475	-317	-705	C
	ATOM	1952	CB	VAL	B	403	10.621	-4.369	-23.365	1.00	21.28		C
	ANISOU	1952	CB	VAL	B	403	2060	3133	2892	-566	-386	-744	C
	ATOM	1953	CG1	VAL	B	403	10.175	-3.778	-24.723	1.00	21.74		C
	ANISOU	1953	CG1	VAL	B	403	2093	3315	2853	-556	-494	-730	C
10	ATOM	1954	CG2	VAL	B	403	10.574	-5.860	-23.429	1.00	19.64		C
	ANISOU	1954	CG2	VAL	B	403	1912	2867	2684	-694	-358	-835	C
	ATOM	1955	C	VAL	B	403	12.131	-2.338	-23.143	1.00	19.26		C
	ANISOU	1955	C	VAL	B	403	1877	2811	2630	-375	-351	-621	C
	ATOM	1956	O	VAL	B	403	12.691	-1.835	-24.114	1.00	18.91		O
15	ANISOU	1956	O	VAL	B	403	1888	2786	2512	-354	-371	-595	O
	ATOM	1957	N	PHE	B	404	11.588	-1.610	-22.163	1.00	18.84		N
	ANISOU	1957	N	PHE	B	404	1763	2752	2642	-312	-343	-577	N
	ATOM	1958	CA	PHE	B	404	11.582	-0.161	-22.194	1.00	18.40		C
	ANISOU	1958	CA	PHE	B	404	1716	2693	2584	-208	-369	-502	C
20	ATOM	1959	CB	PHE	B	404	10.817	0.351	-20.968	1.00	18.31		C
	ANISOU	1959	CB	PHE	B	404	1642	2669	2645	-138	-339	-486	C
	ATOM	1960	CG	PHE	B	404	10.743	1.833	-20.875	1.00	18.13		C
	ANISOU	1960	CG	PHE	B	404	1654	2608	2627	-16	-355	-420	C
	ATOM	1961	CD1	PHE	B	404	9.712	2.526	-21.510	1.00	21.57		C
25	ANISOU	1961	CD1	PHE	B	404	2019	3125	3050	75	-424	-372	C
	ATOM	1962	CE1	PHE	B	404	9.623	3.911	-21.415	1.00	19.89		C
	ANISOU	1962	CE1	PHE	B	404	1867	2845	2845	209	-433	-306	C
	ATOM	1963	CZ	PHE	B	404	10.559	4.622	-20.695	1.00	19.02		C
	ANISOU	1963	CZ	PHE	B	404	1892	2583	2751	222	-377	-301	C
30	ATOM	1964	CE2	PHE	B	404	11.600	3.964	-20.055	1.00	17.62		C
	ANISOU	1964	CE2	PHE	B	404	1765	2349	2583	115	-323	-353	C
	ATOM	1965	CD2	PHE	B	404	11.686	2.554	-20.149	1.00	18.96		C
	ANISOU	1965	CD2	PHE	B	404	1868	2590	2748	11	-311	-406	C
	ATOM	1966	C	PHE	B	404	13.000	0.452	-22.282	1.00	17.86		C
35	ANISOU	1966	C	PHE	B	404	1756	2534	2495	-193	-334	-470	C
	ATOM	1967	O	PHE	B	404	13.187	1.520	-22.880	1.00	18.45		O
	ANISOU	1967	O	PHE	B	404	1877	2601	2533	-147	-362	-406	O
	ATOM	1968	N	SER	B	405	13.981	-0.215	-21.670	1.00	17.56		N
	ANISOU	1968	N	SER	B	405	1754	2433	2485	-234	-273	-506	N
40	ATOM	1969	CA	SER	B	405	15.373	0.264	-21.614	1.00	17.50		C
	ANISOU	1969	CA	SER	B	405	1807	2365	2476	-236	-240	-480	C
	ATOM	1970	CB	SER	B	405	16.229	-0.605	-20.689	1.00	17.20		C
	ANISOU	1970	CB	SER	B	405	1772	2280	2483	-256	-192	-518	C
	ATOM	1971	OG	SER	B	405	16.462	-1.911	-21.262	1.00	20.67		O
45	ANISOU	1971	OG	SER	B	405	2216	2738	2901	-289	-164	-571	O
	ATOM	1972	C	SER	B	405	16.025	0.316	-22.998	1.00	17.94		C
	ANISOU	1972	C	SER	B	405	1898	2462	2456	-265	-235	-464	C
	ATOM	1973	O	SER	B	405	16.989	1.044	-23.203	1.00	18.90		O
	ANISOU	1973	O	SER	B	405	2055	2558	2568	-275	-210	-418	O
50	ATOM	1974	N	GLN	B	406	15.494	-0.461	-23.935	1.00	18.28		N
	ANISOU	1974	N	GLN	B	406	1937	2573	2437	-291	-256	-504	N
	ATOM	1975	CA	GLN	B	406	16.000	-0.549	-25.304	1.00	19.28		C
	ANISOU	1975	CA	GLN	B	406	2116	2752	2458	-318	-243	-503	C
	ATOM	1976	CB	GLN	B	406	15.955	0.817	-25.999	1.00	19.35		C
55	ANISOU	1976	CB	GLN	B	406	2167	2777	2406	-291	-278	-404	C
	ATOM	1977	CG	GLN	B	406	14.532	1.352	-26.113	1.00	20.49		C
	ANISOU	1977	CG	GLN	B	406	2281	2965	2539	-240	-379	-367	C
	ATOM	1978	CD	GLN	B	406	14.456	2.710	-26.785	1.00	22.34		C
	ANISOU	1978	CD	GLN	B	406	2584	3192	2713	-188	-418	-254	C
60	ATOM	1979	OE1	GLN	B	406	15.224	3.623	-26.471	1.00	20.91		O
	ANISOU	1979	OE1	GLN	B	406	2462	2918	2562	-184	-372	-193	O
	ATOM	1980	NE2	GLN	B	406	13.519	2.849	-27.714	1.00	20.46		N
	ANISOU	1980	NE2	GLN	B	406	2345	3047	2383	-154	-512	-221	N
	ATOM	1981	C	GLN	B	406	17.374	-1.207	-25.426	1.00	19.38		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	1981	C	GLN	B	406	2150	2743	2469	-335	-149	-539	C
	ATOM	1982	O	GLN	B	406	18.039	-1.028	-26.432	1.00	21.03		O
	ANISOU	1982	O	GLN	B	406	2400	2994	2595	-348	-107	-522	O
	ATOM	1983	N	GLU	B	407	17.781	-1.976	-24.415	1.00	18.80		N
5	ANISOU	1983	N	GLU	B	407	2049	2614	2481	-325	-113	-581	N
	ATOM	1984	CA	GLU	B	407	19.109	-2.576	-24.370	1.00	19.09		C
	ANISOU	1984	CA	GLU	B	407	2080	2636	2537	-307	-30	-605	C
	ATOM	1985	CB	GLU	B	407	19.365	-3.321	-23.048	1.00	18.52		C
	ANISOU	1985	CB	GLU	B	407	1981	2495	2561	-275	-21	-629	C
10	ATOM	1986	CG	GLU	B	407	19.622	-2.433	-21.859	1.00	18.23		C
	ANISOU	1986	CG	GLU	B	407	1904	2432	2593	-268	-55	-571	C
	ATOM	1987	CD	GLU	B	407	20.657	-2.959	-20.879	1.00	20.08		C
	ANISOU	1987	CD	GLU	B	407	2101	2638	2890	-228	-36	-571	C
	ATOM	1988	OE1	GLU	B	407	21.347	-3.968	-21.157	1.00	24.36		O
15	ANISOU	1988	OE1	GLU	B	407	2638	3181	3437	-183	17	-605	O
	ATOM	1989	OE2	GLU	B	407	20.803	-2.340	-19.816	1.00	15.98		O
	ANISOU	1989	OE2	GLU	B	407	1565	2098	2410	-232	-77	-538	O
	ATOM	1990	C	GLU	B	407	19.347	-3.519	-25.533	1.00	20.61		C
	ANISOU	1990	C	GLU	B	407	2328	2862	2643	-309	25	-675	C
20	ATOM	1991	O	GLU	B	407	18.464	-4.263	-25.933	1.00	20.40		O
	ANISOU	1991	O	GLU	B	407	2351	2831	2570	-338	-7	-741	O
	ATOM	1992	N	ASP	B	408	20.557	-3.455	-26.078	1.00	21.85		N
	ANISOU	1992	N	ASP	B	408	2473	3056	2773	-287	113	-666	N
	ATOM	1993	CA	ASP	B	408	20.990	-4.385	-27.121	1.00	23.75		C
25	ANISOU	1993	CA	ASP	B	408	2775	3323	2925	-264	199	-744	C
	ATOM	1994	CB	ASP	B	408	22.417	-4.035	-27.600	1.00	24.31		C
	ANISOU	1994	CB	ASP	B	408	2792	3464	2982	-234	316	-708	C
	ATOM	1995	CG	ASP	B	408	22.868	-4.897	-28.750	1.00	28.24		C
	ANISOU	1995	CG	ASP	B	408	3363	3999	3369	-193	429	-792	C
30	ATOM	1996	OD1	ASP	B	408	22.218	-4.835	-29.818	1.00	30.42		O
	ANISOU	1996	OD1	ASP	B	408	3745	4314	3501	-240	412	-821	O
	ATOM	1997	OD2	ASP	B	408	23.858	-5.658	-28.585	1.00	29.98		O
	ANISOU	1997	OD2	ASP	B	408	3540	4212	3639	-103	531	-834	O
	ATOM	1998	C	ASP	B	408	20.919	-5.851	-26.691	1.00	23.93		C
35	ANISOU	1998	C	ASP	B	408	2843	3258	2993	-219	222	-841	C
	ATOM	1999	O	ASP	B	408	20.644	-6.717	-27.523	1.00	26.33		O
	ANISOU	1999	O	ASP	B	408	3249	3545	3209	-226	252	-934	O
	ATOM	2000	N	ACYS	B	409	21.157	-6.152	-25.422	0.50	23.03		N
	ANISOU	2000	N	ACYS	B	409	2677	3074	2999	-178	208	-820	N
40	ATOM	2001	N	BCYS	B	409	21.192	-6.118	-25.410	0.50	23.70		N
	ANISOU	2001	N	BCYS	B	409	2758	3161	3085	-177	209	-817	N
	ATOM	2002	CA	ACYS	B	409	21.117	-7.552	-25.013	0.50	23.05		C
	ANISOU	2002	CA	ACYS	B	409	2751	2969	3040	-130	237	-894	C
	ATOM	2003	CA	BCYS	B	409	21.114	-7.471	-24.832	0.50	24.45		C
45	ANISOU	2003	CA	BCYS	B	409	2916	3144	3231	-129	228	-883	C
	ATOM	2004	CB	ACYS	B	409	21.870	-7.779	-23.708	0.50	22.54		C
	ANISOU	2004	CB	ACYS	B	409	2619	2853	3090	-46	240	-844	C
	ATOM	2005	CB	BCYS	B	409	21.537	-7.471	-23.355	0.50	23.66		C
	ANISOU	2005	CB	BCYS	B	409	2747	2996	3247	-76	201	-820	C
50	ATOM	2006	SG	ACYS	B	409	20.881	-7.846	-22.247	0.50	20.66		S
	ANISOU	2006	SG	ACYS	B	409	2393	2533	2922	-91	150	-805	S
	ATOM	2007	SG	BCYS	B	409	23.267	-7.970	-23.032	0.50	30.51		S
	ANISOU	2007	SG	BCYS	B	409	3537	3875	4180	76	284	-802	S
	ATOM	2008	C	ACYS	B	409	19.678	-8.084	-24.950	0.50	23.04		C
55	ANISOU	2008	C	ACYS	B	409	2832	2904	3018	-222	165	-946	C
	ATOM	2009	C	BCYS	B	409	19.704	-8.048	-24.956	0.50	23.79		C
	ANISOU	2009	C	BCYS	B	409	2924	3003	3114	-220	166	-944	C
	ATOM	2010	O	ACYS	B	409	19.462	-9.292	-25.088	0.50	23.63		O
	ANISOU	2010	O	ACYS	B	409	3015	2881	3084	-225	195	-1031	O
60	ATOM	2011	O	BCYS	B	409	19.535	-9.243	-25.224	0.50	24.43		O
	ANISOU	2011	O	BCYS	B	409	3115	2992	3174	-221	200	-1033	O
	ATOM	2012	N	MSE	B	410	18.715	-7.174	-24.763	1.00	22.13		N
	ANISOU	2012	N	MSE	B	410	2663	2845	2900	-296	77	-895	N
	ATOM	2013	CA	MSE	B	410	17.291	-7.506	-24.815	1.00	22.65		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2013	CA	MSE	B	410	2756	2901	2947	-395	4	-935	C
	ATOM	2014	CB	MSE	B	410	16.469	-6.363	-24.180	1.00	22.12		C
	ANISOU	2014	CB	MSE	B	410	2589	2896	2920	-418	-73	-851	C
	ATOM	2015	CG	MSE	B	410	14.919	-6.489	-24.305	1.00	23.37		C
5	ANISOU	2015	CG	MSE	B	410	2717	3098	3064	-513	-154	-876	C
	ATOM	2016	SE	MSE	B	410	14.089	-5.800	-25.963	0.90	26.60		SE
	ANISOU	2016	SE	MSE	B	410	3114	3662	3331	-562	-257	-885	SE
	ATOM	2017	CE	MSE	B	410	14.915	-4.026	-25.917	1.00	18.43		C
	ANISOU	2017	CE	MSE	B	410	2040	2665	2297	-451	-245	-752	C
10	ATOM	2018	C	MSE	B	410	16.832	-7.795	-26.261	1.00	24.21		C
	ANISOU	2018	C	MSE	B	410	3030	3154	3015	-459	-18	-1015	C
	ATOM	2019	O	MSE	B	410	16.097	-8.758	-26.507	1.00	26.05		O
	ANISOU	2019	O	MSE	B	410	3337	3340	3223	-543	-42	-1103	O
	ATOM	2020	N	ILE	B	411	17.279	-6.966	-27.209	1.00	23.73		N
15	ANISOU	2020	N	ILE	B	411	2964	3190	2862	-434	-10	-984	N
	ATOM	2021	CA	ILE	B	411	16.968	-7.127	-28.621	1.00	24.58		C
	ANISOU	2021	CA	ILE	B	411	3159	3368	2813	-484	-31	-1049	C
	ATOM	2022	CB	ILE	B	411	17.364	-5.833	-29.388	1.00	25.91		C
	ANISOU	2022	CB	ILE	B	411	3303	3651	2892	-455	-32	-956	C
20	ATOM	2023	CG1	ILE	B	411	16.275	-4.775	-29.197	1.00	25.08		C
	ANISOU	2023	CG1	ILE	B	411	3119	3612	2799	-483	-161	-866	C
	ATOM	2024	CD1	ILE	B	411	16.743	-3.369	-29.342	1.00	27.19		C
	ANISOU	2024	CD1	ILE	B	411	3355	3923	3051	-438	-154	-740	C
	ATOM	2025	CG2	ILE	B	411	17.488	-6.094	-30.859	1.00	27.26		C
25	ANISOU	2025	CG2	ILE	B	411	3593	3891	2874	-479	-9	-1022	C
	ATOM	2026	C	ILE	B	411	17.630	-8.389	-29.207	1.00	25.31		C
	ANISOU	2026	C	ILE	B	411	3387	3383	2845	-464	69	-1174	C
	ATOM	2027	O	ILE	B	411	17.036	-9.078	-30.020	1.00	25.74		O
	ANISOU	2027	O	ILE	B	411	3553	3436	2793	-541	34	-1280	O
30	ATOM	2028	N	LYS	B	412	18.851	-8.695	-28.771	1.00	24.46		N
	ANISOU	2028	N	LYS	B	412	3273	3215	2808	-354	188	-1167	N
	ATOM	2029	CA	LYS	B	412	19.531	-9.938	-29.166	1.00	25.83		C
	ANISOU	2029	CA	LYS	B	412	3574	3291	2950	-290	300	-1283	C
	ATOM	2030	CB	LYS	B	412	21.037	-9.850	-28.886	1.00	25.21		C
35	ANISOU	2030	CB	LYS	B	412	3423	3220	2935	-138	430	-1237	C
	ATOM	2031	CG	LYS	B	412	21.773	-8.806	-29.742	1.00	23.92		C
	ANISOU	2031	CG	LYS	B	412	3193	3213	2684	-119	493	-1176	C
	ATOM	2032	CD	LYS	B	412	21.678	-9.165	-31.220	1.00	22.65		C
	ANISOU	2032	CD	LYS	B	412	3183	3097	2327	-142	550	-1280	C
40	ATOM	2033	CE	LYS	B	412	22.511	-8.236	-32.094	1.00	20.84		C
	ANISOU	2033	CE	LYS	B	412	2906	3018	1995	-121	647	-1213	C
	ATOM	2034	NZ	LYS	B	412	21.948	-6.857	-32.071	1.00	20.43		N
	ANISOU	2034	NZ	LYS	B	412	2781	3055	1928	-215	534	-1081	N
	ATOM	2035	C	LYS	B	412	18.949	-11.213	-28.536	1.00	26.84		C
45	ANISOU	2035	C	LYS	B	412	3802	3249	3147	-329	281	-1365	C
	ATOM	2036	O	LYS	B	412	19.226	-12.299	-29.012	1.00	28.99		O
	ANISOU	2036	O	LYS	B	412	4229	3413	3371	-300	355	-1482	O
	ATOM	2037	N	ALA	B	413	18.131	-11.068	-27.497	1.00	26.02		N
	ANISOU	2037	N	ALA	B	413	3625	3115	3145	-398	193	-1304	N
50	ATOM	2038	CA	ALA	B	413	17.459	-12.202	-26.858	1.00	27.44		C
	ANISOU	2038	CA	ALA	B	413	3899	3138	3389	-471	177	-1361	C
	ATOM	2039	CB	ALA	B	413	17.107	-11.851	-25.376	1.00	25.11		C
	ANISOU	2039	CB	ALA	B	413	3488	2823	3229	-476	137	-1246	C
	ATOM	2040	C	ALA	B	413	16.215	-12.670	-27.635	1.00	29.24		C
55	ANISOU	2040	C	ALA	B	413	4212	3372	3526	-653	93	-1466	C
	ATOM	2041	O	ALA	B	413	15.635	-13.725	-27.336	1.00	30.83		O
	ANISOU	2041	O	ALA	B	413	4521	3433	3761	-753	87	-1536	O
	ATOM	2042	N	VAL	B	414	15.801	-11.893	-28.634	1.00	30.33		N
	ANISOU	2042	N	VAL	B	414	4307	3674	3544	-707	19	-1472	N
60	ATOM	2043	CA	VAL	B	414	14.651	-12.269	-29.456	1.00	31.87		C
	ANISOU	2043	CA	VAL	B	414	4563	3912	3634	-882	-88	-1572	C
	ATOM	2044	CB	VAL	B	414	14.201	-11.126	-30.389	1.00	31.88		C
	ANISOU	2044	CB	VAL	B	414	4477	4127	3508	-905	-194	-1526	C
	ATOM	2045	CG1	VAL	B	414	13.206	-11.626	-31.408	1.00	31.91		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2045	CG1	VAL	B	414	4563	4190	3369	-1074	-313	-1646	C
	ATOM	2046	CG2	VAL	B	414	13.590	-10.006	-29.588	1.00	28.46		C
	ANISOU	2046	CG2	VAL	B	414	3837	3799	3177	-893	-273	-1380	C
	ATOM	2047	C	VAL	B	414	14.958	-13.532	-30.257	1.00	35.11		C
5	ANISOU	2047	C	VAL	B	414	5209	4187	3946	-914	-25	-1742	C
	ATOM	2048	O	VAL	B	414	16.029	-13.670	-30.835	1.00	35.73		O
	ANISOU	2048	O	VAL	B	414	5385	4238	3952	-784	89	-1784	O
	ATOM	2049	N	ARG	B	415	14.009	-14.465	-30.261	1.00	37.91		N
10	ANISOU	2049	N	ARG	B	415	5655	4449	4300	-1095	-89	-1844	N
	ATOM	2050	CA	ARG	B	415	14.141	-15.699	-31.006	1.00	40.89		C
	ANISOU	2050	CA	ARG	B	415	6289	4669	4580	-1157	-43	-2026	C
	ATOM	2051	CB	ARG	B	415	14.084	-16.913	-30.063	1.00	42.00		C
	ANISOU	2051	CB	ARG	B	415	6555	4547	4856	-1201	23	-2063	C
	ATOM	2052	CG	ARG	B	415	15.271	-17.043	-29.108	1.00	41.66		C
15	ANISOU	2052	CG	ARG	B	415	6513	4373	4942	-969	167	-1969	C
	ATOM	2053	CD	ARG	B	415	16.615	-17.211	-29.848	1.00	43.44		C
	ANISOU	2053	CD	ARG	B	415	6857	4564	5085	-754	304	-2032	C
	ATOM	2054	NE	ARG	B	415	17.736	-17.257	-28.906	1.00	44.27		N
20	ANISOU	2054	NE	ARG	B	415	6911	4587	5323	-528	418	-1927	N
	ATOM	2055	CZ	ARG	B	415	18.535	-16.226	-28.622	1.00	44.39		C
	ANISOU	2055	CZ	ARG	B	415	6727	4761	5378	-377	446	-1798	C
	ATOM	2056	NH1	ARG	B	415	18.363	-15.052	-29.226	1.00	42.41		N
	ANISOU	2056	NH1	ARG	B	415	6333	4736	5045	-419	386	-1752	N
	ATOM	2057	NH2	ARG	B	415	19.524	-16.371	-27.736	1.00	42.84		N
25	ANISOU	2057	NH2	ARG	B	415	6481	4495	5301	-187	528	-1712	N
	ATOM	2058	C	ARG	B	415	13.024	-15.753	-32.047	1.00	42.87		C
	ANISOU	2058	C	ARG	B	415	6576	5039	4676	-1373	-200	-2134	C
	ATOM	2059	O	ARG	B	415	11.836	-15.538	-31.722	1.00	43.41		O
30	ANISOU	2059	O	ARG	B	415	6496	5203	4795	-1543	-339	-2096	O
	ATOM	2060	N	GLY	B	416	13.414	-16.003	-33.295	1.00	43.58		N
	ANISOU	2060	N	GLY	B	416	6847	5143	4569	-1359	-179	-2265	N
	ATOM	2061	CA	GLY	B	416	12.471	-16.015	-34.399	1.00	44.83		C
	ANISOU	2061	CA	GLY	B	416	7057	5437	4540	-1552	-342	-2373	C
	ATOM	2062	C	GLY	B	416	12.035	-14.620	-34.801	1.00	43.68		C
35	ANISOU	2062	C	GLY	B	416	6698	5579	4320	-1531	-474	-2238	C
	ATOM	2063	O	GLY	B	416	12.426	-13.636	-34.182	1.00	40.62		O
	ANISOU	2063	O	GLY	B	416	6131	5266	4039	-1383	-433	-2066	O
	ATOM	2064	N	ASP	B	417	11.220	-14.550	-35.849	1.00	45.98		N
40	ANISOU	2064	N	ASP	B	417	7025	6022	4422	-1682	-641	-2318	N
	ATOM	2065	CA	ASP	B	417	10.713	-13.285	-36.381	1.00	46.13		C
	ANISOU	2065	CA	ASP	B	417	6873	6313	4341	-1660	-791	-2193	C
	ATOM	2066	CB	ASP	B	417	10.301	-13.462	-37.856	1.00	49.03		C
	ANISOU	2066	CB	ASP	B	417	7403	6811	4417	-1778	-927	-2325	C
	ATOM	2067	CG	ASP	B	417	11.490	-13.487	-38.803	1.00	49.91		C
45	ANISOU	2067	CG	ASP	B	417	7750	6890	4322	-1638	-771	-2389	C
	ATOM	2068	OD1	ASP	B	417	12.611	-13.144	-38.380	1.00	49.40		O
	ANISOU	2068	OD1	ASP	B	417	7671	6752	4348	-1440	-575	-2299	O
	ATOM	2069	OD2	ASP	B	417	11.303	-13.843	-39.981	1.00	54.40		O
50	ANISOU	2069	OD2	ASP	B	417	8515	7522	4632	-1731	-844	-2530	O
	ATOM	2070	C	ASP	B	417	9.534	-12.731	-35.573	1.00	45.38		C
	ANISOU	2070	C	ASP	B	417	6492	6343	4409	-1743	-943	-2070	C
	ATOM	2071	O	ASP	B	417	8.746	-13.487	-34.982	1.00	46.51		O
	ANISOU	2071	O	ASP	B	417	6586	6417	4670	-1916	-994	-2131	O
	ATOM	2072	N	LEU	B	418	9.403	-11.409	-35.575	1.00	44.04		N
55	ANISOU	2072	N	LEU	B	418	6141	6353	4239	-1621	-1007	-1897	N
	ATOM	2073	CA	LEU	B	418	8.293	-10.755	-34.905	1.00	43.53		C
	ANISOU	2073	CA	LEU	B	418	5799	6428	4311	-1656	-1143	-1777	C
	ATOM	2074	CB	LEU	B	418	8.810	-9.653	-33.980	1.00	40.59		C
	ANISOU	2074	CB	LEU	B	418	5283	6046	4093	-1450	-1042	-1589	C
60	ATOM	2075	CG	LEU	B	418	9.808	-10.051	-32.878	1.00	38.75		C
	ANISOU	2075	CG	LEU	B	418	5100	5593	4029	-1362	-833	-1577	C
	ATOM	2076	CD1	LEU	B	418	10.306	-8.834	-32.112	1.00	35.47		C
	ANISOU	2076	CD1	LEU	B	418	4554	5196	3728	-1178	-766	-1401	C
	ATOM	2077	CD2	LEU	B	418	9.250	-11.068	-31.915	1.00	39.40		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2077	CD2	LEU	B	418	5149	5552	4270	-1500	-811	-1642	C
	ATOM	2078	C	LEU	B	418	7.241	-10.235	-35.898	1.00	45.84		C
	ANISOU	2078	C	LEU	B	418	6001	6978	4439	-1735	-1384	-1763	C
	ATOM	2079	O	LEU	B	418	7.535	-9.394	-36.757	1.00	46.01		O
5	ANISOU	2079	O	LEU	B	418	6071	7120	4290	-1621	-1431	-1691	O
	ATOM	2080	N	ASN	B	419	6.020	-10.759	-35.773	1.00	47.64		N
	ANISOU	2080	N	ASN	B	419	6094	7293	4714	-1936	-1539	-1827	N
	ATOM	2081	CA	ASN	B	419	4.923	-10.448	-36.687	1.00	50.61		C
	ANISOU	2081	CA	ASN	B	419	6358	7932	4940	-2038	-1799	-1833	C
10	ATOM	2082	CB	ASN	B	419	4.793	-11.549	-37.747	1.00	53.52		C
	ANISOU	2082	CB	ASN	B	419	6955	8284	5095	-2259	-1891	-2052	C
	ATOM	2083	CG	ASN	B	419	5.967	-11.586	-38.713	1.00	54.69		C
	ANISOU	2083	CG	ASN	B	419	7420	8348	5013	-2152	-1783	-2116	C
	ATOM	2084	OD1	ASN	B	419	6.257	-10.605	-39.409	1.00	55.78		O
15	ANISOU	2084	OD1	ASN	B	419	7577	8623	4994	-1997	-1823	-2005	O
	ATOM	2085	ND2	ASN	B	419	6.645	-12.728	-38.767	1.00	55.63		N
	ANISOU	2085	ND2	ASN	B	419	7797	8235	5105	-2228	-1634	-2293	N
	ATOM	2086	C	ASN	B	419	3.565	-10.242	-35.997	1.00	51.57		C
	ANISOU	2086	C	ASN	B	419	6141	8219	5233	-2130	-1940	-1764	C
20	ATOM	2087	O	ASN	B	419	2.515	-10.554	-36.574	1.00	54.24		O
	ANISOU	2087	O	ASN	B	419	6375	8743	5492	-2316	-2156	-1834	O
	ATOM	2088	N	PHE	B	420	3.590	-9.705	-34.776	1.00	49.62		N
	ANISOU	2088	N	PHE	B	420	5719	7922	5214	-1998	-1820	-1630	N
	ATOM	2089	CA	PHE	B	420	2.373	-9.504	-33.976	1.00	50.02		C
25	ANISOU	2089	CA	PHE	B	420	5439	8121	5445	-2058	-1900	-1560	C
	ATOM	2090	CB	PHE	B	420	2.712	-9.101	-32.538	1.00	47.52		C
	ANISOU	2090	CB	PHE	B	420	5026	7673	5357	-1910	-1701	-1445	C
	ATOM	2091	CG	PHE	B	420	3.276	-10.218	-31.721	1.00	47.20		C
	ANISOU	2091	CG	PHE	B	420	5137	7373	5425	-2025	-1514	-1537	C
30	ATOM	2092	CD1	PHE	B	420	4.620	-10.241	-31.399	1.00	44.34		C
	ANISOU	2092	CD1	PHE	B	420	4992	6786	5070	-1880	-1326	-1527	C
	ATOM	2093	CE1	PHE	B	420	5.152	-11.271	-30.647	1.00	43.10		C
	ANISOU	2093	CE1	PHE	B	420	4980	6389	5008	-1957	-1165	-1597	C
	ATOM	2094	CZ	PHE	B	420	4.344	-12.302	-30.207	1.00	45.97		C
35	ANISOU	2094	CZ	PHE	B	420	5299	6709	5458	-2199	-1177	-1678	C
	ATOM	2095	CE2	PHE	B	420	2.993	-12.306	-30.516	1.00	48.22		C
	ANISOU	2095	CE2	PHE	B	420	5362	7217	5743	-2379	-1352	-1696	C
	ATOM	2096	CD2	PHE	B	420	2.461	-11.261	-31.273	1.00	49.98		C
	ANISOU	2096	CD2	PHE	B	420	5411	7705	5873	-2283	-1527	-1627	C
40	ATOM	2097	C	PHE	B	420	1.406	-8.507	-34.584	1.00	51.27		C
	ANISOU	2097	C	PHE	B	420	5363	8585	5534	-1978	-2129	-1452	C
	ATOM	2098	O	PHE	B	420	1.809	-7.486	-35.147	1.00	50.92		O
	ANISOU	2098	O	PHE	B	420	5373	8599	5374	-1767	-2166	-1341	O
	ATOM	2099	N	VAL	B	421	0.124	-8.817	-34.417	1.00	53.07		N
45	ANISOU	2099	N	VAL	B	421	5320	9003	5842	-2148	-2275	-1475	N
	ATOM	2100	CA	VAL	B	421	-0.949	-8.217	-35.197	1.00	55.35		C
	ANISOU	2100	CA	VAL	B	421	5378	9617	6037	-2138	-2546	-1417	C
	ATOM	2101	CB	VAL	B	421	-1.320	-9.170	-36.362	1.00	58.38		C
	ANISOU	2101	CB	VAL	B	421	5876	10095	6212	-2420	-2749	-1597	C
50	ATOM	2102	CG1	VAL	B	421	-2.801	-9.548	-36.346	1.00	62.13		C
	ANISOU	2102	CG1	VAL	B	421	6005	10842	6760	-2651	-2962	-1635	C
	ATOM	2103	CG2	VAL	B	421	-0.857	-8.594	-37.696	1.00	59.48		C
	ANISOU	2103	CG2	VAL	B	421	6222	10317	6062	-2293	-2882	-1575	C
	ATOM	2104	C	VAL	B	421	-2.181	-7.818	-34.375	1.00	55.75		C
55	ANISOU	2104	C	VAL	B	421	5010	9876	6297	-2121	-2603	-1318	C
	ATOM	2105	O	VAL	B	421	-2.233	-7.998	-33.161	1.00	53.74		O
	ANISOU	2105	O	VAL	B	421	4650	9514	6255	-2128	-2419	-1295	O
	ATOM	2106	N	ALA	B	424	-8.330	-7.054	-34.316	1.00	83.41		N
	ANISOU	2106	N	ALA	B	424	6624	14886	10180	-2373	-3433	-1118	N
60	ATOM	2107	CA	ALA	B	424	-8.109	-5.823	-35.078	1.00	83.39		C
	ANISOU	2107	CA	ALA	B	424	6684	14974	10028	-2016	-3575	-972	C
	ATOM	2108	CB	ALA	B	424	-7.502	-4.750	-34.179	1.00	80.03		C
	ANISOU	2108	CB	ALA	B	424	6321	14356	9729	-1638	-3328	-816	C
	ATOM	2109	C	ALA	B	424	-7.235	-6.044	-36.325	1.00	83.09		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2109	C	ALA	B	424	7065	14815	9689	-2072	-3692	-1054	C
	ATOM	2110	O	ALA	B	424	-7.422	-5.385	-37.357	1.00	84.69		O
	ANISOU	2110	O	ALA	B	424	7275	15205	9698	-1925	-3931	-976	O
	ATOM	2111	N	ASN	B	425	-6.283	-6.973	-36.206	1.00	81.03		N
5	ANISOU	2111	N	ASN	B	425	7157	14244	9387	-2271	-3512	-1204	N
	ATOM	2112	CA	ASN	B	425	-5.300	-7.305	-37.262	1.00	80.26		C
	ANISOU	2112	CA	ASN	B	425	7495	13986	9016	-2326	-3549	-1305	C
	ATOM	2113	CB	ASN	B	425	-5.987	-7.797	-38.555	1.00	84.45		C
	ANISOU	2113	CB	ASN	B	425	8001	14775	9309	-2559	-3886	-1417	C
10	ATOM	2114	CG	ASN	B	425	-5.041	-8.595	-39.454	1.00	84.90		C
	ANISOU	2114	CG	ASN	B	425	8524	14628	9108	-2728	-3870	-1597	C
	ATOM	2115	OD1	ASN	B	425	-4.463	-9.623	-39.028	1.00	84.50		O
	ANISOU	2115	OD1	ASN	B	425	8690	14300	9116	-2930	-3673	-1754	O
	ATOM	2116	ND2	ASN	B	425	-4.880	-8.118	-40.700	1.00	86.24		N
15	ANISOU	2116	ND2	ASN	B	425	8858	14929	8980	-2630	-4069	-1569	N
	ATOM	2117	C	ASN	B	425	-4.251	-6.211	-37.547	1.00	77.13		C
	ANISOU	2117	C	ASN	B	425	7357	13442	8505	-1975	-3451	-1163	C
	ATOM	2118	O	ASN	B	425	-3.579	-6.224	-38.607	1.00	77.12		O
	ANISOU	2118	O	ASN	B	425	7668	13393	8242	-1971	-3519	-1205	O
20	ATOM	2119	N	GLN	B	426	-4.098	-5.287	-36.579	1.00	74.28		N
	ANISOU	2119	N	GLN	B	426	6881	13003	8337	-1698	-3278	-1003	N
	ATOM	2120	CA	GLN	B	426	-3.150	-4.184	-36.730	1.00	71.77		C
	ANISOU	2120	CA	GLN	B	426	6789	12536	7944	-1383	-3177	-858	C
	ATOM	2121	CB	GLN	B	426	-3.642	-2.945	-35.979	1.00	71.41		C
25	ANISOU	2121	CB	GLN	B	426	6489	12565	8078	-1069	-3143	-660	C
	ATOM	2122	CG	GLN	B	426	-4.259	-1.900	-36.902	1.00	75.93		C
	ANISOU	2122	CG	GLN	B	426	6956	13384	8510	-844	-3402	-501	C
	ATOM	2123	CD	GLN	B	426	-5.489	-1.238	-36.301	1.00	79.00		C
	ANISOU	2123	CD	GLN	B	426	6914	14008	9093	-664	-3487	-379	C
30	ATOM	2124	OE1	GLN	B	426	-5.395	-0.480	-35.325	1.00	77.23		O
	ANISOU	2124	OE1	GLN	B	426	6622	13667	9055	-431	-3303	-275	O
	ATOM	2125	NE2	GLN	B	426	-6.657	-1.526	-36.882	1.00	82.04		N
	ANISOU	2125	NE2	GLN	B	426	7000	14737	9434	-772	-3766	-397	N
	ATOM	2126	C	GLN	B	426	-1.744	-4.552	-36.272	1.00	67.70		C
35	ANISOU	2126	C	GLN	B	426	6612	11664	7446	-1398	-2889	-925	C
	ATOM	2127	O	GLN	B	426	-1.531	-4.823	-35.079	1.00	65.90		O
	ANISOU	2127	O	GLN	B	426	6334	11273	7433	-1414	-2675	-943	O
	ATOM	2128	N	ARG	B	427	-0.793	-4.546	-37.212	1.00	66.20		N
	ANISOU	2128	N	ARG	B	427	6756	11371	7026	-1382	-2882	-954	N
40	ATOM	2129	CA	ARG	B	427	0.612	-4.844	-36.900	1.00	62.42		C
	ANISOU	2129	CA	ARG	B	427	6586	10583	6550	-1372	-2617	-1008	C
	ATOM	2130	CB	ARG	B	427	1.461	-4.982	-38.166	1.00	63.31		C
	ANISOU	2130	CB	ARG	B	427	7032	10653	6369	-1395	-2643	-1064	C
	ATOM	2131	CG	ARG	B	427	2.893	-5.323	-37.824	1.00	60.44		C
45	ANISOU	2131	CG	ARG	B	427	6941	9997	6027	-1376	-2363	-1121	C
	ATOM	2132	CD	ARG	B	427	3.839	-5.274	-38.987	1.00	62.17		C
	ANISOU	2132	CD	ARG	B	427	7475	10176	5972	-1350	-2335	-1148	C
	ATOM	2133	NE	ARG	B	427	5.192	-5.498	-38.488	1.00	60.41		N
	ANISOU	2133	NE	ARG	B	427	7440	9693	5819	-1299	-2053	-1179	N
50	ATOM	2134	CZ	ARG	B	427	5.789	-6.686	-38.435	1.00	61.00		C
	ANISOU	2134	CZ	ARG	B	427	7681	9608	5886	-1440	-1921	-1360	C
	ATOM	2135	NH1	ARG	B	427	5.165	-7.770	-38.880	1.00	62.69		N
	ANISOU	2135	NH1	ARG	B	427	7932	9872	6017	-1663	-2042	-1538	N
	ATOM	2136	NH2	ARG	B	427	7.015	-6.789	-37.940	1.00	59.05		N
55	ANISOU	2136	NH2	ARG	B	427	7568	9150	5718	-1357	-1675	-1364	N
	ATOM	2137	C	ARG	B	427	1.276	-3.851	-35.925	1.00	58.46		C
	ANISOU	2137	C	ARG	B	427	6084	9911	6216	-1119	-2409	-857	C
	ATOM	2138	O	ARG	B	427	1.461	-2.673	-36.244	1.00	58.25		O
	ANISOU	2138	O	ARG	B	427	6093	9913	6128	-892	-2441	-697	O
60	ATOM	2139	N	LEU	B	428	1.661	-4.365	-34.758	1.00	55.08		N
	ANISOU	2139	N	LEU	B	428	5646	9295	5987	-1171	-2200	-912	N
	ATOM	2140	CA	LEU	B	428	2.179	-3.563	-33.637	1.00	51.23		C
	ANISOU	2140	CA	LEU	B	428	5136	8653	5678	-972	-2010	-796	C
	ATOM	2141	CB	LEU	B	428	2.409	-4.453	-32.403	1.00	49.31		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2141	CB	LEU	B	428	4870	8241	5623	-1094	-1820	-888	C
	ATOM	2142	CG	LEU	B	428	1.337	-5.465	-31.970	1.00	49.76		C
	ANISOU	2142	CG	LEU	B	428	4722	8398	5786	-1320	-1873	-988	C
	ATOM	2143	CD1	LEU	B	428	1.713	-6.150	-30.667	1.00	44.96		C
5	ANISOU	2143	CD1	LEU	B	428	4138	7589	5355	-1393	-1657	-1034	C
	ATOM	2144	CD2	LEU	B	428	-0.032	-4.799	-31.836	1.00	52.31		C
	ANISOU	2144	CD2	LEU	B	428	4701	8986	6189	-1248	-2023	-893	C
	ATOM	2145	C	LEU	B	428	3.472	-2.848	-33.998	1.00	48.96		C
	ANISOU	2145	C	LEU	B	428	5109	8206	5286	-819	-1897	-722	C
10	ATOM	2146	O	LEU	B	428	4.238	-3.337	-34.840	1.00	49.40		O
	ANISOU	2146	O	LEU	B	428	5395	8205	5171	-902	-1877	-801	O
	ATOM	2147	N	ASN	B	429	3.711	-1.694	-33.375	1.00	46.41		N
	ANISOU	2147	N	ASN	B	429	4755	7813	5065	-605	-1817	-577	N
	ATOM	2148	CA	ASN	B	429	4.977	-1.001	-33.559	1.00	43.84		C
15	ANISOU	2148	CA	ASN	B	429	4661	7322	4674	-490	-1689	-503	C
	ATOM	2149	CB	ASN	B	429	4.911	0.478	-33.085	1.00	43.47		C
	ANISOU	2149	CB	ASN	B	429	4569	7235	4712	-252	-1670	-326	C
	ATOM	2150	CG	ASN	B	429	4.794	0.641	-31.557	1.00	42.88		C
	ANISOU	2150	CG	ASN	B	429	4363	7053	4876	-193	-1534	-322	C
20	ATOM	2151	OD1	ASN	B	429	4.994	-0.294	-30.774	1.00	42.00		O
	ANISOU	2151	OD1	ASN	B	429	4224	6868	4867	-321	-1425	-433	O
	ATOM	2152	ND2	ASN	B	429	4.489	1.865	-31.133	1.00	43.80		N
	ANISOU	2152	ND2	ASN	B	429	4425	7149	5068	13	-1537	-190	N
	ATOM	2153	C	ASN	B	429	6.117	-1.831	-32.934	1.00	40.62		C
25	ANISOU	2153	C	ASN	B	429	4391	6708	4334	-590	-1479	-612	C
	ATOM	2154	O	ASN	B	429	5.847	-2.720	-32.118	1.00	40.12		O
	ANISOU	2154	O	ASN	B	429	4238	6603	4402	-701	-1423	-708	O
	ATOM	2155	N	PRO	B	430	7.376	-1.594	-33.358	1.00	38.69		N
	ANISOU	2155	N	PRO	B	430	4362	6345	3995	-554	-1365	-592	N
30	ATOM	2156	CA	PRO	B	430	8.524	-2.378	-32.884	1.00	36.44		C
	ANISOU	2156	CA	PRO	B	430	4197	5886	3762	-622	-1177	-688	C
	ATOM	2157	CB	PRO	B	430	9.721	-1.573	-33.388	1.00	36.11		C
	ANISOU	2157	CB	PRO	B	430	4322	5772	3625	-531	-1078	-599	C
	ATOM	2158	CG	PRO	B	430	9.217	-1.000	-34.683	1.00	38.86		C
35	ANISOU	2158	CG	PRO	B	430	4726	6273	3765	-501	-1232	-528	C
	ATOM	2159	CD	PRO	B	430	7.784	-0.603	-34.373	1.00	39.49		C
	ANISOU	2159	CD	PRO	B	430	4600	6481	3923	-451	-1407	-472	C
	ATOM	2160	C	PRO	B	430	8.614	-2.593	-31.371	1.00	34.07		C
	ANISOU	2160	C	PRO	B	430	3795	5462	3688	-612	-1058	-701	C
40	ATOM	2161	O	PRO	B	430	8.953	-3.700	-30.951	1.00	33.84		O
	ANISOU	2161	O	PRO	B	430	3804	5342	3711	-716	-973	-815	O
	ATOM	2162	N	MSE	B	431	8.323	-1.571	-30.566	1.00	32.32		N
	ANISOU	2162	N	MSE	B	431	3467	5227	3587	-484	-1051	-588	N
	ATOM	2163	CA	MSE	B	431	8.460	-1.693	-29.110	1.00	30.33		C
45	ANISOU	2163	CA	MSE	B	431	3144	4860	3520	-467	-933	-597	C
	ATOM	2164	CB	MSE	B	431	8.410	-0.314	-28.423	1.00	30.13		C
	ANISOU	2164	CB	MSE	B	431	3074	4793	3580	-299	-911	-470	C
	ATOM	2165	CG	MSE	B	431	9.687	0.570	-28.662	1.00	28.94		C
	ANISOU	2165	CG	MSE	B	431	3090	4524	3381	-227	-832	-394	C
50	ATOM	2166	SE	MSE	B	431	11.365	-0.168	-27.993	0.90	30.04		SE
	ANISOU	2166	SE	MSE	B	431	3345	4495	3575	-303	-647	-469	SE
	ATOM	2167	CE	MSE	B	431	10.912	-0.117	-26.095	1.00	24.52		C
	ANISOU	2167	CE	MSE	B	431	2526	3717	3074	-261	-588	-475	C
	ATOM	2168	C	MSE	B	431	7.432	-2.651	-28.519	1.00	30.68		C
55	ANISOU	2168	C	MSE	B	431	3039	4964	3655	-580	-963	-679	C
	ATOM	2169	O	MSE	B	431	7.735	-3.405	-27.597	1.00	29.00		O
	ANISOU	2169	O	MSE	B	431	2836	4642	3540	-644	-854	-738	O
	ATOM	2170	N	HIS	B	432	6.223	-2.634	-29.071	1.00	32.59		N
	ANISOU	2170	N	HIS	B	432	3139	5384	3859	-612	-1115	-677	N
60	ATOM	2171	CA	HIS	B	432	5.147	-3.532	-28.631	1.00	33.91		C
	ANISOU	2171	CA	HIS	B	432	3137	5640	4109	-754	-1154	-751	C
	ATOM	2172	CB	HIS	B	432	3.767	-2.933	-28.954	1.00	36.00		C
	ANISOU	2172	CB	HIS	B	432	3166	6133	4378	-703	-1318	-688	C
	ATOM	2173	CG	HIS	B	432	3.389	-1.817	-28.034	1.00	37.73		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2173	CG	HIS	B	432	3252	6360	4722	-503	-1267	-573	C
	ATOM	2174	ND1	HIS	B	432	3.912	-0.546	-28.149	1.00	38.20		N
	ANISOU	2174	ND1	HIS	B	432	3408	6352	4753	-297	-1254	-461	N
	ATOM	2175	CE1	HIS	B	432	3.416	0.220	-27.191	1.00	39.33		C
5	ANISOU	2175	CE1	HIS	B	432	3427	6494	5023	-146	-1198	-394	C
	ATOM	2176	NE2	HIS	B	432	2.611	-0.513	-26.443	1.00	40.30		N
	ANISOU	2176	NE2	HIS	B	432	3363	6697	5252	-246	-1161	-453	N
	ATOM	2177	CD2	HIS	B	432	2.578	-1.793	-26.950	1.00	40.85		C
	ANISOU	2177	CD2	HIS	B	432	3447	6806	5268	-481	-1207	-560	C
10	ATOM	2178	C	HIS	B	432	5.320	-4.919	-29.218	1.00	33.99		C
	ANISOU	2178	C	HIS	B	432	3258	5618	4040	-966	-1169	-895	C
	ATOM	2179	O	HIS	B	432	4.875	-5.903	-28.645	1.00	34.07		O
	ANISOU	2179	O	HIS	B	432	3212	5601	4134	-1120	-1134	-973	O
	ATOM	2180	N	GLN	B	433	5.985	-4.971	-30.363	1.00	34.16		N
15	ANISOU	2180	N	GLN	B	433	3456	5630	3893	-972	-1208	-928	N
	ATOM	2181	CA	GLN	B	433	6.441	-6.214	-30.990	1.00	35.06		C
	ANISOU	2181	CA	GLN	B	433	3747	5667	3907	-1135	-1189	-1076	C
	ATOM	2182	CB	GLN	B	433	7.210	-5.810	-32.268	1.00	35.84		C
	ANISOU	2182	CB	GLN	B	433	4029	5789	3799	-1070	-1217	-1069	C
20	ATOM	2183	CG	GLN	B	433	7.217	-6.698	-33.462	1.00	39.05		C
	ANISOU	2183	CG	GLN	B	433	4591	6231	4014	-1213	-1290	-1208	C
	ATOM	2184	CD	GLN	B	433	5.848	-7.071	-33.976	1.00	42.97		C
	ANISOU	2184	CD	GLN	B	433	4958	6913	4453	-1371	-1501	-1267	C
	ATOM	2185	OE1	GLN	B	433	5.439	-8.218	-33.828	1.00	44.60		O
25	ANISOU	2185	OE1	GLN	B	433	5176	7077	4694	-1566	-1513	-1404	O
	ATOM	2186	NE2	GLN	B	433	5.138	-6.124	-34.603	1.00	44.73		N
	ANISOU	2186	NE2	GLN	B	433	5063	7344	4587	-1294	-1676	-1164	N
	ATOM	2187	C	GLN	B	433	7.344	-6.960	-29.970	1.00	32.64		C
	ANISOU	2187	C	GLN	B	433	3545	5136	3721	-1150	-995	-1123	C
30	ATOM	2188	O	GLN	B	433	7.122	-8.135	-29.653	1.00	33.52		O
	ANISOU	2188	O	GLN	B	433	3691	5166	3879	-1305	-963	-1228	O
	ATOM	2189	N	LEU	B	434	8.341	-6.245	-29.452	1.00	30.05		N
	ANISOU	2189	N	LEU	B	434	3268	4710	3441	-990	-877	-1037	N
	ATOM	2190	CA	LEU	B	434	9.293	-6.738	-28.427	1.00	28.11		C
35	ANISOU	2190	CA	LEU	B	434	3102	4275	3305	-960	-710	-1051	C
	ATOM	2191	CB	LEU	B	434	10.386	-5.685	-28.177	1.00	24.78		C
	ANISOU	2191	CB	LEU	B	434	2718	3801	2896	-791	-627	-949	C
	ATOM	2192	CG	LEU	B	434	11.320	-5.482	-29.364	1.00	25.69		C
	ANISOU	2192	CG	LEU	B	434	2976	3925	2859	-752	-609	-959	C
40	ATOM	2193	CD1	LEU	B	434	12.113	-4.184	-29.212	1.00	22.35		C
	ANISOU	2193	CD1	LEU	B	434	2551	3492	2449	-617	-559	-833	C
	ATOM	2194	CD2	LEU	B	434	12.245	-6.705	-29.605	1.00	21.91		C
	ANISOU	2194	CD2	LEU	B	434	2655	3326	2345	-797	-500	-1079	C
	ATOM	2195	C	LEU	B	434	8.644	-7.100	-27.082	1.00	27.61		C
45	ANISOU	2195	C	LEU	B	434	2919	4169	3404	-1009	-667	-1038	C
	ATOM	2196	O	LEU	B	434	8.945	-8.142	-26.504	1.00	27.00		O
	ANISOU	2196	O	LEU	B	434	2924	3952	3382	-1083	-579	-1101	O
	ATOM	2197	N	LEU	B	435	7.790	-6.207	-26.587	1.00	27.73		N
	ANISOU	2197	N	LEU	B	435	2752	4297	3485	-949	-716	-950	N
50	ATOM	2198	CA	LEU	B	435	7.020	-6.426	-25.375	1.00	28.98		C
	ANISOU	2198	CA	LEU	B	435	2775	4458	3779	-991	-669	-930	C
	ATOM	2199	CB	LEU	B	435	6.102	-5.222	-25.124	1.00	28.92		C
	ANISOU	2199	CB	LEU	B	435	2567	4606	3816	-876	-730	-833	C
	ATOM	2200	CG	LEU	B	435	5.273	-5.249	-23.842	1.00	32.08		C
55	ANISOU	2200	CG	LEU	B	435	2806	5035	4346	-886	-657	-802	C
	ATOM	2201	CD1	LEU	B	435	6.159	-5.150	-22.588	1.00	31.09		C
	ANISOU	2201	CD1	LEU	B	435	2790	4739	4284	-805	-505	-770	C
	ATOM	2202	CD2	LEU	B	435	4.251	-4.124	-23.876	1.00	32.55		C
	ANISOU	2202	CD2	LEU	B	435	2657	5276	4437	-759	-732	-723	C
60	ATOM	2203	C	LEU	B	435	6.201	-7.743	-25.431	1.00	30.18		C
	ANISOU	2203	C	LEU	B	435	2897	4620	3949	-1216	-695	-1029	C
	ATOM	2204	O	LEU	B	435	6.344	-8.595	-24.548	1.00	29.89		O
	ANISOU	2204	O	LEU	B	435	2917	4450	3988	-1295	-589	-1055	O
	ATOM	2205	N	ARG	B	436	5.363	-7.905	-26.462	1.00	31.87		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2205	N	ARG	B	436	3035	4987	4086	-1327	-841	-1079	N
	ATOM	2206	CA	ARG	B	436	4.545	-9.104	-26.599	1.00	34.36		C
	ANISOU	2206	CA	ARG	B	436	3319	5321	4414	-1575	-884	-1182	C
	ATOM	2207	CB	ARG	B	436	3.584	-9.014	-27.800	1.00	37.45		C
5	ANISOU	2207	CB	ARG	B	436	3591	5932	4704	-1679	-1087	-1225	C
	ATOM	2208	CG	ARG	B	436	2.381	-8.053	-27.651	1.00	42.59		C
	ANISOU	2208	CG	ARG	B	436	3929	6839	5416	-1610	-1192	-1127	C
	ATOM	2209	CD	ARG	B	436	1.953	-7.793	-26.187	1.00	48.03		C
10	ANISOU	2209	CD	ARG	B	436	4449	7521	6280	-1555	-1056	-1045	C
	ATOM	2210	NE	ARG	B	436	0.516	-8.001	-26.006	1.00	55.04		N
	ANISOU	2210	NE	ARG	B	436	5043	8622	7247	-1697	-1128	-1046	N
	ATOM	2211	CZ	ARG	B	436	-0.097	-8.150	-24.827	1.00	58.20		C
	ANISOU	2211	CZ	ARG	B	436	5280	9046	7789	-1739	-1005	-1006	C
	ATOM	2212	NH1	ARG	B	436	0.594	-8.108	-23.690	1.00	57.05		N
15	ANISOU	2212	NH1	ARG	B	436	5256	8713	7706	-1645	-815	-964	N
	ATOM	2213	NH2	ARG	B	436	-1.419	-8.336	-24.784	1.00	60.68		N
	ANISOU	2213	NH2	ARG	B	436	5297	9587	8172	-1880	-1073	-1007	N
	ATOM	2214	C	ARG	B	436	5.378	-10.388	-26.679	1.00	33.35		C
20	ANISOU	2214	C	ARG	B	436	3452	4963	4256	-1688	-796	-1293	C
	ATOM	2215	O	ARG	B	436	4.996	-11.405	-26.118	1.00	33.93		O
	ANISOU	2215	O	ARG	B	436	3548	4941	4401	-1862	-742	-1344	O
	ATOM	2216	N	HIS	B	437	6.510	-10.333	-27.376	1.00	31.27		N
	ANISOU	2216	N	HIS	B	437	3388	4606	3887	-1584	-771	-1325	N
	ATOM	2217	CA	HIS	B	437	7.375	-11.493	-27.486	1.00	30.46		C
25	ANISOU	2217	CA	HIS	B	437	3535	4282	3755	-1640	-676	-1429	C
	ATOM	2218	CB	HIS	B	437	8.585	-11.176	-28.355	1.00	29.42		C
	ANISOU	2218	CB	HIS	B	437	3569	4112	3499	-1490	-645	-1449	C
	ATOM	2219	CG	HIS	B	437	9.604	-12.270	-28.367	1.00	29.25		C
30	ANISOU	2219	CG	HIS	B	437	3789	3861	3463	-1483	-520	-1543	C
	ATOM	2220	ND1	HIS	B	437	9.469	-13.411	-29.135	1.00	30.43		N
	ANISOU	2220	ND1	HIS	B	437	4121	3919	3524	-1636	-540	-1701	N
	ATOM	2221	CE1	HIS	B	437	10.511	-14.195	-28.937	1.00	30.95		C
	ANISOU	2221	CE1	HIS	B	437	4388	3767	3605	-1556	-401	-1752	C
	ATOM	2222	NE2	HIS	B	437	11.318	-13.608	-28.068	1.00	28.06		N
35	ANISOU	2222	NE2	HIS	B	437	3956	3372	3333	-1368	-306	-1628	N
	ATOM	2223	CD2	HIS	B	437	10.769	-12.407	-27.692	1.00	28.33		C
	ANISOU	2223	CD2	HIS	B	437	3765	3589	3411	-1332	-377	-1504	C
	ATOM	2224	C	HIS	B	437	7.870	-11.985	-26.129	1.00	28.91		C
40	ANISOU	2224	C	HIS	B	437	3395	3896	3694	-1603	-520	-1385	C
	ATOM	2225	O	HIS	B	437	7.863	-13.189	-25.851	1.00	29.06		O
	ANISOU	2225	O	HIS	B	437	3551	3745	3744	-1735	-462	-1459	O
	ATOM	2226	N	PHE	B	438	8.358	-11.040	-25.329	1.00	26.73		N
	ANISOU	2226	N	PHE	B	438	3039	3636	3480	-1419	-459	-1264	N
	ATOM	2227	CA	PHE	B	438	8.937	-11.304	-24.028	1.00	25.80		C
45	ANISOU	2227	CA	PHE	B	438	2974	3366	3465	-1349	-329	-1204	C
	ATOM	2228	CB	PHE	B	438	9.963	-10.216	-23.649	1.00	23.35		C
	ANISOU	2228	CB	PHE	B	438	2648	3063	3161	-1126	-284	-1110	C
	ATOM	2229	CG	PHE	B	438	11.265	-10.342	-24.421	1.00	22.62		C
50	ANISOU	2229	CG	PHE	B	438	2709	2894	2992	-1025	-250	-1151	C
	ATOM	2230	CD1	PHE	B	438	11.950	-11.575	-24.458	1.00	24.84		C
	ANISOU	2230	CD1	PHE	B	438	3175	2995	3269	-1043	-173	-1228	C
	ATOM	2231	CE1	PHE	B	438	13.122	-11.730	-25.196	1.00	23.69		C
	ANISOU	2231	CE1	PHE	B	438	3151	2795	3054	-935	-123	-1274	C
55	ATOM	2232	CZ	PHE	B	438	13.623	-10.638	-25.892	1.00	23.06		C
	ANISOU	2232	CZ	PHE	B	438	3011	2846	2905	-836	-146	-1233	C
	ATOM	2233	CE2	PHE	B	438	12.934	-9.427	-25.889	1.00	20.07		C
	ANISOU	2233	CE2	PHE	B	438	2476	2627	2525	-836	-232	-1152	C
	ATOM	2234	CD2	PHE	B	438	11.757	-9.288	-25.168	1.00	20.56		C
60	ANISOU	2234	CD2	PHE	B	438	2415	2738	2659	-917	-286	-1115	C
	ATOM	2235	C	PHE	B	438	7.911	-11.559	-22.925	1.00	27.49		C
	ANISOU	2235	C	PHE	B	438	3066	3597	3782	-1462	-296	-1158	C
	ATOM	2236	O	PHE	B	438	8.232	-12.211	-21.936	1.00	27.88		O
	ANISOU	2236	O	PHE	B	438	3210	3490	3892	-1471	-192	-1132	O
	ATOM	2237	N	GLN	B	439	6.680	-11.078	-23.096	1.00	29.49		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2237	N	GLN	B	439	3108	4045	4051	-1546	-381	-1143	N
	ATOM	2238	CA	GLN	B	439	5.604	-11.431	-22.158	1.00	31.31		C
	ANISOU	2238	CA	GLN	B	439	3202	4318	4377	-1685	-336	-1111	C
	ATOM	2239	CB	GLN	B	439	4.397	-10.507	-22.312	1.00	31.66		C
5	ANISOU	2239	CB	GLN	B	439	2958	4625	4445	-1684	-425	-1067	C
	ATOM	2240	CG	GLN	B	439	4.664	-9.127	-21.740	1.00	31.16		C
	ANISOU	2240	CG	GLN	B	439	2805	4631	4404	-1437	-393	-961	C
	ATOM	2241	CD	GLN	B	439	3.554	-8.135	-21.987	1.00	35.12		C
	ANISOU	2241	CD	GLN	B	439	3041	5378	4926	-1380	-482	-914	C
10	ATOM	2242	OE1	GLN	B	439	2.791	-8.271	-22.941	1.00	39.50		O
	ANISOU	2242	OE1	GLN	B	439	3478	6083	5446	-1486	-616	-957	O
	ATOM	2243	NE2	GLN	B	439	3.451	-7.121	-21.115	1.00	33.78		N
	ANISOU	2243	NE2	GLN	B	439	2777	5251	4808	-1202	-413	-827	N
	ATOM	2244	C	GLN	B	439	5.233	-12.903	-22.334	1.00	33.82		C
15	ANISOU	2244	C	GLN	B	439	3637	4511	4701	-1941	-324	-1206	C
	ATOM	2245	O	GLN	B	439	4.854	-13.575	-21.370	1.00	33.96		O
	ANISOU	2245	O	GLN	B	439	3667	4441	4794	-2059	-225	-1176	O
	ATOM	2246	N	LYS	B	440	5.402	-13.399	-23.562	1.00	35.41		N
	ANISOU	2246	N	LYS	B	440	3956	4685	4812	-2025	-415	-1321	N
20	ATOM	2247	CA	LYS	B	440	5.169	-14.800	-23.882	1.00	38.51		C
	ANISOU	2247	CA	LYS	B	440	4517	4922	5193	-2267	-412	-1437	C
	ATOM	2248	CB	LYS	B	440	5.054	-14.997	-25.392	1.00	40.39		C
	ANISOU	2248	CB	LYS	B	440	4818	5225	5302	-2360	-556	-1571	C
	ATOM	2249	CG	LYS	B	440	3.714	-14.593	-25.976	1.00	42.28		C
25	ANISOU	2249	CG	LYS	B	440	4794	5744	5525	-2519	-721	-1588	C
	ATOM	2250	CD	LYS	B	440	3.577	-15.162	-27.360	1.00	46.14		C
	ANISOU	2250	CD	LYS	B	440	5410	6249	5872	-2677	-861	-1746	C
	ATOM	2251	CE	LYS	B	440	3.177	-16.611	-27.299	1.00	48.55		C
	ANISOU	2251	CE	LYS	B	440	5873	6370	6205	-2981	-837	-1868	C
30	ATOM	2252	NZ	LYS	B	440	3.494	-17.274	-28.574	1.00	52.80		N
	ANISOU	2252	NZ	LYS	B	440	6658	6823	6582	-3080	-924	-2045	N
	ATOM	2253	C	LYS	B	440	6.248	-15.714	-23.330	1.00	38.27		C
	ANISOU	2253	C	LYS	B	440	4773	4586	5181	-2209	-273	-1446	C
	ATOM	2254	O	LYS	B	440	5.963	-16.802	-22.818	1.00	39.92		O
35	ANISOU	2254	O	LYS	B	440	5104	4621	5443	-2385	-203	-1469	O
	ATOM	2255	N	ASP	B	441	7.490	-15.259	-23.433	1.00	37.00		N
	ANISOU	2255	N	ASP	B	441	4716	4363	4979	-1961	-233	-1420	N
	ATOM	2256	CA	ASP	B	441	8.646	-16.065	-23.061	1.00	36.98		C
	ANISOU	2256	CA	ASP	B	441	4970	4096	4985	-1856	-118	-1430	C
40	ATOM	2257	CB	ASP	B	441	9.051	-17.038	-24.186	1.00	39.34		C
	ANISOU	2257	CB	ASP	B	441	5510	4241	5196	-1921	-132	-1587	C
	ATOM	2258	CG	ASP	B	441	10.054	-18.065	-23.712	1.00	41.85		C
	ANISOU	2258	CG	ASP	B	441	6096	4260	5544	-1824	-5	-1598	C
	ATOM	2259	OD1	ASP	B	441	10.678	-17.827	-22.647	1.00	45.44		O
45	ANISOU	2259	OD1	ASP	B	441	6535	4664	6067	-1657	74	-1472	O
	ATOM	2260	OD2	ASP	B	441	10.223	-19.107	-24.371	1.00	44.75		O
	ANISOU	2260	OD2	ASP	B	441	6700	4440	5864	-1905	13	-1729	O
	ATOM	2261	C	ASP	B	441	9.820	-15.187	-22.699	1.00	33.68		C
	ANISOU	2261	C	ASP	B	441	4532	3698	4566	-1573	-72	-1339	C
50	ATOM	2262	O	ASP	B	441	10.467	-14.624	-23.570	1.00	33.22		O
	ANISOU	2262	O	ASP	B	441	4476	3713	4433	-1450	-108	-1370	O
	ATOM	2263	N	ALA	B	442	10.076	-15.111	-21.398	1.00	31.93		N
	ANISOU	2263	N	ALA	B	442	4298	3412	4421	-1490	9	-1227	N
	ATOM	2264	CA	ALA	B	442	11.092	-14.273	-20.794	1.00	29.34		C
55	ANISOU	2264	CA	ALA	B	442	3931	3110	4105	-1256	44	-1131	C
	ATOM	2265	CB	ALA	B	442	10.565	-13.725	-19.499	1.00	28.01		C
	ANISOU	2265	CB	ALA	B	442	3635	3010	3996	-1252	75	-1017	C
	ATOM	2266	C	ALA	B	442	12.362	-15.072	-20.530	1.00	29.14		C
	ANISOU	2266	C	ALA	B	442	4112	2874	4085	-1118	122	-1131	C
60	ATOM	2267	O	ALA	B	442	13.360	-14.523	-20.065	1.00	28.18		O
	ANISOU	2267	O	ALA	B	442	3967	2766	3973	-928	144	-1060	O
	ATOM	2268	N	LYS	B	443	12.312	-16.375	-20.791	1.00	30.53		N
	ANISOU	2268	N	LYS	B	443	4490	2851	4260	-1214	161	-1209	N
	ATOM	2269	CA	LYS	B	443	13.417	-17.281	-20.437	1.00	30.65		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2269	CA	LYS	B	443	4716	2636	4292	-1068	243	-1199	C
	ATOM	2270	CB	LYS	B	443	13.107	-18.727	-20.819	1.00	32.70		C
	ANISOU	2270	CB	LYS	B	443	5223	2653	4549	-1211	284	-1301	C
	ATOM	2271	CG	LYS	B	443	12.149	-19.457	-19.915	1.00	34.47		C
5	ANISOU	2271	CG	LYS	B	443	5515	2754	4829	-1415	319	-1250	C
	ATOM	2272	CD	LYS	B	443	11.797	-20.833	-20.531	1.00	39.27		C
	ANISOU	2272	CD	LYS	B	443	6384	3113	5426	-1597	346	-1379	C
	ATOM	2273	CE	LYS	B	443	10.531	-21.410	-19.929	1.00	42.83		C
	ANISOU	2273	CE	LYS	B	443	6847	3503	5925	-1897	362	-1351	C
10	ATOM	2274	NZ	LYS	B	443	9.967	-22.468	-20.802	1.00	49.83		N
	ANISOU	2274	NZ	LYS	B	443	7928	4218	6787	-2143	348	-1509	N
	ATOM	2275	C	LYS	B	443	14.752	-16.877	-21.049	1.00	29.07		C
	ANISOU	2275	C	LYS	B	443	4516	2473	4056	-835	255	-1220	C
	ATOM	2276	O	LYS	B	443	15.765	-16.817	-20.355	1.00	28.19		O
15	ANISOU	2276	O	LYS	B	443	4414	2317	3978	-643	293	-1137	O
	ATOM	2277	N	VAL	B	444	14.760	-16.582	-22.341	1.00	28.47		N
	ANISOU	2277	N	VAL	B	444	4419	2495	3904	-857	219	-1324	N
	ATOM	2278	CA	VAL	B	444	15.989	-16.171	-23.001	1.00	27.62		C
	ANISOU	2278	CA	VAL	B	444	4298	2443	3753	-657	251	-1342	C
20	ATOM	2279	CB	VAL	B	444	15.844	-16.164	-24.546	1.00	29.10		C
	ANISOU	2279	CB	VAL	B	444	4535	2697	3822	-721	229	-1480	C
	ATOM	2280	CG1	VAL	B	444	17.165	-15.772	-25.210	1.00	27.34		C
	ANISOU	2280	CG1	VAL	B	444	4300	2538	3551	-514	294	-1491	C
	ATOM	2281	CG2	VAL	B	444	15.361	-17.547	-25.079	1.00	29.33		C
25	ANISOU	2281	CG2	VAL	B	444	4809	2521	3814	-859	251	-1625	C
	ATOM	2282	C	VAL	B	444	16.469	-14.798	-22.492	1.00	26.53		C
	ANISOU	2282	C	VAL	B	444	3944	2494	3640	-540	221	-1220	C
	ATOM	2283	O	VAL	B	444	17.678	-14.605	-22.233	1.00	26.44		O
	ANISOU	2283	O	VAL	B	444	3908	2485	3653	-353	265	-1171	O
30	ATOM	2284	N	LEU	B	445	15.527	-13.866	-22.343	1.00	24.58		N
	ANISOU	2284	N	LEU	B	445	3544	2404	3392	-651	144	-1177	N
	ATOM	2285	CA	LEU	B	445	15.783	-12.541	-21.821	1.00	23.69		C
	ANISOU	2285	CA	LEU	B	445	3257	2443	3302	-569	112	-1072	C
	ATOM	2286	CB	LEU	B	445	14.471	-11.724	-21.792	1.00	22.83		C
35	ANISOU	2286	CB	LEU	B	445	3011	2476	3188	-699	34	-1048	C
	ATOM	2287	CG	LEU	B	445	14.528	-10.302	-21.202	1.00	20.40		C
	ANISOU	2287	CG	LEU	B	445	2549	2300	2903	-624	1	-949	C
	ATOM	2288	CD1	LEU	B	445	15.452	-9.445	-22.022	1.00	20.80		C
	ANISOU	2288	CD1	LEU	B	445	2565	2433	2905	-525	-8	-942	C
40	ATOM	2289	CD2	LEU	B	445	13.139	-9.660	-21.107	1.00	21.01		C
	ANISOU	2289	CD2	LEU	B	445	2499	2498	2987	-724	-59	-929	C
	ATOM	2290	C	LEU	B	445	16.386	-12.568	-20.405	1.00	23.63		C
	ANISOU	2290	C	LEU	B	445	3244	2369	3367	-464	143	-970	C
	ATOM	2291	O	LEU	B	445	17.378	-11.894	-20.145	1.00	23.04		O
45	ANISOU	2291	O	LEU	B	445	3098	2354	3304	-332	144	-914	O
	ATOM	2292	N	PHE	B	446	15.749	-13.322	-19.503	1.00	24.55		N
	ANISOU	2292	N	PHE	B	446	3434	2372	3522	-540	163	-944	N
	ATOM	2293	CA	PHE	B	446	16.165	-13.405	-18.103	1.00	24.13		C
	ANISOU	2293	CA	PHE	B	446	3400	2257	3510	-456	185	-840	C
50	ATOM	2294	CB	PHE	B	446	15.065	-14.052	-17.240	1.00	24.76		C
	ANISOU	2294	CB	PHE	B	446	3545	2251	3610	-600	213	-806	C
	ATOM	2295	CG	PHE	B	446	13.941	-13.121	-16.834	1.00	24.29		C
	ANISOU	2295	CG	PHE	B	446	3329	2348	3552	-706	187	-774	C
	ATOM	2296	CD1	PHE	B	446	13.834	-11.833	-17.342	1.00	23.90		C
55	ANISOU	2296	CD1	PHE	B	446	3118	2476	3486	-675	130	-782	C
	ATOM	2297	CE1	PHE	B	446	12.781	-10.995	-16.975	1.00	24.51		C
	ANISOU	2297	CE1	PHE	B	446	3058	2686	3570	-740	113	-754	C
	ATOM	2298	CZ	PHE	B	446	11.834	-11.441	-16.088	1.00	25.45		C
	ANISOU	2298	CZ	PHE	B	446	3177	2782	3710	-847	166	-718	C
60	ATOM	2299	CE2	PHE	B	446	11.922	-12.724	-15.582	1.00	26.97		C
	ANISOU	2299	CE2	PHE	B	446	3531	2804	3914	-908	228	-704	C
	ATOM	2300	CD2	PHE	B	446	12.973	-13.555	-15.954	1.00	26.27		C
	ANISOU	2300	CD2	PHE	B	446	3601	2560	3821	-831	232	-730	C
	ATOM	2301	C	PHE	B	446	17.483	-14.179	-17.956	1.00	24.88		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2301	C	PHE	B	446	3609	2223	3621	-283	225	-826	C
	ATOM	2302	O	PHE	B	446	18.356	-13.744	-17.220	1.00	24.61		O
	ANISOU	2302	O	PHE	B	446	3518	2231	3603	-148	207	-746	O
	ATOM	2303	N	GLN	B	447	17.622	-15.313	-18.650	1.00	26.27		N
5	ANISOU	2303	N	GLN	B	447	3944	2245	3792	-281	275	-907	N
	ATOM	2304	CA	GLN	B	447	18.836	-16.149	-18.568	1.00	27.60		C
	ANISOU	2304	CA	GLN	B	447	4228	2275	3983	-85	326	-899	C
	ATOM	2305	CB	GLN	B	447	18.612	-17.566	-19.132	1.00	29.38		C
	ANISOU	2305	CB	GLN	B	447	4694	2267	4204	-123	392	-993	C
10	ATOM	2306	CG	GLN	B	447	17.510	-18.396	-18.464	1.00	30.32		C
	ANISOU	2306	CG	GLN	B	447	4963	2215	4340	-306	406	-972	C
	ATOM	2307	CD	GLN	B	447	17.823	-18.852	-17.033	1.00	33.13		C
	ANISOU	2307	CD	GLN	B	447	5407	2450	4733	-211	422	-829	C
	ATOM	2308	OE1	GLN	B	447	18.625	-18.249	-16.326	1.00	34.35		O
15	ANISOU	2308	OE1	GLN	B	447	5450	2708	4895	-47	387	-731	O
	ATOM	2309	NE2	GLN	B	447	17.167	-19.921	-16.603	1.00	33.37		N
	ANISOU	2309	NE2	GLN	B	447	5644	2258	4776	-332	469	-814	N
	ATOM	2310	C	GLN	B	447	20.092	-15.516	-19.196	1.00	27.69		C
	ANISOU	2310	C	GLN	B	447	4114	2418	3988	88	332	-910	C
20	ATOM	2311	O	GLN	B	447	21.206	-15.860	-18.819	1.00	28.70		O
	ANISOU	2311	O	GLN	B	447	4248	2505	4150	282	355	-863	O
	ATOM	2312	N	ASN	B	448	19.912	-14.574	-20.117	1.00	28.11		N
	ANISOU	2312	N	ASN	B	448	4044	2639	3997	20	310	-961	N
	ATOM	2313	CA	ASN	B	448	21.036	-13.924	-20.791	1.00	28.81		C
25	ANISOU	2313	CA	ASN	B	448	4012	2863	4073	147	333	-967	C
	ATOM	2314	CB	ASN	B	448	20.855	-13.960	-22.313	1.00	30.00		C
	ANISOU	2314	CB	ASN	B	448	4206	3050	4141	92	375	-1087	C
	ATOM	2315	CG	ASN	B	448	21.087	-15.348	-22.884	1.00	33.62		C
	ANISOU	2315	CG	ASN	B	448	4871	3323	4581	157	462	-1194	C
30	ATOM	2316	OD1	ASN	B	448	22.214	-15.833	-22.902	1.00	36.46		O
	ANISOU	2316	OD1	ASN	B	448	5249	3635	4969	354	538	-1194	O
	ATOM	2317	ND2	ASN	B	448	20.022	-16.002	-23.324	1.00	35.23		N
	ANISOU	2317	ND2	ASN	B	448	5229	3417	4739	-5	449	-1287	N
	ATOM	2318	C	ASN	B	448	21.345	-12.521	-20.310	1.00	27.59		C
35	ANISOU	2318	C	ASN	B	448	3659	2892	3933	147	269	-877	C
	ATOM	2319	O	ASN	B	448	22.364	-11.957	-20.700	1.00	28.46		O
	ANISOU	2319	O	ASN	B	448	3654	3115	4046	238	290	-863	O
	ATOM	2320	N	TRP	B	449	20.496	-11.979	-19.431	1.00	27.14		N
	ANISOU	2320	N	TRP	B	449	3567	2857	3886	45	203	-819	N
40	ATOM	2321	CA	TRP	B	449	20.598	-10.569	-18.976	1.00	25.11		C
	ANISOU	2321	CA	TRP	B	449	3159	2749	3634	23	140	-751	C
	ATOM	2322	CB	TRP	B	449	19.384	-10.193	-18.115	1.00	23.06		C
	ANISOU	2322	CB	TRP	B	449	2904	2486	3374	-89	95	-715	C
	ATOM	2323	CG	TRP	B	449	19.356	-8.762	-17.660	1.00	22.27		C
45	ANISOU	2323	CG	TRP	B	449	2686	2504	3269	-109	39	-663	C
	ATOM	2324	CD1	TRP	B	449	19.742	-8.290	-16.438	1.00	20.41		C
	ANISOU	2324	CD1	TRP	B	449	2424	2285	3047	-68	-1	-596	C
	ATOM	2325	NE1	TRP	B	449	19.559	-6.921	-16.377	1.00	20.85		N
	ANISOU	2325	NE1	TRP	B	449	2400	2431	3090	-109	-42	-580	N
50	ATOM	2326	CE2	TRP	B	449	19.051	-6.475	-17.580	1.00	20.31		C
	ANISOU	2326	CE2	TRP	B	449	2300	2412	3004	-163	-32	-620	C
	ATOM	2327	CD2	TRP	B	449	18.911	-7.599	-18.423	1.00	20.86		C
	ANISOU	2327	CD2	TRP	B	449	2430	2431	3064	-171	12	-676	C
	ATOM	2328	CE3	TRP	B	449	18.388	-7.415	-19.723	1.00	22.46		C
55	ANISOU	2328	CE3	TRP	B	449	2627	2683	3225	-229	16	-727	C
	ATOM	2329	CZ3	TRP	B	449	18.032	-6.099	-20.146	1.00	19.45		C
	ANISOU	2329	CZ3	TRP	B	449	2176	2397	2819	-261	-26	-701	C
	ATOM	2330	CH2	TRP	B	449	18.184	-5.005	-19.271	1.00	20.17		C
	ANISOU	2330	CH2	TRP	B	449	2218	2512	2935	-242	-59	-641	C
60	ATOM	2331	CZ2	TRP	B	449	18.683	-5.166	-17.992	1.00	19.60		C
	ANISOU	2331	CZ2	TRP	B	449	2154	2396	2896	-202	-64	-609	C
	ATOM	2332	C	TRP	B	449	21.897	-10.183	-18.247	1.00	25.56		C
	ANISOU	2332	C	TRP	B	449	3119	2864	3729	148	117	-678	C
	ATOM	2333	O	TRP	B	449	22.382	-9.027	-18.344	1.00	25.79		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2333	O	TRP	B	449	3020	3020	3758	135	84	-649	O
	ATOM	2334	N	GLY	B	450	22.478	-11.120	-17.510	1.00	25.38		N
	ANISOU	2334	N	GLY	B	450	3157	2749	3739	265	124	-642	N
	ATOM	2335	CA	GLY	B	450	23.632	-10.745	-16.694	1.00	23.99		C
5	ANISOU	2335	CA	GLY	B	450	2870	2652	3595	375	71	-565	C
	ATOM	2336	C	GLY	B	450	23.294	-10.879	-15.215	1.00	22.88		C
	ANISOU	2336	C	GLY	B	450	2794	2456	3443	373	4	-488	C
	ATOM	2337	O	GLY	B	450	22.203	-10.500	-14.778	1.00	21.96		O
	ANISOU	2337	O	GLY	B	450	2726	2323	3294	250	-10	-485	O
10	ATOM	2338	N	ILE	B	451	24.230	-11.444	-14.467	1.00	23.43		N
	ANISOU	2338	N	ILE	B	451	2862	2506	3532	521	-32	-423	N
	ATOM	2339	CA	ILE	B	451	24.085	-11.705	-13.026	1.00	23.62		C
	ANISOU	2339	CA	ILE	B	451	2972	2480	3523	547	-99	-335	C
	ATOM	2340	CB	ILE	B	451	24.108	-13.262	-12.731	1.00	25.59		C
15	ANISOU	2340	CB	ILE	B	451	3405	2536	3781	668	-54	-296	C
	ATOM	2341	CG1	ILE	B	451	23.397	-13.628	-11.415	1.00	23.95		C
	ANISOU	2341	CG1	ILE	B	451	3355	2232	3512	625	-81	-211	C
	ATOM	2342	CD1	ILE	B	451	21.902	-13.753	-11.539	1.00	21.00		C
	ANISOU	2342	CD1	ILE	B	451	3094	1771	3115	435	-5	-253	C
20	ATOM	2343	CG2	ILE	B	451	25.512	-13.822	-12.743	1.00	26.15		C
	ANISOU	2343	CG2	ILE	B	451	3411	2625	3899	895	-78	-254	C
	ATOM	2344	C	ILE	B	451	25.203	-10.957	-12.295	1.00	23.68		C
	ANISOU	2344	C	ILE	B	451	2829	2639	3529	616	-211	-274	C
	ATOM	2345	O	ILE	B	451	26.284	-10.721	-12.867	1.00	24.64		O
25	ANISOU	2345	O	ILE	B	451	2790	2871	3701	694	-221	-284	O
	ATOM	2346	N	GLU	B	452	24.948	-10.545	-11.062	1.00	22.87		N
	ANISOU	2346	N	GLU	B	452	2770	2558	3363	573	-294	-217	N
	ATOM	2347	CA	GLU	B	452	25.953	-9.818	-10.284	1.00	23.14		C
	ANISOU	2347	CA	GLU	B	452	2678	2738	3377	610	-425	-170	C
30	ATOM	2348	CB	GLU	B	452	25.784	-8.289	-10.406	1.00	22.01		C
	ANISOU	2348	CB	GLU	B	452	2434	2709	3218	450	-462	-223	C
	ATOM	2349	CG	GLU	B	452	24.512	-7.724	-9.739	1.00	20.85		C
	ANISOU	2349	CG	GLU	B	452	2420	2510	2993	324	-449	-239	C
	ATOM	2350	CD	GLU	B	452	24.217	-6.272	-10.076	1.00	22.01		C
35	ANISOU	2350	CD	GLU	B	452	2499	2725	3137	190	-457	-300	C
	ATOM	2351	OE1	GLU	B	452	25.104	-5.613	-10.663	1.00	27.18		O
	ANISOU	2351	OE1	GLU	B	452	3010	3475	3841	169	-493	-317	O
	ATOM	2352	OE2	GLU	B	452	23.097	-5.773	-9.748	1.00	23.75		O
	ANISOU	2352	OE2	GLU	B	452	2812	2904	3310	108	-421	-326	O
40	ATOM	2353	C	GLU	B	452	25.850	-10.194	-8.828	1.00	24.13		C
	ANISOU	2353	C	GLU	B	452	2934	2823	3413	655	-507	-83	C
	ATOM	2354	O	GLU	B	452	24.765	-10.560	-8.354	1.00	23.91		O
	ANISOU	2354	O	GLU	B	452	3081	2678	3325	593	-450	-69	O
	ATOM	2355	N	AHIS	B	453	26.975	-10.085	-8.119	0.50	25.47		N
45	ANISOU	2355	N	AHIS	B	453	3010	3104	3564	753	-642	-21	N
	ATOM	2356	N	BHIS	B	453	26.985	-10.127	-8.136	0.50	25.61		N
	ANISOU	2356	N	BHIS	B	453	3029	3119	3584	758	-640	-20	N
	ATOM	2357	CA	AHIS	B	453	27.020	-10.189	-6.668	0.50	26.91		C
	ANISOU	2357	CA	AHIS	B	453	3303	3295	3629	785	-756	64	C
50	ATOM	2358	CA	BHIS	B	453	27.023	-10.168	-6.690	0.50	27.08		C
	ANISOU	2358	CA	BHIS	B	453	3319	3317	3651	783	-755	61	C
	ATOM	2359	CB	AHIS	B	453	28.450	-10.463	-6.189	0.50	28.79		C
	ANISOU	2359	CB	AHIS	B	453	3408	3656	3874	952	-909	143	C
	ATOM	2360	CB	BHIS	B	453	28.476	-10.182	-6.188	0.50	29.00		C
55	ANISOU	2360	CB	BHIS	B	453	3408	3713	3899	919	-922	129	C
	ATOM	2361	CG	AHIS	B	453	28.526	-10.925	-4.767	0.50	30.03		C
	ANISOU	2361	CG	AHIS	B	453	3716	3797	3897	1033	-1027	254	C
	ATOM	2362	CG	BHIS	B	453	29.316	-11.302	-6.740	0.50	30.90		C
	ANISOU	2362	CG	BHIS	B	453	3578	3926	4237	1140	-898	180	C
60	ATOM	2363	ND1AHIS	B	453	29.035	-10.142	-3.753	0.50	30.65		N	
	ANISOU	2363	ND1AHIS	B	453	3748	4029	3869	987	-1204	274	N	
	ATOM	2364	ND1BHIS	B	453	29.448	-12.521	-6.107	0.50	32.82		N	
	ANISOU	2364	ND1BHIS	B	453	3973	4053	4444	1327	-921	290	N	
	ATOM	2365	CE1AHIS	B	453	28.956	-10.802	-2.613	0.50	31.81		C	



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2365	CE1AHIS	B	453	4076	4127	3883	1080	-1278	384	C
	ATOM	2366	CE1BHIS	B	453	30.259	-13.295	-6.810	0.50	33.79		C
	ANISOU	2366	CE1BHIS	B	453	3997	4166	4676	1525	-885	307	C
	ATOM	2367	NE2AHIS	B	453	28.403	-11.980	-2.849	0.50	31.22		N
5	ANISOU	2367	NE2AHIS	B	453	4168	3857	3836	1177	-1145	441	N
	ATOM	2368	NE2BHIS	B	453	30.665	-12.623	-7.871	0.50	32.37		N
	ANISOU	2368	NE2BHIS	B	453	3598	4108	4594	1462	-832	212	N
	ATOM	2369	CD2AHIS	B	453	28.125	-12.081	-4.187	0.50	29.97		C
	ANISOU	2369	CD2AHIS	B	453	3930	3629	3828	1144	-992	352	C
10	ATOM	2370	CD2BHIS	B	453	30.092	-11.374	-7.852	0.50	31.63		C
	ANISOU	2370	CD2BHIS	B	453	3473	4089	4457	1217	-845	138	C
	ATOM	2371	C AHIS	B	453	26.479	-8.902	-6.033	0.50	26.48		C
	ANISOU	2371	C AHIS	B	453	3268	3310	3482	609	-804	15	C
	ATOM	2372	C BHIS	B	453	26.269	-8.928	-6.168	0.50	26.24		C
15	ANISOU	2372	C BHIS	B	453	3253	3258	3458	595	-774	5	C
	ATOM	2373	O AHIS	B	453	26.801	-7.795	-6.474	0.50	26.15		O
	ANISOU	2373	O AHIS	B	453	3082	3376	3477	510	-837	-54	O
	ATOM	2374	O BHIS	B	453	26.205	-7.888	-6.829	0.50	25.07		O
	ANISOU	2374	O BHIS	B	453	2993	3176	3357	478	-757	-78	O
20	ATOM	2375	N ILE	B	454	25.653	-9.052	-5.003	1.00	27.27		N
	ANISOU	2375	N ILE	B	454	3565	3340	3458	574	-794	52	N
	ATOM	2376	CA ILE	B	454	24.998	-7.895	-4.372	1.00	27.11		C
	ANISOU	2376	CA ILE	B	454	3599	3362	3338	428	-809	-5	C
	ATOM	2377	CB ILE	B	454	23.458	-7.972	-4.438	1.00	26.13		C
25	ANISOU	2377	CB ILE	B	454	3614	3124	3189	336	-643	-36	C
	ATOM	2378	CG1 ILE	B	454	22.894	-9.039	-3.497	1.00	26.52		C
	ANISOU	2378	CG1 ILE	B	454	3869	3071	3135	383	-593	61	C
	ATOM	2379	CD1 ILE	B	454	21.346	-8.995	-3.430	1.00	25.42		C
	ANISOU	2379	CD1 ILE	B	454	3835	2857	2966	266	-427	30	C
30	ATOM	2380	CG2 ILE	B	454	22.973	-8.138	-5.878	1.00	24.81		C
	ANISOU	2380	CG2 ILE	B	454	3361	2901	3162	300	-521	-96	C
	ATOM	2381	C ILE	B	454	25.494	-7.622	-2.952	1.00	29.39		C
	ANISOU	2381	C ILE	B	454	3966	3732	3468	447	-963	45	C
	ATOM	2382	O ILE	B	454	26.002	-8.522	-2.286	1.00	30.77		O
35	ANISOU	2382	O ILE	B	454	4208	3900	3584	574	-1039	150	O
	ATOM	2383	N ASP	B	455	25.404	-6.364	-2.524	1.00	30.94		N
	ANISOU	2383	N ASP	B	455	4162	4002	3593	326	-1021	-33	N
	ATOM	2384	CA ASP	B	455	25.620	-6.005	-1.121	1.00	33.96		C
	ANISOU	2384	CA ASP	B	455	4670	4448	3787	311	-1152	-13	C
40	ATOM	2385	CB ASP	B	455	25.973	-4.520	-0.989	1.00	35.01		C
	ANISOU	2385	CB ASP	B	455	4741	4672	3890	174	-1250	-124	C
	ATOM	2386	CG ASP	B	455	27.250	-4.149	-1.740	1.00	38.55		C
	ANISOU	2386	CG ASP	B	455	4937	5236	4473	156	-1370	-141	C
	ATOM	2387	OD1 ASP	B	455	28.218	-4.942	-1.722	1.00	41.76		O
45	ANISOU	2387	OD1 ASP	B	455	5228	5723	4918	276	-1471	-55	O
	ATOM	2388	OD2 ASP	B	455	27.285	-3.060	-2.363	1.00	42.88		O
	ANISOU	2388	OD2 ASP	B	455	5401	5798	5094	27	-1354	-234	O
	ATOM	2389	C ASP	B	455	24.357	-6.303	-0.319	1.00	33.96		C
	ANISOU	2389	C ASP	B	455	4908	4349	3646	293	-1024	10	C
50	ATOM	2390	O ASP	B	455	23.262	-6.210	-0.836	1.00	32.87		O
	ANISOU	2390	O ASP	B	455	4798	4127	3563	235	-851	-36	O
	ATOM	2391	N ASN	B	456	24.516	-6.670	0.945	1.00	36.21		N
	ANISOU	2391	N ASN	B	456	5355	4657	3744	343	-1109	87	N
	ATOM	2392	CA ASN	B	456	23.386	-6.753	1.864	1.00	36.87		C
55	ANISOU	2392	CA ASN	B	456	5670	4678	3659	306	-986	102	C
	ATOM	2393	CB ASN	B	456	23.798	-7.463	3.160	1.00	39.34		C
	ANISOU	2393	CB ASN	B	456	6165	5017	3764	394	-1096	229	C
	ATOM	2394	CG ASN	B	456	24.239	-8.874	2.934	1.00	41.30		C
	ANISOU	2394	CG ASN	B	456	6415	5195	4082	538	-1111	377	C
60	ATOM	2395	OD1 ASN	B	456	23.568	-9.643	2.250	1.00	44.21		O
	ANISOU	2395	OD1 ASN	B	456	6797	5430	4570	545	-942	407	O
	ATOM	2396	ND2 ASN	B	456	25.373	-9.238	3.516	1.00	45.13		N
	ANISOU	2396	ND2 ASN	B	456	6893	5765	4491	658	-1320	471	N
	ATOM	2397	C ASN	B	456	22.849	-5.350	2.191	1.00	35.93		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2397	C	ASN	B	456	5597	4597	3458	185	-957	-37	C
	ATOM	2398	O	ASN	B	456	23.527	-4.564	2.854	1.00	36.85		O
	ANISOU	2398	O	ASN	B	456	5741	4804	3458	149	-1118	-88	O
	ATOM	2399	N	VAL	B	457	21.652	-5.044	1.700	1.00	34.16		N
5	ANISOU	2399	N	VAL	B	457	5380	4302	3299	127	-759	-100	N
	ATOM	2400	CA	VAL	B	457	20.941	-3.805	2.045	1.00	33.91		C
	ANISOU	2400	CA	VAL	B	457	5421	4277	3188	49	-691	-223	C
	ATOM	2401	CB	VAL	B	457	20.748	-2.905	0.801	1.00	32.48		C
	ANISOU	2401	CB	VAL	B	457	5070	4073	3197	-6	-646	-327	C
10	ATOM	2402	CG1	VAL	B	457	20.040	-1.606	1.166	1.00	32.79		C
	ANISOU	2402	CG1	VAL	B	457	5203	4095	3159	-56	-577	-451	C
	ATOM	2403	CG2	VAL	B	457	22.108	-2.600	0.143	1.00	33.09		C
	ANISOU	2403	CG2	VAL	B	457	4980	4206	3385	-23	-828	-340	C
	ATOM	2404	C	VAL	B	457	19.575	-4.186	2.625	1.00	33.78		C
15	ANISOU	2404	C	VAL	B	457	5553	4211	3070	49	-478	-196	C
	ATOM	2405	O	VAL	B	457	18.791	-4.831	1.940	1.00	32.79		O
	ANISOU	2405	O	VAL	B	457	5360	4029	3068	45	-328	-158	O
	ATOM	2406	N	MSE	B	458	19.303	-3.798	3.876	1.00	34.81		N
	ANISOU	2406	N	MSE	B	458	5882	4374	2971	43	-464	-218	N
20	ATOM	2407	CA	MSE	B	458	18.039	-4.135	4.545	1.00	35.03		C
	ANISOU	2407	CA	MSE	B	458	6051	4379	2879	40	-244	-187	C
	ATOM	2408	CB	MSE	B	458	18.056	-3.708	6.020	1.00	37.27		C
	ANISOU	2408	CB	MSE	B	458	6581	4716	2866	45	-267	-210	C
	ATOM	2409	CG	MSE	B	458	16.872	-4.222	6.828	1.00	37.38		C
25	ANISOU	2409	CG	MSE	B	458	6752	4723	2726	45	-30	-149	C
	ATOM	2410	SE	MSE	B	458	16.820	-3.511	8.603	0.90	41.33		SE
	ANISOU	2410	SE	MSE	B	458	7579	5297	2828	55	-30	-211	SE
	ATOM	2411	CE	MSE	B	458	15.420	-4.680	9.317	1.00	44.38		C
	ANISOU	2411	CE	MSE	B	458	8103	5675	3084	45	298	-58	C
30	ATOM	2412	C	MSE	B	458	16.868	-3.480	3.818	1.00	33.79		C
	ANISOU	2412	C	MSE	B	458	5784	4197	2856	10	-53	-282	C
	ATOM	2413	O	MSE	B	458	16.995	-2.362	3.336	1.00	32.16		O
	ANISOU	2413	O	MSE	B	458	5505	3991	2722	-1	-98	-401	O
	ATOM	2414	N	GLY	B	459	15.744	-4.194	3.715	1.00	34.01		N
35	ANISOU	2414	N	GLY	B	459	5796	4205	2922	-6	153	-221	N
	ATOM	2415	CA	GLY	B	459	14.570	-3.680	2.991	1.00	33.33		C
	ANISOU	2415	CA	GLY	B	459	5569	4123	2974	-25	328	-296	C
	ATOM	2416	C	GLY	B	459	14.548	-4.009	1.501	1.00	31.85		C
	ANISOU	2416	C	GLY	B	459	5161	3902	3041	-49	307	-289	C
40	ATOM	2417	O	GLY	B	459	13.682	-3.523	0.781	1.00	30.68		O
	ANISOU	2417	O	GLY	B	459	4875	3768	3012	-57	409	-348	O
	ATOM	2418	N	MSE	B	460	15.478	-4.860	1.057	1.00	31.24		N
	ANISOU	2418	N	MSE	B	460	5054	3784	3033	-50	177	-214	N
	ATOM	2419	CA	MSE	B	460	15.677	-5.150	-0.354	1.00	31.07		C
45	ANISOU	2419	CA	MSE	B	460	4850	3729	3225	-65	137	-221	C
	ATOM	2420	CB	MSE	B	460	16.629	-4.100	-0.868	1.00	30.09		C
	ANISOU	2420	CB	MSE	B	460	4650	3629	3156	-42	-20	-303	C
	ATOM	2421	CG	MSE	B	460	16.615	-3.833	-2.309	1.00	32.45		C
	ANISOU	2421	CG	MSE	B	460	4767	3917	3643	-59	-30	-347	C
50	ATOM	2422	SE	MSE	B	460	17.913	-2.375	-2.609	0.90	34.00		SE
	ANISOU	2422	SE	MSE	B	460	4919	4140	3859	-59	-219	-436	SE
	ATOM	2423	CE	MSE	B	460	16.991	-0.929	-1.707	1.00	33.99		C
	ANISOU	2423	CE	MSE	B	460	5050	4135	3729	-54	-133	-542	C
	ATOM	2424	C	MSE	B	460	16.331	-6.512	-0.539	1.00	28.84		C
55	ANISOU	2424	C	MSE	B	460	4594	3383	2980	-52	79	-112	C
	ATOM	2425	O	MSE	B	460	17.138	-6.910	0.282	1.00	30.15		O
	ANISOU	2425	O	MSE	B	460	4884	3544	3026	-3	-19	-42	O
	ATOM	2426	N	VAL	B	461	16.008	-7.206	-1.624	1.00	27.09		N
	ANISOU	2426	N	VAL	B	461	4265	3111	2918	-87	131	-100	N
60	ATOM	2427	CA	VAL	B	461	16.671	-8.480	-1.957	1.00	26.80		C
	ANISOU	2427	CA	VAL	B	461	4263	2984	2937	-58	81	-14	C
	ATOM	2428	CB	VAL	B	461	15.830	-9.766	-1.561	1.00	27.65		C
	ANISOU	2428	CB	VAL	B	461	4497	2994	3014	-121	226	84	C
	ATOM	2429	CG1	VAL	B	461	15.820	-9.957	-0.084	1.00	30.27		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2429	CG1	VAL	B	461	5027	3330	3145	-99	248	174	C
	ATOM	2430	CG2	VAL	B	461	14.394	-9.726	-2.097	1.00	27.50		C
	ANISOU	2430	CG2	VAL	B	461	4380	2992	3077	-246	392	36	C
	ATOM	2431	C	VAL	B	461	17.010	-8.528	-3.436	1.00	24.89		C
5	ANISOU	2431	C	VAL	B	461	3858	2724	2874	-57	39	-71	C
	ATOM	2432	O	VAL	B	461	16.458	-7.760	-4.216	1.00	22.95		O
	ANISOU	2432	O	VAL	B	461	3485	2528	2709	-103	75	-156	O
	ATOM	2433	N	GLY	B	462	17.912	-9.440	-3.809	1.00	24.45		N
	ANISOU	2433	N	GLY	B	462	3821	2599	2872	11	-31	-19	N
10	ATOM	2434	CA	GLY	B	462	18.142	-9.764	-5.208	1.00	23.12		C
	ANISOU	2434	CA	GLY	B	462	3536	2394	2854	12	-34	-67	C
	ATOM	2435	C	GLY	B	462	17.109	-10.760	-5.728	1.00	23.17		C
	ANISOU	2435	C	GLY	B	462	3586	2297	2922	-82	97	-61	C
	ATOM	2436	O	GLY	B	462	16.340	-11.359	-4.962	1.00	23.84		O
15	ANISOU	2436	O	GLY	B	462	3793	2324	2942	-146	191	2	O
	ATOM	2437	N	VAL	B	463	17.080	-10.925	-7.043	1.00	22.89		N
	ANISOU	2437	N	VAL	B	463	3453	2241	3003	-108	105	-129	N
	ATOM	2438	CA	VAL	B	463	16.154	-11.866	-7.677	1.00	23.22		C
	ANISOU	2438	CA	VAL	B	463	3530	2185	3106	-220	206	-145	C
20	ATOM	2439	CB	VAL	B	463	14.824	-11.131	-8.120	1.00	22.55		C
	ANISOU	2439	CB	VAL	B	463	3313	2204	3052	-353	274	-216	C
	ATOM	2440	CG1	VAL	B	463	15.089	-10.058	-9.145	1.00	20.58		C
	ANISOU	2440	CG1	VAL	B	463	2902	2062	2857	-321	205	-302	C
	ATOM	2441	CG2	VAL	B	463	13.796	-12.107	-8.634	1.00	23.79		C
25	ANISOU	2441	CG2	VAL	B	463	3493	2283	3263	-503	366	-230	C
	ATOM	2442	C	VAL	B	463	16.893	-12.591	-8.810	1.00	22.85		C
	ANISOU	2442	C	VAL	B	463	3485	2051	3146	-163	174	-184	C
	ATOM	2443	O	VAL	B	463	17.576	-11.960	-9.618	1.00	21.88		O
	ANISOU	2443	O	VAL	B	463	3242	2006	3066	-101	110	-243	O
30	ATOM	2444	N	LEU	B	464	16.772	-13.917	-8.835	1.00	24.48		N
	ANISOU	2444	N	LEU	B	464	3847	2086	3370	-184	230	-147	N
	ATOM	2445	CA	LEU	B	464	17.398	-14.757	-9.860	1.00	24.70		C
	ANISOU	2445	CA	LEU	B	464	3920	1996	3469	-121	225	-193	C
	ATOM	2446	CB	LEU	B	464	17.692	-16.167	-9.278	1.00	26.50		C
35	ANISOU	2446	CB	LEU	B	464	4383	2003	3684	-60	262	-101	C
	ATOM	2447	CG	LEU	B	464	18.614	-16.282	-8.045	1.00	27.20		C
	ANISOU	2447	CG	LEU	B	464	4556	2079	3698	112	196	31	C
	ATOM	2448	CD1	LEU	B	464	18.909	-17.751	-7.716	1.00	26.95		C
	ANISOU	2448	CD1	LEU	B	464	4774	1800	3666	194	234	122	C
40	ATOM	2449	CD2	LEU	B	464	19.925	-15.482	-8.186	1.00	25.91		C
	ANISOU	2449	CD2	LEU	B	464	4231	2069	3545	291	74	17	C
	ATOM	2450	C	LEU	B	464	16.470	-14.848	-11.075	1.00	24.29		C
	ANISOU	2450	C	LEU	B	464	3811	1943	3475	-279	275	-305	C
	ATOM	2451	O	LEU	B	464	15.296	-14.566	-10.935	1.00	23.51		O
45	ANISOU	2451	O	LEU	B	464	3661	1902	3369	-438	321	-317	O
	ATOM	2452	N	PRO	B	465	16.996	-15.222	-12.270	1.00	25.25		N
	ANISOU	2452	N	PRO	B	465	3932	2015	3645	-232	265	-388	N
	ATOM	2453	CA	PRO	B	465	16.120	-15.432	-13.438	1.00	25.68		C
	ANISOU	2453	CA	PRO	B	465	3964	2062	3731	-391	297	-499	C
50	ATOM	2454	CB	PRO	B	465	17.050	-16.084	-14.460	1.00	25.85		C
	ANISOU	2454	CB	PRO	B	465	4061	1984	3778	-277	298	-570	C
	ATOM	2455	CG	PRO	B	465	18.388	-15.510	-14.133	1.00	24.55		C
	ANISOU	2455	CG	PRO	B	465	3812	1904	3610	-63	245	-516	C
	ATOM	2456	CD	PRO	B	465	18.421	-15.441	-12.622	1.00	25.27		C
55	ANISOU	2456	CD	PRO	B	465	3945	1989	3669	-26	225	-389	C
	ATOM	2457	C	PRO	B	465	14.846	-16.281	-13.209	1.00	28.21		C
	ANISOU	2457	C	PRO	B	465	4391	2269	4059	-603	369	-498	C
	ATOM	2458	O	PRO	B	465	13.803	-15.960	-13.790	1.00	27.91		O
	ANISOU	2458	O	PRO	B	465	4244	2328	4033	-771	372	-565	O
60	ATOM	2459	N	ASP	B	466	14.925	-17.337	-12.388	1.00	30.80		N
	ANISOU	2459	N	ASP	B	466	4922	2403	4379	-599	424	-415	N
	ATOM	2460	CA	ASP	B	466	13.752	-18.159	-12.058	1.00	33.52		C
	ANISOU	2460	CA	ASP	B	466	5376	2631	4730	-825	507	-396	C
	ATOM	2461	CB	ASP	B	466	14.126	-19.605	-11.623	1.00	35.98		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2461	CB	ASP	B	466	5985	2643	5044	-799	566	-329	C
	ATOM	2462	CG	ASP	B	466	14.980	-19.668	-10.343	1.00	37.63		C
	ANISOU	2462	CG	ASP	B	466	6297	2804	5198	-600	556	-174	C
	ATOM	2463	OD1	ASP	B	466	15.185	-18.631	-9.683	1.00	38.27		O
5	ANISOU	2463	OD1	ASP	B	466	6230	3080	5230	-519	509	-123	O
	ATOM	2464	OD2	ASP	B	466	15.460	-20.776	-9.985	1.00	41.34		O
	ANISOU	2464	OD2	ASP	B	466	7013	3029	5664	-519	587	-101	O
	ATOM	2465	C	ASP	B	466	12.853	-17.487	-11.009	1.00	33.70		C
	ANISOU	2465	C	ASP	B	466	5289	2800	4716	-926	547	-316	C
10	ATOM	2466	O	ASP	B	466	11.911	-18.095	-10.495	1.00	35.21		O
	ANISOU	2466	O	ASP	B	466	5552	2920	4904	-1111	636	-270	O
	ATOM	2467	N	MSE	B	467	13.146	-16.229	-10.700	1.00	32.05		N
	ANISOU	2467	N	MSE	B	467	4911	2790	4475	-810	493	-302	N
	ATOM	2468	CA	MSE	B	467	12.363	-15.426	-9.749	1.00	32.32		C
15	ANISOU	2468	CA	MSE	B	467	4839	2978	4464	-867	537	-247	C
	ATOM	2469	CB	MSE	B	467	10.852	-15.367	-10.098	1.00	33.45		C
	ANISOU	2469	CB	MSE	B	467	4846	3217	4648	-1096	603	-295	C
	ATOM	2470	CG	MSE	B	467	10.480	-14.569	-11.341	1.00	34.23		C
	ANISOU	2470	CG	MSE	B	467	4734	3476	4798	-1122	530	-411	C
20	ATOM	2471	SE	MSE	B	467	11.051	-12.703	-11.393	0.90	35.66		SE
	ANISOU	2471	SE	MSE	B	467	4726	3873	4950	-913	438	-429	SE
	ATOM	2472	CE	MSE	B	467	10.370	-12.081	-9.735	1.00	33.79		C
	ANISOU	2472	CE	MSE	B	467	4462	3731	4645	-908	538	-336	C
	ATOM	2473	C	MSE	B	467	12.545	-15.812	-8.285	1.00	32.77		C
25	ANISOU	2473	C	MSE	B	467	5059	2956	4437	-824	593	-111	C
	ATOM	2474	O	MSE	B	467	11.814	-15.332	-7.424	1.00	33.07		O
	ANISOU	2474	O	MSE	B	467	5047	3099	4420	-886	661	-63	O
	ATOM	2475	N	THR	B	468	13.511	-16.674	-8.005	1.00	33.28		N
	ANISOU	2475	N	THR	B	468	5323	2840	4482	-705	569	-45	N
30	ATOM	2476	CA	THR	B	468	13.885	-16.983	-6.629	1.00	33.89		C
	ANISOU	2476	CA	THR	B	468	5568	2851	4457	-623	589	98	C
	ATOM	2477	CB	THR	B	468	14.768	-18.251	-6.562	1.00	35.34		C
	ANISOU	2477	CB	THR	B	468	5996	2785	4646	-509	572	172	C
	ATOM	2478	OG1	THR	B	468	13.977	-19.388	-6.930	1.00	37.79		O
35	ANISOU	2478	OG1	THR	B	468	6452	2897	5009	-697	675	166	O
	ATOM	2479	CG2	THR	B	468	15.313	-18.475	-5.164	1.00	36.57		C
	ANISOU	2479	CG2	THR	B	468	6321	2896	4679	-382	556	334	C
	ATOM	2480	C	THR	B	468	14.591	-15.751	-6.022	1.00	32.35		C
	ANISOU	2480	C	THR	B	468	5263	2840	4187	-460	495	111	C
40	ATOM	2481	O	THR	B	468	15.453	-15.146	-6.652	1.00	30.75		O
	ANISOU	2481	O	THR	B	468	4946	2713	4024	-334	390	46	O
	ATOM	2482	N	PRO	B	469	14.192	-15.361	-4.801	1.00	32.67		N
	ANISOU	2482	N	PRO	B	469	5345	2955	4113	-481	542	189	N
	ATOM	2483	CA	PRO	B	469	14.887	-14.289	-4.133	1.00	31.19		C
45	ANISOU	2483	CA	PRO	B	469	5102	2914	3836	-342	447	195	C
	ATOM	2484	CB	PRO	B	469	13.971	-13.957	-2.953	1.00	32.02		C
	ANISOU	2484	CB	PRO	B	469	5259	3094	3815	-428	558	252	C
	ATOM	2485	CG	PRO	B	469	13.209	-15.162	-2.692	1.00	35.33		C
	ANISOU	2485	CG	PRO	B	469	5828	3365	4231	-568	694	337	C
50	ATOM	2486	CD	PRO	B	469	13.071	-15.891	-4.001	1.00	34.33		C
	ANISOU	2486	CD	PRO	B	469	5660	3121	4262	-648	695	268	C
	ATOM	2487	C	PRO	B	469	16.256	-14.732	-3.650	1.00	31.84		C
	ANISOU	2487	C	PRO	B	469	5312	2920	3863	-153	327	282	C
	ATOM	2488	O	PRO	B	469	16.421	-15.890	-3.258	1.00	34.25		O
55	ANISOU	2488	O	PRO	B	469	5817	3054	4141	-128	356	388	O
	ATOM	2489	N	SER	B	470	17.223	-13.819	-3.690	1.00	30.20		N
	ANISOU	2489	N	SER	B	470	4990	2841	3645	-24	191	241	N
	ATOM	2490	CA	SER	B	470	18.571	-14.100	-3.234	1.00	30.87		C
	ANISOU	2490	CA	SER	B	470	5139	2908	3684	161	53	318	C
60	ATOM	2491	CB	SER	B	470	19.482	-14.433	-4.402	1.00	29.68		C
	ANISOU	2491	CB	SER	B	470	4890	2716	3672	269	-11	267	C
	ATOM	2492	OG	SER	B	470	20.792	-14.608	-3.929	1.00	30.33		O
	ANISOU	2492	OG	SER	B	470	4987	2820	3717	461	-149	343	O
	ATOM	2493	C	SER	B	470	19.131	-12.899	-2.510	1.00	30.64		C

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	2493	C	SER	B	470	5033	3057	3553	216	-65	302	C
		ATOM	2494	O	SER	B	470	18.928	-11.761	-2.930	1.00	29.05	O	
		ANISOU	2494	O	SER	B	470	4674	2979	3385	159	-76	194	O
		ATOM	2495	N	THR	B	471	19.865	-13.168	-1.437	1.00	32.50	N	
5		ANISOU	2495	N	THR	B	471	5393	3296	3659	329	-164	411	N
		ATOM	2496	CA	THR	B	471	20.614	-12.129	-0.716	1.00	32.89	C	
		ANISOU	2496	CA	THR	B	471	5386	3511	3599	384	-315	395	C
		ATOM	2497	CB	THR	B	471	20.490	-12.340	0.813	1.00	34.91	C	
		ANISOU	2497	CB	THR	B	471	5860	3771	3632	403	-333	511	C
10		ATOM	2498	OG1	THR	B	471	20.876	-13.675	1.140	1.00	37.72	O	
		ANISOU	2498	OG1	THR	B	471	6384	3985	3961	514	-348	662	O
		ATOM	2499	CG2	THR	B	471	19.028	-12.160	1.273	1.00	34.90	C	
		ANISOU	2499	CG2	THR	B	471	5958	3753	3549	246	-138	495	C
		ATOM	2500	C	THR	B	471	22.099	-12.082	-1.145	1.00	32.75	C	
15		ANISOU	2500	C	THR	B	471	5227	3559	3656	534	-494	396	C
		ATOM	2501	O	THR	B	471	22.890	-11.337	-0.583	1.00	34.16	O	
		ANISOU	2501	O	THR	B	471	5345	3877	3756	575	-648	389	O
		ATOM	2502	N	GLU	B	472	22.465	-12.869	-2.157	1.00	31.92	N	
		ANISOU	2502	N	GLU	B	472	5064	3360	3702	609	-467	396	N
20		ATOM	2503	CA	GLU	B	472	23.861	-12.976	-2.589	1.00	31.44	C	
		ANISOU	2503	CA	GLU	B	472	4859	3365	3724	773	-605	407	C
		ATOM	2504	CB	GLU	B	472	24.370	-14.411	-2.376	1.00	33.51	C	
		ANISOU	2504	CB	GLU	B	472	5266	3476	3992	956	-618	540	C
		ATOM	2505	CG	GLU	B	472	24.422	-14.846	-0.927	1.00	37.90	C	
25		ANISOU	2505	CG	GLU	B	472	6031	4005	4363	1022	-691	691	C
		ATOM	2506	CD	GLU	B	472	23.763	-16.204	-0.707	1.00	44.50	C	
		ANISOU	2506	CD	GLU	B	472	7139	4591	5179	1042	-560	804	C
		ATOM	2507	OE1	GLU	B	472	24.485	-17.177	-0.350	1.00	46.85	O	
		ANISOU	2507	OE1	GLU	B	472	7556	4788	5457	1242	-630	939	O
30		ATOM	2508	OE2	GLU	B	472	22.521	-16.302	-0.892	1.00	44.38	O	
		ANISOU	2508	OE2	GLU	B	472	7216	4477	5169	856	-389	762	O
		ATOM	2509	C	GLU	B	472	24.062	-12.542	-4.036	1.00	28.34	C	
		ANISOU	2509	C	GLU	B	472	4255	3014	3498	741	-565	283	C
		ATOM	2510	O	GLU	B	472	25.024	-11.859	-4.337	1.00	27.47	O	
35		ANISOU	2510	O	GLU	B	472	3954	3050	3434	785	-672	244	O
		ATOM	2511	N	MSE	B	473	23.145	-12.942	-4.916	1.00	26.75	N	
		ANISOU	2511	N	MSE	B	473	4093	2693	3379	652	-412	224	N
		ATOM	2512	CA	MSE	B	473	23.244	-12.649	-6.358	1.00	25.55	C	
		ANISOU	2512	CA	MSE	B	473	3777	2567	3364	621	-362	111	C
40		ATOM	2513	CB	MSE	B	473	23.499	-13.920	-7.189	1.00	25.85	C	
		ANISOU	2513	CB	MSE	B	473	3877	2448	3495	728	-290	117	C
		ATOM	2514	CG	MSE	B	473	24.655	-14.796	-6.777	1.00	28.02	C	
		ANISOU	2514	CG	MSE	B	473	4194	2678	3776	959	-368	220	C
		ATOM	2515	SE	MSE	B	473	26.394	-14.027	-6.988	0.90	30.87	SE	
45		ANISOU	2515	SE	MSE	B	473	4253	3284	4190	1120	-526	214	SE
		ATOM	2516	CE	MSE	B	473	26.496	-13.771	-8.933	1.00	22.35	C	
		ANISOU	2516	CE	MSE	B	473	2999	2234	3260	1079	-399	59	C
		ATOM	2517	C	MSE	B	473	21.954	-12.044	-6.864	1.00	23.67	C	
		ANISOU	2517	C	MSE	B	473	3524	2330	3138	431	-255	20	C
50		ATOM	2518	O	MSE	B	473	20.913	-12.197	-6.250	1.00	23.75	O	
		ANISOU	2518	O	MSE	B	473	3657	2283	3082	333	-183	45	O
		ATOM	2519	N	SER	B	474	22.018	-11.384	-8.012	1.00	23.00	N	
		ANISOU	2519	N	SER	B	474	3283	2317	3138	384	-240	-79	N
		ATOM	2520	CA	SER	B	474	20.815	-10.819	-8.621	1.00	21.94	C	
55		ANISOU	2520	CA	SER	B	474	3118	2194	3023	228	-154	-159	C
		ATOM	2521	CB	SER	B	474	20.425	-9.496	-7.949	1.00	20.28	C	
		ANISOU	2521	CB	SER	B	474	2863	2099	2745	152	-190	-179	C
		ATOM	2522	OG	SER	B	474	19.094	-9.121	-8.284	1.00	20.72	O	
		ANISOU	2522	OG	SER	B	474	2910	2154	2809	30	-97	-231	O
60		ATOM	2523	C	SER	B	474	21.036	-10.602	-10.103	1.00	22.22	C	
		ANISOU	2523	C	SER	B	474	3031	2262	3151	217	-130	-246	C
		ATOM	2524	O	SER	B	474	22.178	-10.392	-10.544	1.00	22.87	O	
		ANISOU	2524	O	SER	B	474	3006	2412	3273	308	-185	-253	O
		ATOM	2525	N	MSE	B	475	19.942	-10.646	-10.871	1.00	22.60	N	

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2525	N	MSE	B	475	3085	2278	3225	101	-49	-308	N
	ATOM	2526	CA	MSE	B	475	19.951	-10.117	-12.224	1.00	22.94		C
	ANISOU	2526	CA	MSE	B	475	3014	2384	3318	64	-37	-391	C
	ATOM	2527	CB	MSE	B	475	18.539	-10.126	-12.829	1.00	21.81		C
5	ANISOU	2527	CB	MSE	B	475	2880	2226	3181	-76	26	-446	C
	ATOM	2528	CG	MSE	B	475	18.108	-11.548	-13.200	1.00	24.19		C
	ANISOU	2528	CG	MSE	B	475	3308	2381	3504	-112	93	-465	C
	ATOM	2529	SE	MSE	B	475	16.546	-11.727	-14.313	0.90	27.36		SE
	ANISOU	2529	SE	MSE	B	475	3688	2786	3921	-305	143	-557	SE
10	ATOM	2530	CE	MSE	B	475	15.247	-11.070	-13.061	1.00	18.34		C
	ANISOU	2530	CE	MSE	B	475	2500	1718	2750	-406	169	-500	C
	ATOM	2531	C	MSE	B	475	20.526	-8.725	-12.161	1.00	22.17		C
	ANISOU	2531	C	MSE	B	475	2788	2424	3212	70	-108	-396	C
	ATOM	2532	O	MSE	B	475	20.131	-7.953	-11.287	1.00	21.81		O
15	ANISOU	2532	O	MSE	B	475	2749	2419	3118	30	-137	-377	O
	ATOM	2533	N	ARG	B	476	21.484	-8.425	-13.055	1.00	22.25		N
	ANISOU	2533	N	ARG	B	476	2693	2497	3262	116	-127	-422	N
	ATOM	2534	CA	ARG	B	476	22.159	-7.132	-13.117	1.00	22.50		C
	ANISOU	2534	CA	ARG	B	476	2605	2648	3297	98	-188	-424	C
20	ATOM	2535	CB	ARG	B	476	23.037	-7.065	-14.384	1.00	22.64		C
	ANISOU	2535	CB	ARG	B	476	2515	2725	3361	130	-162	-454	C
	ATOM	2536	CG	ARG	B	476	23.641	-5.664	-14.657	1.00	24.65		C
	ANISOU	2536	CG	ARG	B	476	2649	3092	3623	68	-205	-454	C
	ATOM	2537	CD	ARG	B	476	24.241	-5.462	-16.092	1.00	25.76		C
25	ANISOU	2537	CD	ARG	B	476	2697	3299	3792	63	-145	-481	C
	ATOM	2538	NE	ARG	B	476	23.541	-6.128	-17.231	1.00	27.18		N
	ANISOU	2538	NE	ARG	B	476	2943	3428	3957	63	-58	-533	N
	ATOM	2539	CZ	ARG	B	476	22.619	-5.553	-18.020	1.00	27.94		C
	ANISOU	2539	CZ	ARG	B	476	3071	3528	4018	-25	-39	-562	C
30	ATOM	2540	NH1	ARG	B	476	22.175	-4.295	-17.792	1.00	26.67		N
	ANISOU	2540	NH1	ARG	B	476	2896	3395	3843	-102	-85	-540	N
	ATOM	2541	NH2	ARG	B	476	22.108	-6.250	-19.027	1.00	19.87		N
	ANISOU	2541	NH2	ARG	B	476	2107	2475	2969	-28	19	-615	N
	ATOM	2542	C	ARG	B	476	21.228	-5.892	-12.998	1.00	21.11		C
35	ANISOU	2542	C	ARG	B	476	2425	2504	3091	-6	-197	-447	C
	ATOM	2543	O	ARG	B	476	20.346	-5.675	-13.836	1.00	20.87		O
	ANISOU	2543	O	ARG	B	476	2391	2470	3068	-64	-149	-485	O
	ATOM	2544	N	GLY	B	477	21.432	-5.093	-11.949	1.00	21.59		N
	ANISOU	2544	N	GLY	B	477	2495	2597	3111	-19	-262	-426	N
40	ATOM	2545	CA	GLY	B	477	20.682	-3.845	-11.726	1.00	20.28		C
	ANISOU	2545	CA	GLY	B	477	2344	2444	2916	-89	-267	-452	C
	ATOM	2546	C	GLY	B	477	19.265	-4.001	-11.186	1.00	19.95		C
	ANISOU	2546	C	GLY	B	477	2384	2360	2837	-110	-204	-459	C
	ATOM	2547	O	GLY	B	477	18.600	-2.995	-10.954	1.00	20.31		O
45	ANISOU	2547	O	GLY	B	477	2442	2415	2859	-137	-196	-482	O
	ATOM	2548	N	ILE	B	478	18.805	-5.242	-10.986	1.00	19.45		N
	ANISOU	2548	N	ILE	B	478	2374	2245	2770	-98	-152	-437	N
	ATOM	2549	CA	ILE	B	478	17.425	-5.543	-10.523	1.00	17.96		C
	ANISOU	2549	CA	ILE	B	478	2239	2031	2556	-143	-73	-436	C
50	ATOM	2550	CB	ILE	B	478	16.747	-6.700	-11.323	1.00	18.46		C
	ANISOU	2550	CB	ILE	B	478	2303	2046	2665	-189	-7	-446	C
	ATOM	2551	CG1	ILE	B	478	17.035	-6.649	-12.849	1.00	16.97		C
	ANISOU	2551	CG1	ILE	B	478	2037	1879	2532	-198	-24	-493	C
55	ATOM	2552	CD1	ILE	B	478	16.569	-5.382	-13.592	1.00	12.97		C
	ANISOU	2552	CD1	ILE	B	478	1440	1453	2034	-221	-43	-526	C
	ATOM	2553	CG2	ILE	B	478	15.216	-6.762	-11.010	1.00	18.15		C
	ANISOU	2553	CG2	ILE	B	478	2259	2020	2616	-267	75	-451	C
	ATOM	2554	C	ILE	B	478	17.351	-5.901	-9.018	1.00	18.54		C
	ANISOU	2554	C	ILE	B	478	2425	2075	2545	-124	-62	-387	C
60	ATOM	2555	O	ILE	B	478	18.093	-6.760	-8.523	1.00	18.41		O
	ANISOU	2555	O	ILE	B	478	2476	2015	2504	-76	-93	-336	O
	ATOM	2556	N	ARG	B	479	16.435	-5.252	-8.299	1.00	18.71		N
	ANISOU	2556	N	ARG	B	479	2473	2124	2512	-148	-11	-398	N
	ATOM	2557	CA	ARG	B	479	16.205	-5.537	-6.881	1.00	19.06		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2557	CA	ARG	B	479	2640	2153	2450	-139	24	-354	C
	ATOM	2558	CB	ARG	B	479	16.835	-4.454	-5.980	1.00	19.31		C
	ANISOU	2558	CB	ARG	B	479	2727	2220	2388	-100	-54	-375	C
	ATOM	2559	CG	ARG	B	479	18.364	-4.281	-6.108	1.00	17.90		C
5	ANISOU	2559	CG	ARG	B	479	2524	2056	2221	-65	-199	-368	C
	ATOM	2560	CD	ARG	B	479	19.159	-5.504	-5.595	1.00	20.83		C
	ANISOU	2560	CD	ARG	B	479	2956	2400	2558	-12	-249	-287	C
	ATOM	2561	NE	ARG	B	479	20.603	-5.259	-5.641	1.00	22.94		N
	ANISOU	2561	NE	ARG	B	479	3160	2718	2838	31	-392	-279	N
10	ATOM	2562	CZ	ARG	B	479	21.370	-5.399	-6.728	1.00	22.88		C
	ANISOU	2562	CZ	ARG	B	479	3022	2729	2941	52	-425	-288	C
	ATOM	2563	NH1	ARG	B	479	20.850	-5.826	-7.888	1.00	18.51		N
	ANISOU	2563	NH1	ARG	B	479	2416	2135	2482	38	-335	-309	N
	ATOM	2564	NH2	ARG	B	479	22.673	-5.109	-6.657	1.00	21.36		N
15	ANISOU	2564	NH2	ARG	B	479	2746	2610	2759	82	-549	-278	N
	ATOM	2565	C	ARG	B	479	14.714	-5.617	-6.625	1.00	19.99		C
	ANISOU	2565	C	ARG	B	479	2751	2287	2555	-193	157	-358	C
	ATOM	2566	O	ARG	B	479	13.908	-5.004	-7.352	1.00	19.57		O
	ANISOU	2566	O	ARG	B	479	2588	2283	2564	-214	195	-407	O
20	ATOM	2567	N	VAL	B	480	14.344	-6.383	-5.600	1.00	20.85		N
	ANISOU	2567	N	VAL	B	480	2971	2367	2583	-214	231	-299	N
	ATOM	2568	CA	VAL	B	480	12.969	-6.481	-5.147	1.00	21.50		C
	ANISOU	2568	CA	VAL	B	480	3043	2486	2640	-275	379	-291	C
	ATOM	2569	CB	VAL	B	480	12.437	-7.952	-5.221	1.00	22.40		C
25	ANISOU	2569	CB	VAL	B	480	3194	2531	2785	-375	465	-227	C
	ATOM	2570	CG1	VAL	B	480	11.090	-8.086	-4.576	1.00	22.44		C
	ANISOU	2570	CG1	VAL	B	480	3183	2592	2754	-458	630	-204	C
	ATOM	2571	CG2	VAL	B	480	12.380	-8.430	-6.680	1.00	20.69		C
	ANISOU	2571	CG2	VAL	B	480	2869	2287	2705	-430	428	-266	C
30	ATOM	2572	C	VAL	B	480	12.858	-5.880	-3.738	1.00	23.73		C
	ANISOU	2572	C	VAL	B	480	3442	2803	2771	-231	424	-282	C
	ATOM	2573	O	VAL	B	480	13.635	-6.213	-2.833	1.00	23.83		O
	ANISOU	2573	O	VAL	B	480	3604	2779	2670	-198	372	-230	O
	ATOM	2574	N	SER	B	481	11.899	-4.968	-3.571	1.00	24.34		N
35	ANISOU	2574	N	SER	B	481	3455	2956	2838	-217	517	-336	N
	ATOM	2575	CA	SER	B	481	11.641	-4.340	-2.293	1.00	26.50		C
	ANISOU	2575	CA	SER	B	481	3846	3264	2958	-169	590	-350	C
	ATOM	2576	CB	SER	B	481	10.803	-3.087	-2.498	1.00	26.56		C
	ANISOU	2576	CB	SER	B	481	3755	3338	2998	-108	659	-436	C
40	ATOM	2577	OG	SER	B	481	10.413	-2.542	-1.251	1.00	29.55		O
	ANISOU	2577	OG	SER	B	481	4258	3749	3221	-56	765	-461	O
	ATOM	2578	C	SER	B	481	10.922	-5.271	-1.311	1.00	29.41		C
	ANISOU	2578	C	SER	B	481	4304	3643	3226	-230	745	-270	C
	ATOM	2579	O	SER	B	481	10.009	-6.006	-1.679	1.00	29.10		O
45	ANISOU	2579	O	SER	B	481	4167	3623	3266	-319	857	-233	O
	ATOM	2580	N	LYS	B	482	11.350	-5.230	-0.054	1.00	32.28		N
	ANISOU	2580	N	LYS	B	482	4862	3998	3405	-194	747	-241	N
	ATOM	2581	CA	LYS	B	482	10.679	-5.956	1.007	1.00	36.48		C
	ANISOU	2581	CA	LYS	B	482	5512	4545	3803	-246	910	-159	C
50	ATOM	2582	CB	LYS	B	482	11.708	-6.552	1.973	1.00	37.56		C
	ANISOU	2582	CB	LYS	B	482	5882	4620	3770	-223	813	-72	C
	ATOM	2583	CG	LYS	B	482	12.493	-7.739	1.427	1.00	39.17		C
	ANISOU	2583	CG	LYS	B	482	6106	4718	4059	-250	700	19	C
	ATOM	2584	CD	LYS	B	482	13.494	-8.227	2.457	1.00	46.13		C
55	ANISOU	2584	CD	LYS	B	482	7211	5556	4762	-192	592	114	C
	ATOM	2585	CE	LYS	B	482	13.409	-9.749	2.690	1.00	50.34		C
	ANISOU	2585	CE	LYS	B	482	7871	5976	5278	-245	653	267	C
	ATOM	2586	NZ	LYS	B	482	14.542	-10.223	3.564	1.00	55.51		N
	ANISOU	2586	NZ	LYS	B	482	8732	6587	5770	-151	505	373	N
60	ATOM	2587	C	LYS	B	482	9.701	-5.045	1.766	1.00	39.13		C
	ANISOU	2587	C	LYS	B	482	5851	4981	4035	-202	1082	-221	C
	ATOM	2588	O	LYS	B	482	9.060	-5.500	2.711	1.00	41.48		O
	ANISOU	2588	O	LYS	B	482	6242	5315	4202	-242	1250	-160	O
	ATOM	2589	N	MSE	B	483	9.603	-3.764	1.371	1.00	39.66		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2589	N	MSE	B	483	5832	5082	4154	-113	1050	-338	N
	ATOM	2590	CA	MSE	B	483	8.689	-2.788	2.016	1.00	42.78		C
	ANISOU	2590	CA	MSE	B	483	6232	5558	4464	-32	1217	-416	C
	ATOM	2591	CB	MSE	B	483	9.114	-1.322	1.779	1.00	42.34		C
5	ANISOU	2591	CB	MSE	B	483	6198	5470	4417	85	1113	-544	C
	ATOM	2592	CG	MSE	B	483	10.519	-0.958	2.191	1.00	42.80		C
	ANISOU	2592	CG	MSE	B	483	6451	5447	4363	95	911	-575	C
	ATOM	2593	SE	MSE	B	483	10.790	-1.343	4.076	0.90	53.78		SE
	ANISOU	2593	SE	MSE	B	483	8155	6858	5420	89	969	-539	SE
10	ATOM	2594	CE	MSE	B	483	9.681	-0.017	5.008	1.00	43.83		C
	ANISOU	2594	CE	MSE	B	483	6998	5650	4003	213	1203	-680	C
	ATOM	2595	C	MSE	B	483	7.253	-2.929	1.531	1.00	44.09		C
	ANISOU	2595	C	MSE	B	483	6165	5828	4760	-57	1407	-409	C
	ATOM	2596	O	MSE	B	483	7.028	-2.888	0.312	1.00	43.61		O
15	ANISOU	2596	O	MSE	B	483	5899	5777	4893	-73	1342	-423	O
	ATOM	2597	OXT	MSE	B	483	6.311	-3.041	2.339	1.00	46.48		O
	ANISOU	2597	OXT	MSE	B	483	6471	6220	4971	-61	1623	-390	O
	ATOM	2598	N	ILE	D	319	63.442	-23.655	-17.970	1.00	53.76		N
	ANISOU	2598	N	ILE	D	319	7685	4667	8075	274	727	-949	N
20	ATOM	2599	CA	ILE	D	319	62.501	-23.137	-16.919	1.00	52.62		C
	ANISOU	2599	CA	ILE	D	319	7506	4623	7863	88	628	-790	C
	ATOM	2600	CB	ILE	D	319	62.826	-23.727	-15.487	1.00	53.65		C
	ANISOU	2600	CB	ILE	D	319	7709	4559	8116	134	561	-578	C
	ATOM	2601	CG1	ILE	D	319	61.736	-23.378	-14.463	1.00	53.18		C
25	ANISOU	2601	CG1	ILE	D	319	7660	4578	7969	-75	499	-438	C
	ATOM	2602	CD1	ILE	D	319	61.719	-24.322	-13.234	1.00	55.09		C
	ANISOU	2602	CD1	ILE	D	319	8066	4566	8299	-89	460	-258	C
	ATOM	2603	CG2	ILE	D	319	64.206	-23.306	-14.994	1.00	52.60		C
	ANISOU	2603	CG2	ILE	D	319	7451	4467	8067	373	525	-452	C
30	ATOM	2604	C	ILE	D	319	62.352	-21.605	-16.916	1.00	49.28		C
	ANISOU	2604	C	ILE	D	319	6892	4530	7301	56	600	-732	C
	ATOM	2605	O	ILE	D	319	61.237	-21.097	-16.682	1.00	48.90		O
	ANISOU	2605	O	ILE	D	319	6817	4614	7147	-127	555	-712	O
	ATOM	2606	N	SER	D	320	63.458	-20.898	-17.210	1.00	47.45		N
35	ANISOU	2606	N	SER	D	320	6524	4418	7087	232	634	-713	N
	ATOM	2607	CA	SER	D	320	63.576	-19.403	-17.245	1.00	43.82		C
	ANISOU	2607	CA	SER	D	320	5886	4238	6528	231	618	-650	C
	ATOM	2608	CB	SER	D	320	62.853	-18.783	-18.463	1.00	43.61		C
	ANISOU	2608	CB	SER	D	320	5846	4391	6332	139	666	-791	C
40	ATOM	2609	OG	SER	D	320	62.411	-19.771	-19.397	1.00	46.63		O
	ANISOU	2609	OG	SER	D	320	6378	4652	6686	96	715	-975	O
	ATOM	2610	C	SER	D	320	63.164	-18.674	-15.938	1.00	40.81		C
	ANISOU	2610	C	SER	D	320	5444	3950	6114	147	509	-475	C
	ATOM	2611	O	SER	D	320	62.342	-17.737	-15.963	1.00	39.35		O
45	ANISOU	2611	O	SER	D	320	5199	3949	5803	29	485	-470	O
	ATOM	2612	N	SER	D	321	63.744	-19.096	-14.810	1.00	38.96		N
	ANISOU	2612	N	SER	D	321	5233	3587	5982	223	441	-336	N
	ATOM	2613	CA	SER	D	321	63.435	-18.492	-13.514	1.00	35.41		C
	ANISOU	2613	CA	SER	D	321	4761	3214	5478	159	341	-177	C
50	ATOM	2614	CB	SER	D	321	63.252	-19.571	-12.458	1.00	37.05		C
	ANISOU	2614	CB	SER	D	321	5133	3209	5736	139	291	-64	C
	ATOM	2615	OG	SER	D	321	64.485	-20.151	-12.113	1.00	39.50		O
	ANISOU	2615	OG	SER	D	321	5449	3370	6187	334	243	7	O
	ATOM	2616	C	SER	D	321	64.454	-17.445	-13.030	1.00	33.02		C
55	ANISOU	2616	C	SER	D	321	4299	3045	5202	275	271	-86	C
	ATOM	2617	O	SER	D	321	64.263	-16.842	-11.978	1.00	31.66		O
	ANISOU	2617	O	SER	D	321	4115	2947	4966	231	181	25	O
	ATOM	2618	N	SER	D	322	65.501	-17.202	-13.829	1.00	31.16		N
	ANISOU	2618	N	SER	D	322	3939	2845	5057	410	324	-145	N
60	ATOM	2619	CA	SER	D	322	66.656	-16.427	-13.420	1.00	28.20		C
	ANISOU	2619	CA	SER	D	322	3392	2555	4768	525	259	-67	C
	ATOM	2620	CB	SER	D	322	67.515	-17.350	-12.575	1.00	30.48		C
	ANISOU	2620	CB	SER	D	322	3710	2670	5202	669	164	29	C
	ATOM	2621	OG	SER	D	322	68.312	-16.682	-11.683	1.00	28.82		O



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2621	OG	SER	D	322	3373	2534	5042	733	26	137	O
	ATOM	2622	C	SER	D	322	67.425	-16.050	-14.688	1.00	27.21		C
	ANISOU	2622	C	SER	D	322	3127	2506	4706	610	390	-168	C
	ATOM	2623	O	SER	D	322	67.831	-16.930	-15.437	1.00	28.51		O
5	ANISOU	2623	O	SER	D	322	3324	2557	4949	708	491	-255	O
	ATOM	2624	N	PHE	D	323	67.651	-14.758	-14.921	1.00	24.48		N
	ANISOU	2624	N	PHE	D	323	2638	2339	4326	576	402	-155	N
	ATOM	2625	CA	PHE	D	323	68.250	-14.299	-16.169	1.00	24.11		C
10	ANISOU	2625	CA	PHE	D	323	2478	2379	4303	627	556	-233	C
	ATOM	2626	CB	PHE	D	323	67.335	-14.608	-17.378	1.00	23.01		C
	ANISOU	2626	CB	PHE	D	323	2478	2256	4010	561	682	-365	C
	ATOM	2627	CG	PHE	D	323	65.905	-14.146	-17.190	1.00	21.13		C
	ANISOU	2627	CG	PHE	D	323	2340	2096	3593	393	614	-364	C
	ATOM	2628	CD1	PHE	D	323	65.509	-12.883	-17.609	1.00	18.06		C
15	ANISOU	2628	CD1	PHE	D	323	1896	1878	3090	321	629	-351	C
	ATOM	2629	CE1	PHE	D	323	64.229	-12.463	-17.415	1.00	18.85		C
	ANISOU	2629	CE1	PHE	D	323	2060	2050	3052	195	564	-350	C
	ATOM	2630	CZ	PHE	D	323	63.312	-13.289	-16.768	1.00	18.75		C
20	ANISOU	2630	CZ	PHE	D	323	2157	1953	3016	115	496	-360	C
	ATOM	2631	CE2	PHE	D	323	63.706	-14.538	-16.339	1.00	19.68		C
	ANISOU	2631	CE2	PHE	D	323	2346	1892	3241	165	489	-361	C
	ATOM	2632	CD2	PHE	D	323	64.977	-14.960	-16.567	1.00	18.81		C
	ANISOU	2632	CD2	PHE	D	323	2185	1700	3264	312	540	-365	C
	ATOM	2633	C	PHE	D	323	68.551	-12.810	-16.119	1.00	23.35		C
25	ANISOU	2633	C	PHE	D	323	2228	2449	4195	574	541	-174	C
	ATOM	2634	O	PHE	D	323	68.114	-12.092	-15.213	1.00	22.75		O
	ANISOU	2634	O	PHE	D	323	2155	2426	4064	488	412	-101	O
	ATOM	2635	N	SER	D	324	69.271	-12.361	-17.128	1.00	24.41		N
30	ANISOU	2635	N	SER	D	324	2245	2654	4374	623	689	-212	N
	ATOM	2636	CA	SER	D	324	69.624	-10.980	-17.324	1.00	25.05		C
	ANISOU	2636	CA	SER	D	324	2189	2868	4460	566	717	-160	C
	ATOM	2637	CB	SER	D	324	71.102	-10.908	-17.645	1.00	26.25		C
	ANISOU	2637	CB	SER	D	324	2123	3028	4822	674	816	-146	C
	ATOM	2638	OG	SER	D	324	71.632	-9.664	-17.257	1.00	30.85		O
35	ANISOU	2638	OG	SER	D	324	2540	3694	5489	607	763	-65	O
	ATOM	2639	C	SER	D	324	68.774	-10.395	-18.480	1.00	24.43		C
	ANISOU	2639	C	SER	D	324	2213	2890	4180	485	840	-211	C
	ATOM	2640	O	SER	D	324	68.616	-11.018	-19.533	1.00	26.03		O
40	ANISOU	2640	O	SER	D	324	2506	3084	4301	525	976	-305	O
	ATOM	2641	N	PHE	D	325	68.185	-9.219	-18.275	1.00	22.46		N
	ANISOU	2641	N	PHE	D	325	1967	2727	3838	380	779	-155	N
	ATOM	2642	CA	PHE	D	325	67.496	-8.549	-19.370	1.00	21.87		C
	ANISOU	2642	CA	PHE	D	325	1975	2750	3586	326	877	-178	C
	ATOM	2643	CB	PHE	D	325	66.033	-9.046	-19.505	1.00	20.62		C
45	ANISOU	2643	CB	PHE	D	325	1995	2598	3243	268	813	-247	C
	ATOM	2644	CG	PHE	D	325	65.292	-8.433	-20.664	1.00	20.13		C
	ANISOU	2644	CG	PHE	D	325	2019	2644	2985	231	879	-274	C
	ATOM	2645	CD1	PHE	D	325	65.624	-8.761	-21.981	1.00	21.66		C
50	ANISOU	2645	CD1	PHE	D	325	2270	2870	3090	285	1038	-341	C
	ATOM	2646	CE1	PHE	D	325	64.947	-8.172	-23.059	1.00	22.94		C
	ANISOU	2646	CE1	PHE	D	325	2536	3141	3041	260	1079	-353	C
	ATOM	2647	CZ	PHE	D	325	63.902	-7.259	-22.812	1.00	21.18		C
	ANISOU	2647	CZ	PHE	D	325	2337	2986	2723	190	953	-296	C
	ATOM	2648	CE2	PHE	D	325	63.581	-6.933	-21.498	1.00	16.68		C
55	ANISOU	2648	CE2	PHE	D	325	1694	2379	2264	142	816	-240	C
	ATOM	2649	CD2	PHE	D	325	64.266	-7.516	-20.443	1.00	17.35		C
	ANISOU	2649	CD2	PHE	D	325	1699	2364	2528	156	782	-231	C
	ATOM	2650	C	PHE	D	325	67.564	-7.047	-19.143	1.00	21.28		C
60	ANISOU	2650	C	PHE	D	325	1823	2743	3519	255	845	-83	C
	ATOM	2651	O	PHE	D	325	67.193	-6.571	-18.081	1.00	20.40		O
	ANISOU	2651	O	PHE	D	325	1704	2620	3427	202	694	-41	O
	ATOM	2652	N	GLY	D	326	68.068	-6.315	-20.129	1.00	22.68		N
	ANISOU	2652	N	GLY	D	326	1956	2980	3681	255	996	-51	N
	ATOM	2653	CA	GLY	D	326	68.092	-4.857	-20.077	1.00	21.89		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2653	CA	GLY	D	326	1812	2918	3589	180	986	43	C
	ATOM	2654	C	GLY	D	326	68.926	-4.267	-18.972	1.00	21.89		C
	ANISOU	2654	C	GLY	D	326	1648	2871	3799	145	884	102	C
	ATOM	2655	O	GLY	D	326	68.699	-3.141	-18.549	1.00	22.59		O
5	ANISOU	2655	O	GLY	D	326	1733	2957	3894	70	809	157	O
	ATOM	2656	N	GLY	D	327	69.900	-5.022	-18.502	1.00	23.39		N
	ANISOU	2656	N	GLY	D	327	1704	3016	4166	204	868	84	N
	ATOM	2657	CA	GLY	D	327	70.839	-4.538	-17.493	1.00	23.14		C
10	ANISOU	2657	CA	GLY	D	327	1492	2951	4348	176	749	131	C
	ATOM	2658	C	GLY	D	327	70.329	-4.854	-16.096	1.00	21.75		C
	ANISOU	2658	C	GLY	D	327	1381	2731	4150	171	514	118	C
	ATOM	2659	O	GLY	D	327	70.892	-4.379	-15.118	1.00	22.68		O
	ANISOU	2659	O	GLY	D	327	1397	2828	4394	138	366	145	O
	ATOM	2660	N	PHE	D	328	69.279	-5.678	-16.009	1.00	19.65		N
15	ANISOU	2660	N	PHE	D	328	1290	2454	3722	196	483	75	N
	ATOM	2661	CA	PHE	D	328	68.706	-6.111	-14.734	1.00	17.83		C
	ANISOU	2661	CA	PHE	D	328	1149	2184	3442	190	299	73	C
	ATOM	2662	CB	PHE	D	328	67.233	-5.642	-14.619	1.00	15.94		C
	ANISOU	2662	CB	PHE	D	328	1072	1982	3001	117	271	59	C
20	ATOM	2663	CG	PHE	D	328	67.092	-4.187	-14.431	1.00	14.33		C
	ANISOU	2663	CG	PHE	D	328	847	1811	2787	46	236	88	C
	ATOM	2664	CD1	PHE	D	328	67.017	-3.642	-13.141	1.00	16.78		C
	ANISOU	2664	CD1	PHE	D	328	1171	2101	3102	9	76	98	C
	ATOM	2665	CE1	PHE	D	328	66.918	-2.239	-12.944	1.00	15.67		C
25	ANISOU	2665	CE1	PHE	D	328	1024	1962	2966	-54	42	109	C
	ATOM	2666	CZ	PHE	D	328	66.886	-1.387	-14.054	1.00	15.40		C
	ANISOU	2666	CZ	PHE	D	328	971	1944	2938	-80	169	134	C
	ATOM	2667	CE2	PHE	D	328	66.986	-1.913	-15.341	1.00	14.72		C
	ANISOU	2667	CE2	PHE	D	328	873	1892	2828	-43	329	144	C
30	ATOM	2668	CD2	PHE	D	328	67.088	-3.328	-15.522	1.00	15.45		C
	ANISOU	2668	CD2	PHE	D	328	971	1989	2910	21	362	108	C
	ATOM	2669	C	PHE	D	328	68.769	-7.623	-14.575	1.00	18.64		C
	ANISOU	2669	C	PHE	D	328	1303	2216	3563	279	290	46	C
	ATOM	2670	O	PHE	D	328	68.507	-8.386	-15.522	1.00	20.76		O
35	ANISOU	2670	O	PHE	D	328	1636	2471	3780	318	422	-9	O
	ATOM	2671	N	THR	D	329	69.112	-8.074	-13.376	1.00	18.73		N
	ANISOU	2671	N	THR	D	329	1307	2172	3639	313	128	82	N
	ATOM	2672	CA	THR	D	329	69.005	-9.486	-13.040	1.00	18.53		C
	ANISOU	2672	CA	THR	D	329	1375	2049	3615	390	97	78	C
40	ATOM	2673	CB	THR	D	329	70.023	-9.885	-11.931	1.00	20.11		C
	ANISOU	2673	CB	THR	D	329	1490	2190	3961	478	-77	142	C
	ATOM	2674	OG1	THR	D	329	71.364	-9.562	-12.341	1.00	19.13		O
	ANISOU	2674	OG1	THR	D	329	1128	2092	4050	544	-48	144	O
	ATOM	2675	CG2	THR	D	329	69.932	-11.382	-11.615	1.00	18.59		C
45	ANISOU	2675	CG2	THR	D	329	1418	1867	3778	573	-104	159	C
	ATOM	2676	C	THR	D	329	67.566	-9.736	-12.566	1.00	17.59		C
	ANISOU	2676	C	THR	D	329	1460	1922	3302	307	61	73	C
	ATOM	2677	O	THR	D	329	67.134	-9.147	-11.597	1.00	17.15		O
	ANISOU	2677	O	THR	D	329	1450	1898	3166	247	-52	110	O
50	ATOM	2678	N	PHE	D	330	66.827	-10.592	-13.275	1.00	17.78		N
	ANISOU	2678	N	PHE	D	330	1597	1907	3254	299	165	17	N
	ATOM	2679	CA	PHE	D	330	65.483	-11.015	-12.896	1.00	16.15		C
	ANISOU	2679	CA	PHE	D	330	1553	1684	2900	211	149	7	C
	ATOM	2680	CB	PHE	D	330	64.639	-11.297	-14.140	1.00	15.29		C
55	ANISOU	2680	CB	PHE	D	330	1503	1600	2706	164	276	-89	C
	ATOM	2681	CG	PHE	D	330	64.137	-10.053	-14.865	1.00	14.68		C
	ANISOU	2681	CG	PHE	D	330	1379	1664	2533	108	322	-115	C
	ATOM	2682	CD1	PHE	D	330	62.776	-9.790	-14.933	1.00	13.44		C
	ANISOU	2682	CD1	PHE	D	330	1289	1576	2242	15	315	-144	C
60	ATOM	2683	CE1	PHE	D	330	62.297	-8.658	-15.616	1.00	12.28		C
	ANISOU	2683	CE1	PHE	D	330	1106	1548	2011	-11	342	-157	C
	ATOM	2684	CZ	PHE	D	330	63.203	-7.777	-16.224	1.00	10.41		C
	ANISOU	2684	CZ	PHE	D	330	787	1349	1819	38	392	-129	C
	ATOM	2685	CE2	PHE	D	330	64.553	-8.017	-16.140	1.00	10.15		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2685	CE2	PHE	D	330	674	1255	1926	107	417	-102	C
	ATOM	2686	CD2	PHE	D	330	65.026	-9.161	-15.481	1.00	11.56		C
	ANISOU	2686	CD2	PHE	D	330	868	1328	2197	152	376	-101	C
	ATOM	2687	C	PHE	D	330	65.588	-12.317	-12.123	1.00	18.49		C
5	ANISOU	2687	C	PHE	D	330	1952	1835	3239	255	88	51	C
	ATOM	2688	O	PHE	D	330	66.310	-13.222	-12.529	1.00	19.07		O
	ANISOU	2688	O	PHE	D	330	2014	1802	3429	356	126	32	O
	ATOM	2689	N	LYS	D	331	64.871	-12.417	-11.004	1.00	18.87		N
10	ANISOU	2689	N	LYS	D	331	2112	1869	3190	188	7	114	N
	ATOM	2690	CA	LYS	D	331	64.775	-13.663	-10.273	1.00	19.84		C
	ANISOU	2690	CA	LYS	D	331	2374	1841	3323	209	-35	177	C
	ATOM	2691	CB	LYS	D	331	65.564	-13.571	-8.961	1.00	21.52		C
	ANISOU	2691	CB	LYS	D	331	2594	2030	3554	282	-199	293	C
	ATOM	2692	CG	LYS	D	331	67.070	-13.465	-9.152	1.00	23.54		C
15	ANISOU	2692	CG	LYS	D	331	2684	2273	3989	429	-270	302	C
	ATOM	2693	CD	LYS	D	331	67.817	-13.640	-7.837	1.00	30.28		C
	ANISOU	2693	CD	LYS	D	331	3560	3083	4861	514	-470	419	C
	ATOM	2694	CE	LYS	D	331	69.326	-13.743	-8.063	1.00	32.87		C
20	ANISOU	2694	CE	LYS	D	331	3692	3387	5410	673	-546	426	C
	ATOM	2695	NZ	LYS	D	331	70.045	-13.890	-6.766	1.00	36.55		N
	ANISOU	2695	NZ	LYS	D	331	4174	3826	5889	762	-782	540	N
	ATOM	2696	C	LYS	D	331	63.317	-13.898	-9.984	1.00	19.36		C
	ANISOU	2696	C	LYS	D	331	2445	1788	3123	64	15	174	C
	ATOM	2697	O	LYS	D	331	62.675	-13.085	-9.342	1.00	18.88		O
25	ANISOU	2697	O	LYS	D	331	2391	1836	2946	-11	-10	198	O
	ATOM	2698	N	ARG	D	332	62.778	-15.009	-10.461	1.00	19.97		N
	ANISOU	2698	N	ARG	D	332	2620	1747	3223	20	93	133	N
	ATOM	2699	CA	ARG	D	332	61.355	-15.290	-10.281	1.00	19.72		C
30	ANISOU	2699	CA	ARG	D	332	2679	1723	3091	-141	152	120	C
	ATOM	2700	CB	ARG	D	332	60.867	-16.358	-11.279	1.00	20.07		C
	ANISOU	2700	CB	ARG	D	332	2784	1649	3191	-199	239	17	C
	ATOM	2701	CG	ARG	D	332	59.346	-16.450	-11.354	1.00	20.01		C
	ANISOU	2701	CG	ARG	D	332	2804	1695	3106	-388	297	-30	C
	ATOM	2702	CD	ARG	D	332	58.875	-17.327	-12.504	1.00	20.70		C
35	ANISOU	2702	CD	ARG	D	332	2929	1692	3243	-458	356	-169	C
	ATOM	2703	NE	ARG	D	332	59.269	-18.715	-12.316	1.00	22.45		N
	ANISOU	2703	NE	ARG	D	332	3301	1656	3571	-438	369	-145	N
	ATOM	2704	CZ	ARG	D	332	59.397	-19.590	-13.307	1.00	25.52		C
40	ANISOU	2704	CZ	ARG	D	332	3753	1907	4035	-430	408	-274	C
	ATOM	2705	NH1	ARG	D	332	59.137	-19.233	-14.566	1.00	25.47		N
	ANISOU	2705	NH1	ARG	D	332	3678	2016	3984	-447	433	-436	N
	ATOM	2706	NH2	ARG	D	332	59.748	-20.829	-13.035	1.00	27.36		N
	ANISOU	2706	NH2	ARG	D	332	4137	1879	4378	-401	419	-243	N
	ATOM	2707	C	ARG	D	332	61.108	-15.726	-8.841	1.00	20.88		C
45	ANISOU	2707	C	ARG	D	332	2961	1796	3175	-177	105	260	C
	ATOM	2708	O	ARG	D	332	61.801	-16.602	-8.331	1.00	21.02		O
	ANISOU	2708	O	ARG	D	332	3078	1652	3257	-95	52	348	O
	ATOM	2709	N	THR	D	333	60.149	-15.078	-8.180	1.00	20.24		N
50	ANISOU	2709	N	THR	D	333	2890	1838	2964	-284	127	286	N
	ATOM	2710	CA	THR	D	333	59.820	-15.426	-6.778	1.00	21.32		C
	ANISOU	2710	CA	THR	D	333	3176	1927	2997	-328	111	423	C
	ATOM	2711	CB	THR	D	333	59.888	-14.174	-5.876	1.00	20.56		C
	ANISOU	2711	CB	THR	D	333	3051	1993	2767	-301	47	456	C
	ATOM	2712	OG1	THR	D	333	59.095	-13.132	-6.468	1.00	19.68		O
55	ANISOU	2712	OG1	THR	D	333	2807	2049	2621	-363	113	346	O
	ATOM	2713	CG2	THR	D	333	61.342	-13.644	-5.770	1.00	21.41		C
	ANISOU	2713	CG2	THR	D	333	3092	2109	2933	-143	-107	471	C
	ATOM	2714	C	THR	D	333	58.450	-16.124	-6.612	1.00	22.28		C
60	ANISOU	2714	C	THR	D	333	3381	2007	3077	-508	241	434	C
	ATOM	2715	O	THR	D	333	58.187	-16.719	-5.565	1.00	24.07		O
	ANISOU	2715	O	THR	D	333	3763	2148	3232	-557	263	564	O
	ATOM	2716	N	SER	D	334	57.595	-16.054	-7.636	1.00	21.08		N
	ANISOU	2716	N	SER	D	334	3124	1916	2968	-609	321	305	N
	ATOM	2717	CA	SER	D	334	56.275	-16.727	-7.644	1.00	22.78		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2717	CA	SER	D	334	3368	2099	3187	-801	437	290	C
	ATOM	2718	CB	SER	D	334	55.169	-15.774	-7.203	1.00	22.34		C
	ANISOU	2718	CB	SER	D	334	3214	2251	3025	-891	506	277	C
	ATOM	2719	OG	SER	D	334	54.919	-15.851	-5.848	1.00	26.42		O
5	ANISOU	2719	OG	SER	D	334	3849	2761	3430	-928	557	413	O
	ATOM	2720	C	SER	D	334	55.889	-17.081	-9.055	1.00	21.71		C
	ANISOU	2720	C	SER	D	334	3148	1948	3153	-862	459	131	C
	ATOM	2721	O	SER	D	334	56.317	-16.426	-9.985	1.00	20.94		O
10	ANISOU	2721	O	SER	D	334	2944	1944	3068	-771	412	32	O
	ATOM	2722	N	GLY	D	335	55.021	-18.077	-9.193	1.00	23.23		N
	ANISOU	2722	N	GLY	D	335	3391	2027	3407	-1030	533	108	N
	ATOM	2723	CA	GLY	D	335	54.375	-18.411	-10.458	1.00	21.87		C
	ANISOU	2723	CA	GLY	D	335	3139	1860	3310	-1132	543	-62	C
	ATOM	2724	C	GLY	D	335	55.276	-19.178	-11.397	1.00	22.97		C
15	ANISOU	2724	C	GLY	D	335	3362	1826	3539	-1040	501	-149	C
	ATOM	2725	O	GLY	D	335	56.339	-19.683	-10.997	1.00	21.77		O
	ANISOU	2725	O	GLY	D	335	3331	1510	3430	-910	477	-63	O
	ATOM	2726	N	SER	D	336	54.833	-19.252	-12.651	1.00	23.39		N
20	ANISOU	2726	N	SER	D	336	3346	1924	3615	-1097	487	-326	N
	ATOM	2727	CA	SER	D	336	55.445	-20.058	-13.689	1.00	25.47		C
	ANISOU	2727	CA	SER	D	336	3699	2029	3950	-1039	472	-454	C
	ATOM	2728	CB	SER	D	336	55.193	-21.560	-13.460	1.00	28.08		C
	ANISOU	2728	CB	SER	D	336	4201	2067	4403	-1165	513	-454	C
	ATOM	2729	OG	SER	D	336	53.803	-21.892	-13.365	1.00	31.54		O
25	ANISOU	2729	OG	SER	D	336	4597	2519	4869	-1418	545	-493	O
	ATOM	2730	C	SER	D	336	54.844	-19.634	-15.019	1.00	25.72		C
	ANISOU	2730	C	SER	D	336	3625	2220	3926	-1088	437	-644	C
	ATOM	2731	O	SER	D	336	53.847	-18.912	-15.056	1.00	25.59		O
30	ANISOU	2731	O	SER	D	336	3468	2403	3851	-1187	417	-664	O
	ATOM	2732	N	SER	D	337	55.464	-20.046	-16.117	1.00	26.46		N
	ANISOU	2732	N	SER	D	337	3787	2238	4029	-1003	427	-783	N
	ATOM	2733	CA	SER	D	337	54.928	-19.730	-17.429	1.00	27.34		C
	ANISOU	2733	CA	SER	D	337	3839	2495	4056	-1043	381	-965	C
	ATOM	2734	CB	SER	D	337	55.383	-18.344	-17.922	1.00	25.38		C
35	ANISOU	2734	CB	SER	D	337	3476	2488	3680	-890	361	-946	C
	ATOM	2735	OG	SER	D	337	56.780	-18.297	-18.126	1.00	26.90		O
	ANISOU	2735	OG	SER	D	337	3722	2614	3884	-694	409	-919	O
	ATOM	2736	C	SER	D	337	55.239	-20.809	-18.446	1.00	29.10		C
40	ANISOU	2736	C	SER	D	337	4212	2533	4312	-1040	389	-1148	C
	ATOM	2737	O	SER	D	337	56.117	-21.653	-18.247	1.00	29.85		O
	ANISOU	2737	O	SER	D	337	4444	2396	4503	-947	441	-1131	O
	ATOM	2738	N	ILE	D	338	54.459	-20.799	-19.515	1.00	30.44		N
	ANISOU	2738	N	ILE	D	338	4360	2804	4402	-1139	325	-1328	N
	ATOM	2739	CA	ILE	D	338	54.760	-21.558	-20.713	1.00	32.19		C
45	ANISOU	2739	CA	ILE	D	338	4726	2912	4591	-1113	322	-1541	C
	ATOM	2740	CB	ILE	D	338	53.644	-22.589	-21.052	1.00	34.45		C
	ANISOU	2740	CB	ILE	D	338	5075	3071	4942	-1359	255	-1712	C
	ATOM	2741	CG1	ILE	D	338	52.280	-21.909	-21.249	1.00	34.10		C
50	ANISOU	2741	CG1	ILE	D	338	4845	3281	4832	-1530	140	-1749	C
	ATOM	2742	CD1	ILE	D	338	51.154	-22.880	-21.685	1.00	36.18		C
	ANISOU	2742	CD1	ILE	D	338	5133	3442	5171	-1794	50	-1941	C
	ATOM	2743	CG2	ILE	D	338	53.582	-23.654	-19.966	1.00	35.56		C
	ANISOU	2743	CG2	ILE	D	338	5308	2920	5282	-1470	315	-1615	C
	ATOM	2744	C	ILE	D	338	55.002	-20.549	-21.828	1.00	31.93		C
55	ANISOU	2744	C	ILE	D	338	4641	3126	4363	-988	294	-1615	C
	ATOM	2745	O	ILE	D	338	54.712	-19.381	-21.647	1.00	30.28		O
	ANISOU	2745	O	ILE	D	338	4282	3147	4075	-964	258	-1510	O
	ATOM	2746	N	LYS	D	339	55.566	-20.983	-22.950	1.00	35.00		N
	ANISOU	2746	N	LYS	D	339	5170	3459	4671	-897	324	-1788	N
60	ATOM	2747	CA	LYS	D	339	55.850	-20.096	-24.079	1.00	36.41		C
	ANISOU	2747	CA	LYS	D	339	5338	3859	4637	-776	321	-1851	C
	ATOM	2748	CB	LYS	D	339	57.326	-20.142	-24.495	1.00	36.95		C
	ANISOU	2748	CB	LYS	D	339	5494	3859	4687	-549	472	-1853	C
	ATOM	2749	CG	LYS	D	339	58.378	-19.987	-23.447	1.00	37.74		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2749	CG	LYS	D	339	5523	3868	4948	-415	568	-1657	C
	ATOM	2750	CD	LYS	D	339	59.724	-20.262	-24.109	1.00	42.28		C
	ANISOU	2750	CD	LYS	D	339	6178	4366	5520	-206	718	-1721	C
	ATOM	2751	CE	LYS	D	339	60.861	-20.353	-23.116	1.00	43.49		C
5	ANISOU	2751	CE	LYS	D	339	6261	4395	5869	-62	795	-1556	C
	ATOM	2752	NZ	LYS	D	339	62.013	-21.010	-23.793	1.00	46.57		N
	ANISOU	2752	NZ	LYS	D	339	6738	4653	6302	127	942	-1667	N
	ATOM	2753	C	LYS	D	339	55.092	-20.560	-25.307	1.00	39.56		C
	ANISOU	2753	C	LYS	D	339	5843	4294	4893	-881	222	-2099	C
10	ATOM	2754	O	LYS	D	339	54.885	-21.757	-25.525	1.00	41.85		O
	ANISOU	2754	O	LYS	D	339	6273	4373	5255	-979	208	-2268	O
	ATOM	2755	N	ARG	D	340	54.750	-19.599	-26.148	1.00	40.34		N
	ANISOU	2755	N	ARG	D	340	5894	4653	4779	-847	148	-2123	N
	ATOM	2756	CA	ARG	D	340	54.128	-19.873	-27.426	1.00	43.61		C
15	ANISOU	2756	CA	ARG	D	340	6421	5149	5002	-912	32	-2354	C
	ATOM	2757	CB	ARG	D	340	52.616	-19.731	-27.273	1.00	44.40		C
	ANISOU	2757	CB	ARG	D	340	6374	5372	5123	-1124	-171	-2385	C
	ATOM	2758	CG	ARG	D	340	51.801	-20.062	-28.490	1.00	48.83		C
	ANISOU	2758	CG	ARG	D	340	7023	6024	5507	-1227	-350	-2632	C
20	ATOM	2759	CD	ARG	D	340	50.478	-19.350	-28.366	1.00	52.29		C
	ANISOU	2759	CD	ARG	D	340	7237	6693	5939	-1353	-548	-2586	C
	ATOM	2760	NE	ARG	D	340	49.496	-19.823	-29.329	1.00	58.76		N
	ANISOU	2760	NE	ARG	D	340	8095	7584	6649	-1504	-768	-2830	N
	ATOM	2761	CZ	ARG	D	340	48.306	-19.252	-29.509	1.00	62.04		C
25	ANISOU	2761	CZ	ARG	D	340	8317	8227	7030	-1600	-982	-2837	C
	ATOM	2762	NH1	ARG	D	340	47.964	-18.181	-28.792	1.00	60.08		N
	ANISOU	2762	NH1	ARG	D	340	7836	8142	6848	-1546	-980	-2613	N
	ATOM	2763	NH2	ARG	D	340	47.457	-19.748	-30.409	1.00	66.38		N
	ANISOU	2763	NH2	ARG	D	340	8900	8838	7483	-1742	-1208	-3077	N
30	ATOM	2764	C	ARG	D	340	54.699	-18.825	-28.379	1.00	43.42		C
	ANISOU	2764	C	ARG	D	340	6432	5344	4723	-731	75	-2320	C
	ATOM	2765	O	ARG	D	340	54.666	-17.628	-28.079	1.00	41.49		O
	ANISOU	2765	O	ARG	D	340	6042	5281	4442	-669	66	-2130	O
	ATOM	2766	N	GLU	D	341	55.293	-19.272	-29.480	1.00	45.77		N
35	ANISOU	2766	N	GLU	D	341	6935	5607	4850	-638	147	-2495	N
	ATOM	2767	CA	GLU	D	341	55.826	-18.341	-30.477	1.00	46.72		C
	ANISOU	2767	CA	GLU	D	341	7119	5932	4699	-477	212	-2464	C
	ATOM	2768	CB	GLU	D	341	56.762	-19.062	-31.453	1.00	49.50		C
	ANISOU	2768	CB	GLU	D	341	7709	6182	4915	-352	375	-2651	C
40	ATOM	2769	CG	GLU	D	341	57.526	-18.146	-32.413	1.00	51.74		C
	ANISOU	2769	CG	GLU	D	341	8071	6657	4932	-174	514	-2591	C
	ATOM	2770	CD	GLU	D	341	58.919	-18.672	-32.742	1.00	55.51		C
	ANISOU	2770	CD	GLU	D	341	8666	6998	5426	1	793	-2654	C
	ATOM	2771	OE1	GLU	D	341	59.022	-19.726	-33.415	1.00	59.55		O
45	ANISOU	2771	OE1	GLU	D	341	9387	7379	5861	12	832	-2909	O
	ATOM	2772	OE2	GLU	D	341	59.911	-18.027	-32.326	1.00	54.92		O
	ANISOU	2772	OE2	GLU	D	341	8468	6945	5454	128	973	-2457	O
	ATOM	2773	C	GLU	D	341	54.668	-17.653	-31.202	1.00	47.34		C
	ANISOU	2773	C	GLU	D	341	7175	6260	4552	-555	-12	-2501	C
50	ATOM	2774	O	GLU	D	341	53.755	-18.308	-31.666	1.00	49.11		O
	ANISOU	2774	O	GLU	D	341	7462	6479	4718	-696	-188	-2701	O
	ATOM	2775	N	GLU	D	342	54.698	-16.327	-31.260	1.00	46.37		N
	ANISOU	2775	N	GLU	D	342	6952	6343	4322	-463	-17	-2304	N
	ATOM	2776	CA	GLU	D	342	53.581	-15.557	-31.814	1.00	48.18		C
55	ANISOU	2776	CA	GLU	D	342	7130	6809	4367	-510	-246	-2296	C
	ATOM	2777	CB	GLU	D	342	52.718	-14.978	-30.691	1.00	45.85		C
	ANISOU	2777	CB	GLU	D	342	6568	6567	4287	-600	-362	-2136	C
	ATOM	2778	CG	GLU	D	342	51.598	-15.878	-30.201	1.00	49.03		C
	ANISOU	2778	CG	GLU	D	342	6868	6895	4866	-815	-524	-2272	C
60	ATOM	2779	CD	GLU	D	342	50.813	-15.233	-29.079	1.00	48.12		C
	ANISOU	2779	CD	GLU	D	342	6483	6849	4951	-882	-591	-2102	C
	ATOM	2780	OE1	GLU	D	342	50.844	-15.791	-27.956	1.00	52.42		O
	ANISOU	2780	OE1	GLU	D	342	6943	7228	5746	-975	-507	-2058	O
	ATOM	2781	OE2	GLU	D	342	50.194	-14.158	-29.301	1.00	51.11		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2781	OE2	GLU	D	342	6748	7440	5233	-829	-716	-2007	O
	ATOM	2782	C	GLU	D	342	54.051	-14.407	-32.683	1.00	47.55		C
	ANISOU	2782	C	GLU	D	342	7135	6921	4011	-343	-190	-2174	C
	ATOM	2783	O	GLU	D	342	55.108	-13.831	-32.436	1.00	45.79		O
5	ANISOU	2783	O	GLU	D	342	6900	6671	3827	-217	22	-2008	O
	ATOM	2784	N	GLU	D	343	53.237	-14.060	-33.674	1.00	49.19		N
	ANISOU	2784	N	GLU	D	343	7421	7319	3949	-350	-391	-2247	N
	ATOM	2785	CA	GLU	D	343	53.517	-12.924	-34.539	1.00	49.57		C
	ANISOU	2785	CA	GLU	D	343	7571	7555	3708	-200	-366	-2109	C
10	ATOM	2786	CB	GLU	D	343	53.181	-13.255	-35.991	1.00	53.34		C
	ANISOU	2786	CB	GLU	D	343	8304	8158	3805	-185	-494	-2308	C
	ATOM	2787	CG	GLU	D	343	53.423	-14.707	-36.327	1.00	57.34		C
	ANISOU	2787	CG	GLU	D	343	8979	8503	4305	-258	-446	-2603	C
	ATOM	2788	CD	GLU	D	343	54.110	-14.904	-37.652	1.00	62.14		C
15	ANISOU	2788	CD	GLU	D	343	9908	9165	4538	-141	-320	-2734	C
	ATOM	2789	OE1	GLU	D	343	53.678	-14.282	-38.648	1.00	66.06		O
	ANISOU	2789	OE1	GLU	D	343	10542	9875	4684	-85	-464	-2723	O
	ATOM	2790	OE2	GLU	D	343	55.074	-15.699	-37.694	1.00	62.92		O
	ANISOU	2790	OE2	GLU	D	343	10127	9092	4688	-95	-77	-2850	O
20	ATOM	2791	C	GLU	D	343	52.733	-11.701	-34.073	1.00	47.50		C
	ANISOU	2791	C	GLU	D	343	7105	7439	3503	-187	-523	-1896	C
	ATOM	2792	O	GLU	D	343	51.494	-11.696	-34.101	1.00	48.59		O
	ANISOU	2792	O	GLU	D	343	7137	7683	3642	-274	-791	-1960	O
	ATOM	2793	N	VAL	D	344	53.461	-10.674	-33.637	1.00	44.51		N
25	ANISOU	2793	N	VAL	D	344	6664	7057	3190	-77	-355	-1653	N
	ATOM	2794	CA	VAL	D	344	52.851	-9.406	-33.207	1.00	42.32		C
	ANISOU	2794	CA	VAL	D	344	6222	6892	2967	-33	-471	-1441	C
	ATOM	2795	CB	VAL	D	344	53.315	-8.974	-31.787	1.00	38.72		C
	ANISOU	2795	CB	VAL	D	344	5564	6310	2839	-38	-329	-1273	C
30	ATOM	2796	CG1	VAL	D	344	52.789	-9.950	-30.744	1.00	37.84		C
	ANISOU	2796	CG1	VAL	D	344	5295	6085	2998	-187	-384	-1388	C
	ATOM	2797	CG2	VAL	D	344	54.852	-8.867	-31.698	1.00	37.43		C
	ANISOU	2797	CG2	VAL	D	344	5480	6029	2712	42	-33	-1181	C
	ATOM	2798	C	VAL	D	344	53.142	-8.313	-34.227	1.00	43.10		C
35	ANISOU	2798	C	VAL	D	344	6482	7128	2765	114	-449	-1292	C
	ATOM	2799	O	VAL	D	344	54.177	-8.360	-34.880	1.00	43.50		O
	ANISOU	2799	O	VAL	D	344	6721	7153	2653	187	-238	-1280	O
	ATOM	2800	N	LEU	D	345	52.223	-7.349	-34.352	1.00	43.51		N
	ANISOU	2800	N	LEU	D	345	6459	7320	2751	163	-657	-1172	N
40	ATOM	2801	CA	LEU	D	345	52.330	-6.227	-35.300	1.00	45.05		C
	ANISOU	2801	CA	LEU	D	345	6817	7642	2659	308	-675	-998	C
	ATOM	2802	CB	LEU	D	345	51.020	-6.033	-36.060	1.00	47.61		C
	ANISOU	2802	CB	LEU	D	345	7160	8159	2770	333	-1020	-1052	C
	ATOM	2803	CG	LEU	D	345	50.743	-6.475	-37.488	1.00	51.69		C
45	ANISOU	2803	CG	LEU	D	345	7938	8822	2881	358	-1172	-1200	C
	ATOM	2804	CD1	LEU	D	345	49.400	-5.893	-37.870	1.00	52.98		C
	ANISOU	2804	CD1	LEU	D	345	8021	9173	2935	408	-1542	-1167	C
	ATOM	2805	CD2	LEU	D	345	51.809	-6.018	-38.456	1.00	52.76		C
	ANISOU	2805	CD2	LEU	D	345	8377	8975	2694	479	-945	-1081	C
50	ATOM	2806	C	LEU	D	345	52.638	-4.914	-34.591	1.00	43.02		C
	ANISOU	2806	C	LEU	D	345	6443	7334	2567	390	-577	-726	C
	ATOM	2807	O	LEU	D	345	51.867	-4.483	-33.736	1.00	41.31		O
	ANISOU	2807	O	LEU	D	345	6010	7119	2567	375	-711	-671	O
	ATOM	2808	N	THR	D	346	53.739	-4.270	-34.977	1.00	43.51		N
55	ANISOU	2808	N	THR	D	346	6654	7353	2525	471	-339	-564	N
	ATOM	2809	CA	THR	D	346	54.144	-3.000	-34.387	1.00	42.63		C
	ANISOU	2809	CA	THR	D	346	6463	7169	2566	535	-233	-311	C
	ATOM	2810	CB	THR	D	346	55.658	-2.699	-34.549	1.00	42.01		C
	ANISOU	2810	CB	THR	D	346	6490	6988	2482	557	105	-189	C
60	ATOM	2811	OG1	THR	D	346	55.892	-2.121	-35.833	1.00	44.89		O
	ANISOU	2811	OG1	THR	D	346	7110	7447	2499	650	159	-72	O
	ATOM	2812	CG2	THR	D	346	56.495	-3.942	-34.379	1.00	40.99		C
	ANISOU	2812	CG2	THR	D	346	6357	6779	2440	484	289	-371	C
	ATOM	2813	C	THR	D	346	53.350	-1.816	-34.938	1.00	44.91		C

# ES 2 454 773 T3

		ANISOU	2813	C	THR	D	346	6813	7567	2686	654	-424	-137	C
		ATOM	2814	O	THR	D	346	52.564	-1.953	-35.884	1.00	47.19		O
		ANISOU	2814	O	THR	D	346	7219	8008	2701	699	-638	-198	O
		ATOM	2815	N	GLY	D	347	53.580	-0.657	-34.312	1.00	44.77		N
5		ANISOU	2815	N	GLY	D	347	6714	7455	2839	706	-353	76	N
		ATOM	2816	CA	GLY	D	347	52.914	0.595	-34.643	1.00	47.06		C
		ANISOU	2816	CA	GLY	D	347	7049	7795	3037	837	-509	273	C
		ATOM	2817	C	GLY	D	347	53.311	1.122	-35.999	1.00	50.85		C
		ANISOU	2817	C	GLY	D	347	7832	8341	3149	933	-452	421	C
10		ATOM	2818	O	GLY	D	347	52.763	2.128	-36.458	1.00	53.05		O
		ANISOU	2818	O	GLY	D	347	8198	8660	3297	1060	-596	601	O
		ATOM	2819	N	ASN	D	348	54.272	0.453	-36.638	1.00	51.99		N
		ANISOU	2819	N	ASN	D	348	8144	8489	3120	885	-232	354	N
		ATOM	2820	CA	ASN	D	348	54.607	0.740	-38.029	1.00	55.74		C
15		ANISOU	2820	CA	ASN	D	348	8937	9058	3184	967	-164	458	C
		ATOM	2821	CB	ASN	D	348	56.043	1.273	-38.165	1.00	56.17		C
		ANISOU	2821	CB	ASN	D	348	9099	8991	3252	953	220	639	C
		ATOM	2822	CG	ASN	D	348	56.246	2.063	-39.453	1.00	61.46		C
		ANISOU	2822	CG	ASN	D	348	10094	9733	3527	1057	289	857	C
20		ATOM	2823	OD1	ASN	D	348	55.428	2.921	-39.808	1.00	64.89		O
		ANISOU	2823	OD1	ASN	D	348	10617	10214	3824	1167	67	1018	O
		ATOM	2824	ND2	ASN	D	348	57.326	1.760	-40.175	1.00	64.62		N
		ANISOU	2824	ND2	ASN	D	348	10677	10143	3734	1033	603	867	N
		ATOM	2825	C	ASN	D	348	54.350	-0.455	-38.966	1.00	57.47		C
25		ANISOU	2825	C	ASN	D	348	9315	9429	3090	945	-253	215	C
		ATOM	2826	O	ASN	D	348	54.970	-0.582	-40.028	1.00	59.79		O
		ANISOU	2826	O	ASN	D	348	9882	9784	3050	980	-93	233	O
		ATOM	2827	N	LEU	D	349	53.412	-1.315	-38.557	1.00	56.20		N
		ANISOU	2827	N	LEU	D	349	8987	9325	3042	880	-504	-17	N
30		ATOM	2828	CA	LEU	D	349	52.992	-2.499	-39.333	1.00	57.58		C
		ANISOU	2828	CA	LEU	D	349	9285	9625	2966	836	-647	-288	C
		ATOM	2829	CB	LEU	D	349	52.211	-2.097	-40.591	1.00	61.54		C
		ANISOU	2829	CB	LEU	D	349	10023	10324	3035	950	-912	-241	C
		ATOM	2830	CG	LEU	D	349	50.920	-1.293	-40.393	1.00	62.61		C
35		ANISOU	2830	CG	LEU	D	349	10006	10547	3235	1033	-1273	-131	C
		ATOM	2831	CD1	LEU	D	349	50.097	-1.301	-41.692	1.00	66.68		C
		ANISOU	2831	CD1	LEU	D	349	10749	11283	3304	1126	-1593	-171	C
		ATOM	2832	CD2	LEU	D	349	50.089	-1.802	-39.206	1.00	59.33		C
		ANISOU	2832	CD2	LEU	D	349	9218	10095	3228	926	-1441	-291	C
40		ATOM	2833	C	LEU	D	349	54.118	-3.484	-39.668	1.00	56.92		C
		ANISOU	2833	C	LEU	D	349	9346	9481	2800	775	-347	-445	C
		ATOM	2834	O	LEU	D	349	54.078	-4.191	-40.669	1.00	59.54		O
		ANISOU	2834	O	LEU	D	349	9905	9914	2802	781	-383	-615	O
		ATOM	2835	N	GLN	D	350	55.114	-3.533	-38.799	1.00	53.58		N
45		ANISOU	2835	N	GLN	D	350	8781	8890	2685	724	-60	-398	N
		ATOM	2836	CA	GLN	D	350	56.191	-4.499	-38.940	1.00	52.62		C
		ANISOU	2836	CA	GLN	D	350	8734	8692	2566	681	227	-551	C
		ATOM	2837	CB	GLN	D	350	57.506	-3.890	-38.472	1.00	51.26		C
		ANISOU	2837	CB	GLN	D	350	8493	8390	2594	694	581	-356	C
50		ATOM	2838	CG	GLN	D	350	58.701	-4.803	-38.614	1.00	50.19		C
		ANISOU	2838	CG	GLN	D	350	8402	8179	2489	677	898	-492	C
		ATOM	2839	CD	GLN	D	350	59.992	-4.205	-38.068	1.00	48.94		C
		ANISOU	2839	CD	GLN	D	350	8115	7899	2580	676	1225	-304	C
		ATOM	2840	OE1	GLN	D	350	60.012	-3.105	-37.519	1.00	43.94		O
55		ANISOU	2840	OE1	GLN	D	350	7366	7218	2111	672	1213	-78	O
		ATOM	2841	NE2	GLN	D	350	61.086	-4.936	-38.238	1.00	49.94		N
		ANISOU	2841	NE2	GLN	D	350	8258	7972	2745	684	1516	-409	N
		ATOM	2842	C	GLN	D	350	55.865	-5.750	-38.123	1.00	50.95		C
		ANISOU	2842	C	GLN	D	350	8341	8395	2625	565	135	-811	C
60		ATOM	2843	O	GLN	D	350	55.432	-5.662	-36.975	1.00	47.85		O
		ANISOU	2843	O	GLN	D	350	7690	7924	2565	503	31	-786	O
		ATOM	2844	N	THR	D	351	56.049	-6.915	-38.728	1.00	52.61		N
		ANISOU	2844	N	THR	D	351	8702	8610	2676	537	178	-1062	N
		ATOM	2845	CA	THR	D	351	55.779	-8.175	-38.044	1.00	51.53		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2845	CA	THR	D	351	8435	8362	2782	422	105	-1310	C
	ATOM	2846	CB	THR	D	351	55.468	-9.299	-39.050	1.00	54.66		C
	ANISOU	2846	CB	THR	D	351	9064	8813	2891	395	11	-1608	C
	ATOM	2847	OG1	THR	D	351	54.324	-8.936	-39.833	1.00	58.05		O
5	ANISOU	2847	OG1	THR	D	351	9596	9433	3026	407	-315	-1629	O
	ATOM	2848	CG2	THR	D	351	55.210	-10.608	-38.356	1.00	53.78		C
	ANISOU	2848	CG2	THR	D	351	8837	8552	3047	266	-52	-1856	C
	ATOM	2849	C	THR	D	351	56.988	-8.559	-37.210	1.00	49.24		C
	ANISOU	2849	C	THR	D	351	8023	7884	2800	411	412	-1292	C
10	ATOM	2850	O	THR	D	351	58.117	-8.534	-37.699	1.00	50.66		O
	ANISOU	2850	O	THR	D	351	8325	8042	2884	486	705	-1256	O
	ATOM	2851	N	LEU	D	352	56.742	-8.897	-35.949	1.00	46.43		N
	ANISOU	2851	N	LEU	D	352	7422	7404	2813	322	345	-1309	N
	ATOM	2852	CA	LEU	D	352	57.770	-9.440	-35.074	1.00	44.39		C
15	ANISOU	2852	CA	LEU	D	352	7042	6963	2860	309	574	-1318	C
	ATOM	2853	CB	LEU	D	352	58.010	-8.535	-33.873	1.00	41.23		C
	ANISOU	2853	CB	LEU	D	352	6404	6502	2761	301	608	-1090	C
	ATOM	2854	CG	LEU	D	352	58.524	-7.106	-34.038	1.00	41.08		C
	ANISOU	2854	CG	LEU	D	352	6381	6541	2689	379	724	-827	C
20	ATOM	2855	CD1	LEU	D	352	58.549	-6.426	-32.663	1.00	36.89		C
	ANISOU	2855	CD1	LEU	D	352	5605	5920	2491	342	695	-670	C
	ATOM	2856	CD2	LEU	D	352	59.892	-7.044	-34.742	1.00	42.81		C
	ANISOU	2856	CD2	LEU	D	352	6718	6745	2804	456	1049	-782	C
	ATOM	2857	C	LEU	D	352	57.361	-10.814	-34.566	1.00	44.29		C
25	ANISOU	2857	C	LEU	D	352	6985	6825	3018	206	476	-1554	C
	ATOM	2858	O	LEU	D	352	56.238	-11.002	-34.099	1.00	43.77		O
	ANISOU	2858	O	LEU	D	352	6813	6774	3042	103	230	-1608	O
	ATOM	2859	N	LYS	D	353	58.278	-11.768	-34.669	1.00	44.79		N
	ANISOU	2859	N	LYS	D	353	7127	6756	3136	236	681	-1689	N
30	ATOM	2860	CA	LYS	D	353	58.073	-13.104	-34.159	1.00	45.15		C
	ANISOU	2860	CA	LYS	D	353	7153	6632	3369	151	628	-1896	C
	ATOM	2861	CB	LYS	D	353	58.797	-14.122	-35.043	1.00	47.86		C
	ANISOU	2861	CB	LYS	D	353	7721	6897	3567	219	805	-2118	C
	ATOM	2862	CG	LYS	D	353	58.258	-15.538	-34.984	1.00	49.96		C
35	ANISOU	2862	CG	LYS	D	353	8068	7007	3906	117	685	-2393	C
	ATOM	2863	CD	LYS	D	353	59.022	-16.428	-35.977	1.00	54.00		C
	ANISOU	2863	CD	LYS	D	353	8834	7446	4239	215	880	-2623	C
	ATOM	2864	CE	LYS	D	353	58.155	-17.546	-36.539	1.00	59.44		C
	ANISOU	2864	CE	LYS	D	353	9711	8070	4806	104	687	-2938	C
40	ATOM	2865	NZ	LYS	D	353	58.831	-18.247	-37.687	1.00	64.80		N
	ANISOU	2865	NZ	LYS	D	353	10681	8712	5227	217	872	-3177	N
	ATOM	2866	C	LYS	D	353	58.643	-13.117	-32.754	1.00	42.12		C
	ANISOU	2866	C	LYS	D	353	6545	6092	3366	139	721	-1761	C
	ATOM	2867	O	LYS	D	353	59.852	-13.025	-32.567	1.00	41.20		O
45	ANISOU	2867	O	LYS	D	353	6392	5905	3356	236	956	-1680	O
	ATOM	2868	N	ILE	D	354	57.766	-13.202	-31.758	1.00	40.54		N
	ANISOU	2868	N	ILE	D	354	6187	5851	3365	21	534	-1732	N
	ATOM	2869	CA	ILE	D	354	58.192	-13.268	-30.366	1.00	38.30		C
	ANISOU	2869	CA	ILE	D	354	5716	5424	3411	2	591	-1611	C
50	ATOM	2870	CB	ILE	D	354	57.745	-12.007	-29.553	1.00	36.18		C
	ANISOU	2870	CB	ILE	D	354	5261	5254	3233	-19	498	-1388	C
	ATOM	2871	CG1	ILE	D	354	56.211	-11.875	-29.518	1.00	36.29		C
	ANISOU	2871	CG1	ILE	D	354	5222	5374	3193	-132	243	-1432	C
	ATOM	2872	CD1	ILE	D	354	55.700	-10.892	-28.478	1.00	34.52		C
55	ANISOU	2872	CD1	ILE	D	354	4800	5199	3117	-155	163	-1250	C
	ATOM	2873	CG2	ILE	D	354	58.399	-10.725	-30.109	1.00	35.98		C
	ANISOU	2873	CG2	ILE	D	354	5252	5350	3070	93	613	-1218	C
	ATOM	2874	C	ILE	D	354	57.669	-14.549	-29.696	1.00	38.61		C
	ANISOU	2874	C	ILE	D	354	5744	5289	3636	-119	500	-1757	C
60	ATOM	2875	O	ILE	D	354	56.645	-15.128	-30.109	1.00	40.64		O
	ANISOU	2875	O	ILE	D	354	6070	5566	3808	-231	333	-1922	O
	ATOM	2876	N	ARG	D	355	58.383	-15.004	-28.679	1.00	36.91		N
	ANISOU	2876	N	ARG	D	355	5447	4900	3678	-99	603	-1695	N
	ATOM	2877	CA	ARG	D	355	57.871	-16.064	-27.832	1.00	37.02		C



ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2877	CA	ARG	D	355	5439	4735	3891	-219	522	-1768	C
	ATOM	2878	CB	ARG	D	355	58.994	-16.964	-27.340	1.00	37.88		C
	ANISOU	2878	CB	ARG	D	355	5582	4617	4194	-134	680	-1782	C
	ATOM	2879	CG	ARG	D	355	59.574	-17.833	-28.449	1.00	45.02		C
5	ANISOU	2879	CG	ARG	D	355	6685	5434	4986	-48	798	-1993	C
	ATOM	2880	CD	ARG	D	355	60.668	-18.706	-27.904	1.00	52.28		C
	ANISOU	2880	CD	ARG	D	355	7615	6120	6130	61	947	-1997	C
	ATOM	2881	NE	ARG	D	355	61.771	-18.840	-28.849	1.00	59.10		N
	ANISOU	2881	NE	ARG	D	355	8572	6983	6901	238	1156	-2087	N
10	ATOM	2882	CZ	ARG	D	355	62.978	-19.295	-28.524	1.00	61.64		C
	ANISOU	2882	CZ	ARG	D	355	8855	7157	7409	394	1324	-2061	C
	ATOM	2883	NH1	ARG	D	355	63.241	-19.653	-27.265	1.00	59.91		N
	ANISOU	2883	NH1	ARG	D	355	8522	6776	7463	396	1281	-1939	N
	ATOM	2884	NH2	ARG	D	355	63.920	-19.396	-29.461	1.00	64.91		N
15	ANISOU	2884	NH2	ARG	D	355	9340	7592	7731	555	1536	-2157	N
	ATOM	2885	C	ARG	D	355	57.115	-15.449	-26.673	1.00	33.46		C
	ANISOU	2885	C	ARG	D	355	4803	4335	3576	-315	404	-1608	C
	ATOM	2886	O	ARG	D	355	57.717	-14.849	-25.782	1.00	30.78		O
	ANISOU	2886	O	ARG	D	355	4346	3982	3366	-256	470	-1430	O
20	ATOM	2887	N	VAL	D	356	55.792	-15.577	-26.725	1.00	33.25		N
	ANISOU	2887	N	VAL	D	356	4744	4375	3512	-463	229	-1682	N
	ATOM	2888	CA	VAL	D	356	54.908	-14.994	-25.724	1.00	31.29		C
	ANISOU	2888	CA	VAL	D	356	4314	4199	3375	-555	127	-1554	C
	ATOM	2889	CB	VAL	D	356	53.495	-14.774	-26.281	1.00	32.47		C
25	ANISOU	2889	CB	VAL	D	356	4410	4515	3413	-668	-69	-1643	C
	ATOM	2890	CG1	VAL	D	356	52.532	-14.347	-25.167	1.00	31.15		C
	ANISOU	2890	CG1	VAL	D	356	4036	4403	3395	-768	-146	-1532	C
	ATOM	2891	CG2	VAL	D	356	53.522	-13.735	-27.416	1.00	32.66		C
	ANISOU	2891	CG2	VAL	D	356	4479	4746	3184	-550	-115	-1624	C
30	ATOM	2892	C	VAL	D	356	54.883	-15.895	-24.485	1.00	30.33		C
	ANISOU	2892	C	VAL	D	356	4157	3876	3491	-651	160	-1525	C
	ATOM	2893	O	VAL	D	356	54.610	-17.084	-24.580	1.00	31.63		O
	ANISOU	2893	O	VAL	D	356	4413	3886	3719	-754	142	-1666	O
	ATOM	2894	N	HIS	D	357	55.229	-15.330	-23.330	1.00	27.89		N
35	ANISOU	2894	N	HIS	D	357	3738	3555	3304	-612	211	-1339	N
	ATOM	2895	CA	HIS	D	357	55.108	-16.067	-22.055	1.00	27.09		C
	ANISOU	2895	CA	HIS	D	357	3613	3286	3396	-703	233	-1277	C
	ATOM	2896	CB	HIS	D	357	56.157	-15.624	-21.051	1.00	24.13		C
	ANISOU	2896	CB	HIS	D	357	3198	2855	3116	-585	320	-1100	C
40	ATOM	2897	CG	HIS	D	357	57.530	-16.091	-21.397	1.00	23.18		C
	ANISOU	2897	CG	HIS	D	357	3173	2605	3030	-441	426	-1120	C
	ATOM	2898	ND1	HIS	D	357	58.182	-17.076	-20.684	1.00	23.15		N
	ANISOU	2898	ND1	HIS	D	357	3234	2380	3180	-414	478	-1092	N
	ATOM	2899	CE1	HIS	D	357	59.360	-17.313	-21.233	1.00	21.17		C
45	ANISOU	2899	CE1	HIS	D	357	3036	2061	2946	-261	573	-1129	C
	ATOM	2900	NE2	HIS	D	357	59.496	-16.511	-22.275	1.00	25.10		N
	ANISOU	2900	NE2	HIS	D	357	3515	2730	3291	-203	603	-1175	N
	ATOM	2901	CD2	HIS	D	357	58.363	-15.742	-22.405	1.00	21.56		C
	ANISOU	2901	CD2	HIS	D	357	3005	2457	2728	-310	501	-1165	C
50	ATOM	2902	C	HIS	D	357	53.706	-15.975	-21.470	1.00	27.09		C
	ANISOU	2902	C	HIS	D	357	3488	3362	3441	-872	137	-1264	C
	ATOM	2903	O	HIS	D	357	53.151	-14.887	-21.336	1.00	26.76		O
	ANISOU	2903	O	HIS	D	357	3314	3507	3346	-858	85	-1189	O
	ATOM	2904	N	GLU	D	358	53.130	-17.135	-21.179	1.00	28.20		N
55	ANISOU	2904	N	GLU	D	358	3673	3353	3691	-1033	123	-1343	N
	ATOM	2905	CA	GLU	D	358	51.766	-17.230	-20.704	1.00	28.28		C
	ANISOU	2905	CA	GLU	D	358	3553	3425	3768	-1223	54	-1351	C
	ATOM	2906	CB	GLU	D	358	50.984	-18.208	-21.581	1.00	31.17		C
	ANISOU	2906	CB	GLU	D	358	3968	3736	4138	-1389	-39	-1564	C
60	ATOM	2907	CG	GLU	D	358	50.973	-17.773	-23.047	1.00	32.95		C
	ANISOU	2907	CG	GLU	D	358	4233	4120	4167	-1309	-143	-1709	C
	ATOM	2908	CD	GLU	D	358	50.303	-18.740	-23.964	1.00	39.33		C
	ANISOU	2908	CD	GLU	D	358	5118	4872	4954	-1465	-257	-1944	C
	ATOM	2909	OE1	GLU	D	358	50.379	-19.974	-23.732	1.00	41.30		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2909	OE1	GLU	D	358	5483	4874	5336	-1583	-213	-2029	O
	ATOM	2910	OE2	GLU	D	358	49.688	-18.254	-24.939	1.00	42.18		O
	ANISOU	2910	OE2	GLU	D	358	5432	5432	5161	-1467	-405	-2049	O
	ATOM	2911	C	GLU	D	358	51.790	-17.669	-19.252	1.00	27.36		C
5	ANISOU	2911	C	GLU	D	358	3429	3163	3804	-1292	145	-1208	C
	ATOM	2912	O	GLU	D	358	52.383	-18.677	-18.925	1.00	29.08		O
	ANISOU	2912	O	GLU	D	358	3791	3148	4112	-1304	210	-1203	O
	ATOM	2913	N	GLY	D	359	51.167	-16.892	-18.380	1.00	25.52		N
10	ANISOU	2913	N	GLY	D	359	3044	3064	3587	-1322	155	-1086	N
	ATOM	2914	CA	GLY	D	359	51.052	-17.255	-16.979	1.00	24.48		C
	ANISOU	2914	CA	GLY	D	359	2916	2823	3560	-1399	247	-946	C
	ATOM	2915	C	GLY	D	359	51.467	-16.139	-16.057	1.00	22.50		C
	ANISOU	2915	C	GLY	D	359	2608	2681	3262	-1265	290	-781	C
	ATOM	2916	O	GLY	D	359	52.317	-15.309	-16.401	1.00	21.03		O
15	ANISOU	2916	O	GLY	D	359	2431	2564	2997	-1090	271	-754	O
	ATOM	2917	N	TYR	D	360	50.879	-16.137	-14.865	1.00	22.56		N
	ANISOU	2917	N	TYR	D	360	2564	2692	3315	-1355	359	-674	N
	ATOM	2918	CA	TYR	D	360	51.277	-15.220	-13.807	1.00	20.82		C
	ANISOU	2918	CA	TYR	D	360	2328	2542	3042	-1243	405	-527	C
20	ATOM	2919	CB	TYR	D	360	50.251	-15.243	-12.659	1.00	21.78		C
	ANISOU	2919	CB	TYR	D	360	2374	2709	3191	-1377	496	-447	C
	ATOM	2920	CG	TYR	D	360	50.774	-14.552	-11.417	1.00	21.58		C
	ANISOU	2920	CG	TYR	D	360	2399	2706	3092	-1269	551	-301	C
	ATOM	2921	CD1	TYR	D	360	50.769	-13.146	-11.321	1.00	18.96		C
25	ANISOU	2921	CD1	TYR	D	360	1967	2554	2682	-1140	525	-292	C
	ATOM	2922	CE1	TYR	D	360	51.265	-12.515	-10.199	1.00	20.05		C
	ANISOU	2922	CE1	TYR	D	360	2168	2704	2746	-1049	560	-185	C
	ATOM	2923	CZ	TYR	D	360	51.801	-13.280	-9.164	1.00	20.65		C
	ANISOU	2923	CZ	TYR	D	360	2411	2630	2805	-1074	608	-71	C
30	ATOM	2924	OH	TYR	D	360	52.295	-12.687	-8.034	1.00	19.63		O
	ANISOU	2924	OH	TYR	D	360	2362	2519	2577	-986	619	26	O
	ATOM	2925	CE2	TYR	D	360	51.829	-14.661	-9.238	1.00	22.70		C
	ANISOU	2925	CE2	TYR	D	360	2775	2709	3141	-1186	635	-54	C
	ATOM	2926	CD2	TYR	D	360	51.320	-15.292	-10.365	1.00	21.83		C
35	ANISOU	2926	CD2	TYR	D	360	2601	2570	3125	-1287	613	-175	C
	ATOM	2927	C	TYR	D	360	52.662	-15.527	-13.249	1.00	19.75		C
	ANISOU	2927	C	TYR	D	360	2358	2241	2906	-1119	426	-426	C
	ATOM	2928	O	TYR	D	360	52.983	-16.691	-12.914	1.00	20.71		O
	ANISOU	2928	O	TYR	D	360	2617	2153	3097	-1174	460	-393	O
40	ATOM	2929	N	GLU	D	361	53.461	-14.477	-13.117	1.00	17.95		N
	ANISOU	2929	N	GLU	D	361	2109	2098	2614	-955	398	-371	N
	ATOM	2930	CA	GLU	D	361	54.818	-14.564	-12.568	1.00	18.25		C
	ANISOU	2930	CA	GLU	D	361	2255	2018	2660	-823	391	-276	C
	ATOM	2931	CB	GLU	D	361	55.857	-14.727	-13.665	1.00	17.09		C
45	ANISOU	2931	CB	GLU	D	361	2139	1814	2541	-707	361	-349	C
	ATOM	2932	CG	GLU	D	361	55.906	-16.074	-14.343	1.00	20.73		C
	ANISOU	2932	CG	GLU	D	361	2703	2101	3074	-760	379	-440	C
	ATOM	2933	CD	GLU	D	361	56.874	-16.096	-15.496	1.00	21.89		C
	ANISOU	2933	CD	GLU	D	361	2870	2225	3221	-630	377	-530	C
50	ATOM	2934	OE1	GLU	D	361	56.789	-15.177	-16.334	1.00	21.96		O
	ANISOU	2934	OE1	GLU	D	361	2796	2400	3148	-588	360	-586	O
	ATOM	2935	OE2	GLU	D	361	57.713	-17.035	-15.572	1.00	26.64		O
	ANISOU	2935	OE2	GLU	D	361	3576	2639	3905	-563	403	-540	O
	ATOM	2936	C	GLU	D	361	55.166	-13.305	-11.787	1.00	17.71		C
55	ANISOU	2936	C	GLU	D	361	2137	2068	2522	-724	371	-189	C
	ATOM	2937	O	GLU	D	361	54.783	-12.180	-12.189	1.00	17.20		O
	ANISOU	2937	O	GLU	D	361	1959	2166	2408	-690	352	-229	O
	ATOM	2938	N	GLU	D	362	55.904	-13.489	-10.694	1.00	18.09		N
	ANISOU	2938	N	GLU	D	362	2281	2027	2567	-671	363	-75	N
60	ATOM	2939	CA	GLU	D	362	56.464	-12.367	-9.950	1.00	19.15		C
	ANISOU	2939	CA	GLU	D	362	2393	2245	2638	-572	319	-10	C
	ATOM	2940	CB	GLU	D	362	55.949	-12.359	-8.507	1.00	19.27		C
	ANISOU	2940	CB	GLU	D	362	2482	2271	2569	-627	354	85	C
	ATOM	2941	CG	GLU	D	362	56.310	-11.107	-7.717	1.00	21.42		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2941	CG	GLU	D	362	2741	2644	2753	-541	306	118	C
	ATOM	2942	CD	GLU	D	362	55.912	-11.248	-6.250	1.00	24.81		C
	ANISOU	2942	CD	GLU	D	362	3289	3073	3065	-584	348	211	C
	ATOM	2943	OE1	GLU	D	362	54.919	-10.639	-5.837	1.00	34.00		O
5	ANISOU	2943	OE1	GLU	D	362	4411	4356	4153	-632	428	187	O
	ATOM	2944	OE2	GLU	D	362	56.557	-12.014	-5.516	1.00	32.91		O
	ANISOU	2944	OE2	GLU	D	362	4457	3979	4069	-565	309	311	O
	ATOM	2945	C	GLU	D	362	57.976	-12.433	-9.968	1.00	17.74		C
	ANISOU	2945	C	GLU	D	362	2250	1975	2515	-438	247	30	C
10	ATOM	2946	O	GLU	D	362	58.543	-13.501	-9.839	1.00	19.01		O
	ANISOU	2946	O	GLU	D	362	2502	1982	2740	-416	238	69	O
	ATOM	2947	N	PHE	D	363	58.617	-11.277	-10.154	1.00	17.84		N
	ANISOU	2947	N	PHE	D	363	2179	2078	2521	-348	198	20	N
	ATOM	2948	CA	PHE	D	363	60.073	-11.175	-10.225	1.00	17.84		C
15	ANISOU	2948	CA	PHE	D	363	2159	2019	2600	-229	133	50	C
	ATOM	2949	CB	PHE	D	363	60.525	-10.817	-11.655	1.00	17.34		C
	ANISOU	2949	CB	PHE	D	363	1999	1994	2594	-179	169	-29	C
	ATOM	2950	CG	PHE	D	363	60.204	-11.851	-12.684	1.00	18.26		C
	ANISOU	2950	CG	PHE	D	363	2152	2047	2738	-208	236	-108	C
20	ATOM	2951	CD1	PHE	D	363	61.094	-12.897	-12.951	1.00	19.62		C
	ANISOU	2951	CD1	PHE	D	363	2369	2076	3010	-138	249	-114	C
	ATOM	2952	CE1	PHE	D	363	60.784	-13.856	-13.898	1.00	20.76		C
	ANISOU	2952	CE1	PHE	D	363	2571	2145	3172	-165	312	-211	C
	ATOM	2953	CZ	PHE	D	363	59.597	-13.776	-14.610	1.00	18.79		C
25	ANISOU	2953	CZ	PHE	D	363	2323	1978	2839	-274	341	-302	C
	ATOM	2954	CE2	PHE	D	363	58.711	-12.738	-14.363	1.00	20.21		C
	ANISOU	2954	CE2	PHE	D	363	2433	2315	2932	-338	317	-284	C
	ATOM	2955	CD2	PHE	D	363	59.020	-11.769	-13.412	1.00	17.87		C
	ANISOU	2955	CD2	PHE	D	363	2089	2080	2620	-298	276	-189	C
30	ATOM	2956	C	PHE	D	363	60.584	-10.065	-9.329	1.00	17.94		C
	ANISOU	2956	C	PHE	D	363	2144	2096	2575	-182	50	99	C
	ATOM	2957	O	PHE	D	363	59.915	-9.014	-9.174	1.00	17.61		O
	ANISOU	2957	O	PHE	D	363	2069	2165	2459	-214	62	73	O
	ATOM	2958	N	THR	D	364	61.774	-10.269	-8.775	1.00	17.84		N
35	ANISOU	2958	N	THR	D	364	2142	2012	2625	-100	-43	160	N
	ATOM	2959	CA	THR	D	364	62.589	-9.144	-8.386	1.00	18.22		C
	ANISOU	2959	CA	THR	D	364	2116	2116	2692	-50	-138	169	C
	ATOM	2960	CB	THR	D	364	63.421	-9.390	-7.113	1.00	18.94		C
	ANISOU	2960	CB	THR	D	364	2269	2152	2775	5	-284	251	C
40	ATOM	2961	OG1	THR	D	364	64.333	-10.460	-7.344	1.00	22.11		O
	ANISOU	2961	OG1	THR	D	364	2655	2441	3304	89	-317	293	O
	ATOM	2962	CG2	THR	D	364	62.554	-9.703	-5.942	1.00	18.12		C
	ANISOU	2962	CG2	THR	D	364	2332	2049	2504	-49	-289	306	C
	ATOM	2963	C	THR	D	364	63.528	-8.805	-9.555	1.00	18.43		C
45	ANISOU	2963	C	THR	D	364	1999	2147	2858	8	-112	128	C
	ATOM	2964	O	THR	D	364	63.977	-9.703	-10.275	1.00	19.45		O
	ANISOU	2964	O	THR	D	364	2108	2205	3076	54	-61	116	O
	ATOM	2965	N	MSE	D	365	63.759	-7.504	-9.770	1.00	17.63		N
	ANISOU	2965	N	MSE	D	365	1808	2119	2769	0	-126	104	N
50	ATOM	2966	CA	MSE	D	365	64.730	-7.023	-10.747	1.00	18.41		C
	ANISOU	2966	CA	MSE	D	365	1769	2226	2998	40	-88	87	C
	ATOM	2967	CB	MSE	D	365	64.077	-6.068	-11.759	1.00	17.25		C
	ANISOU	2967	CB	MSE	D	365	1596	2157	2801	0	10	46	C
	ATOM	2968	CG	MSE	D	365	62.868	-6.645	-12.487	1.00	16.17		C
55	ANISOU	2968	CG	MSE	D	365	1532	2052	2561	-32	102	1	C
	ATOM	2969	SE	MSE	D	365	61.845	-5.313	-13.450	0.90	20.72		SE
	ANISOU	2969	SE	MSE	D	365	2093	2738	3041	-63	163	-30	SE
	ATOM	2970	CE	MSE	D	365	63.243	-4.311	-14.263	1.00	11.76		C
	ANISOU	2970	CE	MSE	D	365	852	1592	2023	-26	207	8	C
60	ATOM	2971	C	MSE	D	365	65.810	-6.262	-9.991	1.00	17.87		C
	ANISOU	2971	C	MSE	D	365	1615	2153	3021	59	-218	116	C
	ATOM	2972	O	MSE	D	365	65.495	-5.340	-9.241	1.00	17.57		O
	ANISOU	2972	O	MSE	D	365	1614	2147	2913	15	-292	109	O
	ATOM	2973	N	VAL	D	366	67.068	-6.639	-10.196	1.00	18.01		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	2973	N	VAL	D	366	1510	2130	3203	125	-245	137	N
	ATOM	2974	CA	VAL	D	366	68.202	-5.950	-9.570	1.00	18.86		C
	ANISOU	2974	CA	VAL	D	366	1492	2239	3436	133	-384	156	C
	ATOM	2975	CB	VAL	D	366	68.942	-6.864	-8.537	1.00	20.54		C
5	ANISOU	2975	CB	VAL	D	366	1707	2397	3701	214	-553	207	C
	ATOM	2976	CG1	VAL	D	366	70.186	-6.172	-7.928	1.00	20.97		C
	ANISOU	2976	CG1	VAL	D	366	1598	2466	3905	220	-731	215	C
	ATOM	2977	CG2	VAL	D	366	67.976	-7.296	-7.406	1.00	21.86		C
	ANISOU	2977	CG2	VAL	D	366	2095	2550	3660	195	-633	237	C
10	ATOM	2978	C	VAL	D	366	69.171	-5.358	-10.585	1.00	19.08		C
	ANISOU	2978	C	VAL	D	366	1324	2284	3643	133	-294	147	C
	ATOM	2979	O	VAL	D	366	69.843	-6.084	-11.309	1.00	19.34		O
	ANISOU	2979	O	VAL	D	366	1258	2296	3796	205	-204	151	O
	ATOM	2980	N	GLY	D	367	69.241	-4.027	-10.623	1.00	19.12		N
15	ANISOU	2980	N	GLY	D	367	1279	2316	3670	51	-305	134	N
	ATOM	2981	CA	GLY	D	367	70.244	-3.316	-11.436	1.00	20.13		C
	ANISOU	2981	CA	GLY	D	367	1215	2451	3984	23	-221	144	C
	ATOM	2982	C	GLY	D	367	71.337	-2.617	-10.640	1.00	21.77		C
	ANISOU	2982	C	GLY	D	367	1266	2642	4363	-22	-391	146	C
20	ATOM	2983	O	GLY	D	367	71.408	-2.757	-9.417	1.00	21.83		O
	ANISOU	2983	O	GLY	D	367	1322	2639	4334	-13	-599	136	O
	ATOM	2984	N	LYS	D	368	72.214	-1.887	-11.335	1.00	22.99		N
	ANISOU	2984	N	LYS	D	368	1233	2797	4706	-78	-304	160	N
	ATOM	2985	CA	LYS	D	368	73.258	-1.124	-10.655	1.00	25.77		C
25	ANISOU	2985	CA	LYS	D	368	1410	3130	5252	-153	-467	150	C
	ATOM	2986	CB	LYS	D	368	74.267	-0.536	-11.644	1.00	27.60		C
	ANISOU	2986	CB	LYS	D	368	1403	3363	5721	-218	-307	181	C
	ATOM	2987	CG	LYS	D	368	75.163	-1.558	-12.320	1.00	33.38		C
	ANISOU	2987	CG	LYS	D	368	1937	4132	6613	-110	-181	206	C
30	ATOM	2988	CD	LYS	D	368	76.116	-0.834	-13.239	1.00	40.97		C
	ANISOU	2988	CD	LYS	D	368	2663	5104	7802	-196	4	241	C
	ATOM	2989	CE	LYS	D	368	76.457	-1.646	-14.479	1.00	44.55		C
	ANISOU	2989	CE	LYS	D	368	3032	5601	8293	-92	283	264	C
	ATOM	2990	NZ	LYS	D	368	77.644	-1.037	-15.172	1.00	45.91		N
35	ANISOU	2990	NZ	LYS	D	368	2915	5795	8735	-172	454	304	N
	ATOM	2991	C	LYS	D	368	72.654	0.026	-9.845	1.00	24.40		C
	ANISOU	2991	C	LYS	D	368	1379	2920	4973	-257	-603	106	C
	ATOM	2992	O	LYS	D	368	73.146	0.344	-8.779	1.00	25.32		O
	ANISOU	2992	O	LYS	D	368	1457	3020	5142	-295	-829	68	O
40	ATOM	2993	N	ARG	D	369	71.581	0.624	-10.361	1.00	22.61		N
	ANISOU	2993	N	ARG	D	369	1320	2680	4592	-289	-471	106	N
	ATOM	2994	CA	ARG	D	369	71.084	1.898	-9.820	1.00	22.72		C
	ANISOU	2994	CA	ARG	D	369	1450	2637	4547	-381	-553	61	C
	ATOM	2995	CB	ARG	D	369	71.284	3.026	-10.839	1.00	23.23		C
45	ANISOU	2995	CB	ARG	D	369	1454	2643	4728	-474	-393	99	C
	ATOM	2996	CG	ARG	D	369	72.739	3.461	-11.079	1.00	25.22		C
	ANISOU	2996	CG	ARG	D	369	1448	2862	5272	-572	-395	123	C
	ATOM	2997	CD	ARG	D	369	72.724	4.978	-11.254	1.00	27.02		C
	ANISOU	2997	CD	ARG	D	369	1710	2974	5581	-711	-368	125	C
50	ATOM	2998	NE	ARG	D	369	73.878	5.516	-10.578	1.00	30.88		N
	ANISOU	2998	NE	ARG	D	369	2013	3410	6311	-834	-535	79	N
	ATOM	2999	CZ	ARG	D	369	73.901	6.588	-9.811	1.00	32.41		C
	ANISOU	2999	CZ	ARG	D	369	2268	3495	6550	-948	-695	3	C
	ATOM	3000	NH1	ARG	D	369	72.814	7.329	-9.581	1.00	27.48		N
55	ANISOU	3000	NH1	ARG	D	369	1898	2792	5751	-941	-698	-36	N
	ATOM	3001	NH2	ARG	D	369	75.066	6.923	-9.282	1.00	37.95		N
	ANISOU	3001	NH2	ARG	D	369	2761	4164	7495	-1068	-857	-43	N
	ATOM	3002	C	ARG	D	369	69.625	1.847	-9.399	1.00	21.13		C
	ANISOU	3002	C	ARG	D	369	1494	2450	4083	-335	-554	28	C
60	ATOM	3003	O	ARG	D	369	69.083	2.830	-8.934	1.00	21.50		O
	ANISOU	3003	O	ARG	D	369	1657	2450	4063	-381	-605	-21	O
	ATOM	3004	N	ALA	D	370	68.982	0.695	-9.556	1.00	20.31		N
	ANISOU	3004	N	ALA	D	370	1467	2407	3845	-245	-491	48	N
	ATOM	3005	CA	ALA	D	370	67.568	0.560	-9.210	1.00	19.37		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3005	CA	ALA	D	370	1545	2315	3499	-211	-469	22	C
	ATOM	3006	CB	ALA	D	370	66.677	1.149	-10.287	1.00	17.08		C
	ANISOU	3006	CB	ALA	D	370	1309	2033	3150	-214	-301	37	C
	ATOM	3007	C	ALA	D	370	67.248	-0.884	-9.014	1.00	19.29		C
5	ANISOU	3007	C	ALA	D	370	1584	2348	3395	-138	-463	43	C
	ATOM	3008	O	ALA	D	370	67.922	-1.742	-9.573	1.00	19.71		O
	ANISOU	3008	O	ALA	D	370	1534	2404	3548	-97	-417	79	O
	ATOM	3009	N	THR	D	371	66.236	-1.151	-8.200	1.00	19.16		N
	ANISOU	3009	N	THR	D	371	1728	2356	3196	-124	-499	19	N
10	ATOM	3010	CA	THR	D	371	65.719	-2.493	-8.036	1.00	20.02		C
	ANISOU	3010	CA	THR	D	371	1913	2488	3207	-77	-468	48	C
	ATOM	3011	CB	THR	D	371	66.139	-3.157	-6.702	1.00	20.97		C
	ANISOU	3011	CB	THR	D	371	2102	2591	3274	-49	-635	69	C
	ATOM	3012	OG1	THR	D	371	65.494	-2.487	-5.624	1.00	23.31		O
15	ANISOU	3012	OG1	THR	D	371	2538	2908	3410	-79	-706	26	O
	ATOM	3013	CG2	THR	D	371	67.641	-3.122	-6.488	1.00	21.86		C
	ANISOU	3013	CG2	THR	D	371	2068	2673	3565	-30	-782	86	C
	ATOM	3014	C	THR	D	371	64.184	-2.423	-8.121	1.00	19.54		C
	ANISOU	3014	C	THR	D	371	1975	2472	2979	-89	-363	23	C
20	ATOM	3015	O	THR	D	371	63.586	-1.359	-8.003	1.00	19.86		O
	ANISOU	3015	O	THR	D	371	2053	2526	2966	-111	-349	-18	O
	ATOM	3016	N	ALA	D	372	63.528	-3.552	-8.324	1.00	19.12		N
	ANISOU	3016	N	ALA	D	372	1973	2435	2858	-76	-288	43	N
	ATOM	3017	CA	ALA	D	372	62.076	-3.489	-8.455	1.00	17.32		C
25	ANISOU	3017	CA	ALA	D	372	1816	2263	2502	-99	-191	15	C
	ATOM	3018	CB	ALA	D	372	61.686	-3.097	-9.920	1.00	17.05		C
	ANISOU	3018	CB	ALA	D	372	1709	2262	2508	-97	-82	-3	C
	ATOM	3019	C	ALA	D	372	61.442	-4.786	-8.072	1.00	16.39		C
	ANISOU	3019	C	ALA	D	372	1780	2143	2304	-114	-155	40	C
30	ATOM	3020	O	ALA	D	372	62.117	-5.809	-7.986	1.00	17.78		O
	ANISOU	3020	O	ALA	D	372	1965	2259	2533	-92	-189	83	O
	ATOM	3021	N	ILE	D	373	60.138	-4.749	-7.838	1.00	16.26		N
	ANISOU	3021	N	ILE	D	373	1816	2184	2177	-149	-81	16	N
	ATOM	3022	CA	ILE	D	373	59.332	-5.958	-7.815	1.00	14.85		C
35	ANISOU	3022	CA	ILE	D	373	1687	2003	1950	-195	-6	35	C
	ATOM	3023	CB	ILE	D	373	58.647	-6.199	-6.451	1.00	17.21		C
	ANISOU	3023	CB	ILE	D	373	2106	2321	2113	-231	8	63	C
	ATOM	3024	CG1	ILE	D	373	59.646	-6.124	-5.278	1.00	14.71		C
	ANISOU	3024	CG1	ILE	D	373	1885	1957	1748	-191	-121	110	C
40	ATOM	3025	CD1	ILE	D	373	58.992	-6.294	-3.900	1.00	16.18		C
	ANISOU	3025	CD1	ILE	D	373	2225	2170	1751	-219	-97	142	C
	ATOM	3026	CG2	ILE	D	373	57.892	-7.565	-6.465	1.00	14.20		C
	ANISOU	3026	CG2	ILE	D	373	1774	1909	1713	-304	99	100	C
	ATOM	3027	C	ILE	D	373	58.275	-5.853	-8.918	1.00	15.49		C
45	ANISOU	3027	C	ILE	D	373	1695	2153	2037	-225	90	-18	C
	ATOM	3028	O	ILE	D	373	57.564	-4.846	-9.013	1.00	14.66		O
	ANISOU	3028	O	ILE	D	373	1549	2123	1896	-214	114	-57	O
	ATOM	3029	N	LEU	D	374	58.168	-6.910	-9.725	1.00	15.28		N
	ANISOU	3029	N	LEU	D	374	1656	2094	2054	-255	132	-25	N
50	ATOM	3030	CA	LEU	D	374	57.294	-6.952	-10.890	1.00	14.84		C
	ANISOU	3030	CA	LEU	D	374	1534	2103	2000	-285	188	-85	C
	ATOM	3031	CB	LEU	D	374	58.116	-7.089	-12.188	1.00	13.81		C
	ANISOU	3031	CB	LEU	D	374	1370	1943	1933	-240	188	-107	C
	ATOM	3032	CG	LEU	D	374	57.391	-7.325	-13.533	1.00	16.12		C
55	ANISOU	3032	CG	LEU	D	374	1628	2295	2201	-265	224	-176	C
	ATOM	3033	CD1	LEU	D	374	56.508	-6.147	-13.943	1.00	14.16		C
	ANISOU	3033	CD1	LEU	D	374	1315	2168	1897	-246	213	-194	C
	ATOM	3034	CD2	LEU	D	374	58.355	-7.620	-14.697	1.00	15.29		C
	ANISOU	3034	CD2	LEU	D	374	1528	2150	2131	-214	248	-197	C
60	ATOM	3035	C	LEU	D	374	56.317	-8.127	-10.796	1.00	15.20		C
	ANISOU	3035	C	LEU	D	374	1607	2138	2030	-383	243	-101	C
	ATOM	3036	O	LEU	D	374	56.725	-9.266	-10.606	1.00	15.35		O
	ANISOU	3036	O	LEU	D	374	1699	2048	2084	-411	248	-74	O
	ATOM	3037	N	ARG	D	375	55.028	-7.827	-10.911	1.00	15.31		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3037	N	ARG	D	375	1554	2256	2009	-434	284	-144	N
	ATOM	3038	CA	ARG	D	375	54.040	-8.841	-11.218	1.00	16.30		C
	ANISOU	3038	CA	ARG	D	375	1656	2386	2152	-547	331	-184	C
	ATOM	3039	CB	ARG	D	375	52.876	-8.773	-10.272	1.00	17.01		C
5	ANISOU	3039	CB	ARG	D	375	1708	2548	2207	-621	404	-172	C
	ATOM	3040	CG	ARG	D	375	53.151	-9.446	-8.924	1.00	16.88		C
	ANISOU	3040	CG	ARG	D	375	1823	2439	2152	-666	454	-83	C
	ATOM	3041	CD	ARG	D	375	52.036	-9.111	-7.966	1.00	17.47		C
	ANISOU	3041	CD	ARG	D	375	1859	2613	2166	-719	557	-71	C
10	ATOM	3042	NE	ARG	D	375	52.301	-9.670	-6.649	1.00	20.64		N
	ANISOU	3042	NE	ARG	D	375	2417	2937	2488	-755	610	28	N
	ATOM	3043	CZ	ARG	D	375	51.689	-9.306	-5.525	1.00	21.86		C
	ANISOU	3043	CZ	ARG	D	375	2602	3163	2540	-771	710	60	C
	ATOM	3044	NH1	ARG	D	375	50.773	-8.327	-5.513	1.00	20.93		N
15	ANISOU	3044	NH1	ARG	D	375	2351	3193	2408	-742	774	-10	N
	ATOM	3045	NH2	ARG	D	375	52.012	-9.927	-4.411	1.00	23.29		N
	ANISOU	3045	NH2	ARG	D	375	2960	3266	2625	-803	749	164	N
	ATOM	3046	C	ARG	D	375	53.565	-8.716	-12.664	1.00	17.05		C
	ANISOU	3046	C	ARG	D	375	1663	2555	2260	-548	300	-271	C
20	ATOM	3047	O	ARG	D	375	53.246	-7.633	-13.155	1.00	16.83		O
	ANISOU	3047	O	ARG	D	375	1557	2634	2204	-481	270	-291	O
	ATOM	3048	N	LYS	D	376	53.476	-9.856	-13.325	1.00	18.24		N
	ANISOU	3048	N	LYS	D	376	1844	2640	2446	-624	301	-323	N
	ATOM	3049	CA	LYS	D	376	53.192	-9.905	-14.723	1.00	18.60		C
25	ANISOU	3049	CA	LYS	D	376	1849	2743	2477	-625	256	-416	C
	ATOM	3050	CB	LYS	D	376	54.542	-10.061	-15.399	1.00	19.02		C
	ANISOU	3050	CB	LYS	D	376	1990	2707	2528	-534	251	-415	C
	ATOM	3051	CG	LYS	D	376	54.498	-10.388	-16.778	1.00	22.27		C
	ANISOU	3051	CG	LYS	D	376	2419	3141	2901	-532	226	-511	C
30	ATOM	3052	CD	LYS	D	376	55.680	-11.228	-17.131	1.00	21.43		C
	ANISOU	3052	CD	LYS	D	376	2420	2893	2831	-488	267	-529	C
	ATOM	3053	CE	LYS	D	376	55.706	-11.320	-18.640	1.00	23.94		C
	ANISOU	3053	CE	LYS	D	376	2773	3260	3065	-460	255	-635	C
	ATOM	3054	NZ	LYS	D	376	54.576	-12.148	-19.074	1.00	23.78		N
35	ANISOU	3054	NZ	LYS	D	376	2758	3250	3028	-589	205	-754	N
	ATOM	3055	C	LYS	D	376	52.271	-11.109	-14.980	1.00	20.06		C
	ANISOU	3055	C	LYS	D	376	2022	2897	2704	-780	261	-496	C
	ATOM	3056	O	LYS	D	376	52.290	-12.068	-14.216	1.00	21.47		O
	ANISOU	3056	O	LYS	D	376	2269	2952	2938	-868	315	-463	O
40	ATOM	3057	N	ALA	D	377	51.449	-11.038	-16.025	1.00	20.56		N
	ANISOU	3057	N	ALA	D	377	2002	3067	2743	-817	196	-596	N
	ATOM	3058	CA	ALA	D	377	50.654	-12.164	-16.502	1.00	22.62		C
	ANISOU	3058	CA	ALA	D	377	2249	3295	3051	-974	171	-703	C
	ATOM	3059	CB	ALA	D	377	49.141	-12.016	-16.103	1.00	22.84		C
45	ANISOU	3059	CB	ALA	D	377	2091	3455	3132	-1095	166	-725	C
	ATOM	3060	C	ALA	D	377	50.830	-12.200	-18.012	1.00	23.29		C
	ANISOU	3060	C	ALA	D	377	2371	3421	3056	-931	81	-817	C
	ATOM	3061	O	ALA	D	377	51.732	-11.531	-18.538	1.00	22.97		O
	ANISOU	3061	O	ALA	D	377	2392	3399	2935	-785	78	-786	O
50	ATOM	3062	N	THR	D	378	49.995	-12.969	-18.713	1.00	24.81		N
	ANISOU	3062	N	THR	D	378	2534	3628	3263	-1062	10	-949	N
	ATOM	3063	CA	THR	D	378	50.084	-13.071	-20.188	1.00	25.87		C
	ANISOU	3063	CA	THR	D	378	2732	3812	3286	-1028	-90	-1078	C
	ATOM	3064	CB	THR	D	378	49.044	-14.046	-20.745	1.00	27.81		C
55	ANISOU	3064	CB	THR	D	378	2938	4058	3571	-1214	-185	-1242	C
	ATOM	3065	OG1	THR	D	378	49.107	-15.264	-19.991	1.00	28.15		O
	ANISOU	3065	OG1	THR	D	378	3047	3892	3755	-1360	-97	-1250	O
	ATOM	3066	CG2	THR	D	378	49.290	-14.336	-22.254	1.00	28.26		C
	ANISOU	3066	CG2	THR	D	378	3122	4136	3481	-1179	-287	-1397	C
60	ATOM	3067	C	THR	D	378	49.972	-11.709	-20.898	1.00	25.13		C
	ANISOU	3067	C	THR	D	378	2574	3913	3059	-881	-169	-1044	C
	ATOM	3068	O	THR	D	378	48.904	-11.120	-20.958	1.00	26.17		O
	ANISOU	3068	O	THR	D	378	2548	4203	3193	-898	-259	-1050	O
	ATOM	3069	N	ARG	D	379	51.091	-11.219	-21.423	1.00	24.75		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3069	N	ARG	D	379	2648	3846	2911	-733	-128	-998	N
	ATOM	3070	CA	ARG	D	379	51.137	-9.937	-22.140	1.00	24.06		C
	ANISOU	3070	CA	ARG	D	379	2543	3907	2692	-591	-183	-941	C
	ATOM	3071	CB	ARG	D	379	50.530	-10.069	-23.546	1.00	25.58		C
5	ANISOU	3071	CB	ARG	D	379	2771	4219	2730	-599	-324	-1065	C
	ATOM	3072	CG	ARG	D	379	51.184	-11.136	-24.401	1.00	26.56		C
	ANISOU	3072	CG	ARG	D	379	3077	4242	2772	-629	-295	-1197	C
	ATOM	3073	CD	ARG	D	379	50.803	-11.005	-25.880	1.00	28.25		C
	ANISOU	3073	CD	ARG	D	379	3373	4594	2766	-594	-431	-1303	C
10	ATOM	3074	NE	ARG	D	379	51.357	-9.774	-26.432	1.00	26.17		N
	ANISOU	3074	NE	ARG	D	379	3166	4426	2352	-423	-403	-1173	N
	ATOM	3075	CZ	ARG	D	379	51.005	-9.218	-27.587	1.00	26.90		C
	ANISOU	3075	CZ	ARG	D	379	3324	4670	2228	-349	-523	-1189	C
	ATOM	3076	NH1	ARG	D	379	50.097	-9.774	-28.377	1.00	26.03		N
15	ANISOU	3076	NH1	ARG	D	379	3225	4654	2011	-425	-705	-1348	N
	ATOM	3077	NH2	ARG	D	379	51.574	-8.084	-27.945	1.00	25.85		N
	ANISOU	3077	NH2	ARG	D	379	3250	4588	1983	-203	-467	-1038	N
	ATOM	3078	C	ARG	D	379	50.451	-8.817	-21.339	1.00	23.81		C
	ANISOU	3078	C	ARG	D	379	2351	3979	2718	-548	-204	-834	C
20	ATOM	3079	O	ARG	D	379	49.654	-8.062	-21.877	1.00	24.12		O
	ANISOU	3079	O	ARG	D	379	2303	4167	2693	-496	-315	-835	O
	ATOM	3080	N	ARG	D	380	50.796	-8.719	-20.055	1.00	23.74		N
	ANISOU	3080	N	ARG	D	380	2316	3884	2821	-555	-101	-746	N
	ATOM	3081	CA	ARG	D	380	50.201	-7.776	-19.126	1.00	24.65		C
25	ANISOU	3081	CA	ARG	D	380	2301	4071	2994	-517	-90	-664	C
	ATOM	3082	CB	ARG	D	380	48.866	-8.319	-18.591	1.00	25.94		C
	ANISOU	3082	CB	ARG	D	380	2307	4296	3251	-653	-110	-725	C
	ATOM	3083	CG	ARG	D	380	48.090	-7.378	-17.662	1.00	27.73		C
	ANISOU	3083	CG	ARG	D	380	2381	4618	3538	-606	-79	-663	C
30	ATOM	3084	CD	ARG	D	380	46.845	-8.116	-17.110	1.00	32.70		C
	ANISOU	3084	CD	ARG	D	380	2844	5302	4279	-768	-57	-724	C
	ATOM	3085	NE	ARG	D	380	46.470	-7.643	-15.763	1.00	41.53		N
	ANISOU	3085	NE	ARG	D	380	3880	6440	5461	-757	67	-655	N
	ATOM	3086	CZ	ARG	D	380	45.818	-8.377	-14.862	1.00	44.62		C
35	ANISOU	3086	CZ	ARG	D	380	4194	6818	5941	-906	173	-660	C
	ATOM	3087	NH1	ARG	D	380	45.450	-9.626	-15.147	1.00	47.78		N
	ANISOU	3087	NH1	ARG	D	380	4579	7169	6405	-1093	162	-728	N
	ATOM	3088	NH2	ARG	D	380	45.534	-7.858	-13.668	1.00	46.02		N
	ANISOU	3088	NH2	ARG	D	380	4324	7025	6138	-874	301	-598	N
40	ATOM	3089	C	ARG	D	380	51.163	-7.516	-17.970	1.00	22.17		C
	ANISOU	3089	C	ARG	D	380	2048	3640	2735	-477	23	-562	C
	ATOM	3090	O	ARG	D	380	51.649	-8.448	-17.344	1.00	22.38		O
	ANISOU	3090	O	ARG	D	380	2142	3543	2819	-550	89	-560	O
	ATOM	3091	N	LEU	D	381	51.447	-6.242	-17.712	1.00	20.15		N
45	ANISOU	3091	N	LEU	D	381	1778	3415	2461	-357	30	-478	N
	ATOM	3092	CA	LEU	D	381	52.122	-5.824	-16.482	1.00	18.33		C
	ANISOU	3092	CA	LEU	D	381	1581	3101	2282	-326	104	-398	C
	ATOM	3093	CB	LEU	D	381	52.866	-4.501	-16.698	1.00	16.65		C
	ANISOU	3093	CB	LEU	D	381	1404	2880	2041	-197	98	-324	C
50	ATOM	3094	CG	LEU	D	381	53.665	-3.909	-15.562	1.00	16.21		C
	ANISOU	3094	CG	LEU	D	381	1388	2738	2032	-163	142	-259	C
	ATOM	3095	CD1	LEU	D	381	54.864	-3.126	-16.123	1.00	15.32		C
	ANISOU	3095	CD1	LEU	D	381	1337	2566	1918	-87	146	-198	C
	ATOM	3096	CD2	LEU	D	381	52.771	-3.029	-14.664	1.00	13.19		C
55	ANISOU	3096	CD2	LEU	D	381	938	2411	1663	-126	146	-254	C
	ATOM	3097	C	LEU	D	381	51.003	-5.675	-15.465	1.00	18.54		C
	ANISOU	3097	C	LEU	D	381	1498	3193	2353	-368	130	-404	C
	ATOM	3098	O	LEU	D	381	50.041	-4.942	-15.713	1.00	18.05		O
	ANISOU	3098	O	LEU	D	381	1322	3249	2289	-319	87	-421	O
60	ATOM	3099	N	VAL	D	382	51.092	-6.417	-14.358	1.00	18.79		N
	ANISOU	3099	N	VAL	D	382	1564	3152	2425	-454	205	-387	N
	ATOM	3100	CA	VAL	D	382	50.030	-6.373	-13.333	1.00	19.66		C
	ANISOU	3100	CA	VAL	D	382	1578	3326	2564	-508	270	-388	C
	ATOM	3101	CB	VAL	D	382	49.864	-7.734	-12.561	1.00	20.30		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3101	CB	VAL	D	382	1704	3327	2682	-664	351	-380	C
	ATOM	3102	CG1	VAL	D	382	48.932	-7.592	-11.345	1.00	21.28		C
	ANISOU	3102	CG1	VAL	D	382	1755	3516	2814	-713	462	-358	C
	ATOM	3103	CG2	VAL	D	382	49.384	-8.852	-13.492	1.00	18.12		C
5	ANISOU	3103	CG2	VAL	D	382	1390	3040	2452	-790	311	-458	C
	ATOM	3104	C	VAL	D	382	50.355	-5.218	-12.398	1.00	20.00		C
	ANISOU	3104	C	VAL	D	382	1654	3367	2580	-399	305	-336	C
	ATOM	3105	O	VAL	D	382	49.503	-4.363	-12.132	1.00	20.34		O
	ANISOU	3105	O	VAL	D	382	1594	3506	2628	-338	324	-353	O
10	ATOM	3106	N	GLN	D	383	51.602	-5.188	-11.930	1.00	20.10		N
	ANISOU	3106	N	GLN	D	383	1804	3265	2570	-368	305	-282	N
	ATOM	3107	CA	GLN	D	383	52.076	-4.128	-11.044	1.00	20.46		C
	ANISOU	3107	CA	GLN	D	383	1903	3285	2586	-280	314	-249	C
	ATOM	3108	CB	GLN	D	383	51.440	-4.281	-9.645	1.00	22.14		C
15	ANISOU	3108	CB	GLN	D	383	2130	3523	2758	-323	407	-245	C
	ATOM	3109	CG	GLN	D	383	51.782	-3.166	-8.701	1.00	27.86		C
	ANISOU	3109	CG	GLN	D	383	2924	4230	3430	-231	413	-242	C
	ATOM	3110	CD	GLN	D	383	50.784	-2.962	-7.567	1.00	35.94		C
	ANISOU	3110	CD	GLN	D	383	3931	5330	4396	-236	530	-267	C
20	ATOM	3111	OE1	GLN	D	383	50.146	-3.921	-7.057	1.00	37.23		O
	ANISOU	3111	OE1	GLN	D	383	4080	5526	4539	-341	628	-250	O
	ATOM	3112	NE2	GLN	D	383	50.628	-1.688	-7.167	1.00	36.75		N
	ANISOU	3112	NE2	GLN	D	383	4039	5450	4475	-122	537	-310	N
	ATOM	3113	C	GLN	D	383	53.600	-4.104	-10.977	1.00	18.47		C
25	ANISOU	3113	C	GLN	D	383	1765	2914	2337	-249	266	-202	C
	ATOM	3114	O	GLN	D	383	54.256	-5.122	-11.078	1.00	18.25		O
	ANISOU	3114	O	GLN	D	383	1793	2812	2329	-299	259	-182	O
	ATOM	3115	N	LEU	D	384	54.153	-2.908	-10.828	1.00	18.23		N
	ANISOU	3115	N	LEU	D	384	1759	2860	2309	-163	230	-190	N
30	ATOM	3116	CA	LEU	D	384	55.575	-2.690	-10.666	1.00	16.87		C
	ANISOU	3116	CA	LEU	D	384	1658	2587	2165	-139	179	-151	C
	ATOM	3117	CB	LEU	D	384	56.164	-2.192	-11.983	1.00	16.08		C
	ANISOU	3117	CB	LEU	D	384	1525	2473	2113	-96	154	-135	C
	ATOM	3118	CG	LEU	D	384	57.662	-1.872	-12.075	1.00	16.83		C
35	ANISOU	3118	CG	LEU	D	384	1646	2475	2275	-79	119	-94	C
	ATOM	3119	CD1	LEU	D	384	58.510	-3.146	-12.068	1.00	11.98		C
	ANISOU	3119	CD1	LEU	D	384	1046	1808	1697	-114	119	-78	C
	ATOM	3120	CD2	LEU	D	384	57.896	-1.065	-13.332	1.00	12.84		C
	ANISOU	3120	CD2	LEU	D	384	1111	1973	1792	-36	133	-69	C
40	ATOM	3121	C	LEU	D	384	55.832	-1.650	-9.567	1.00	17.39		C
	ANISOU	3121	C	LEU	D	384	1779	2622	2207	-96	154	-158	C
	ATOM	3122	O	LEU	D	384	55.240	-0.552	-9.591	1.00	18.03		O
	ANISOU	3122	O	LEU	D	384	1836	2732	2282	-36	164	-189	O
	ATOM	3123	N	ILE	D	385	56.704	-1.988	-8.617	1.00	16.14		N
45	ANISOU	3123	N	ILE	D	385	1702	2399	2032	-119	109	-136	N
	ATOM	3124	CA	ILE	D	385	57.217	-1.037	-7.649	1.00	16.77		C
	ANISOU	3124	CA	ILE	D	385	1850	2434	2086	-88	49	-157	C
	ATOM	3125	CB	ILE	D	385	56.942	-1.448	-6.168	1.00	17.93		C
	ANISOU	3125	CB	ILE	D	385	2109	2597	2105	-110	57	-164	C
50	ATOM	3126	CG1	ILE	D	385	55.479	-1.806	-6.000	1.00	19.43		C
	ANISOU	3126	CG1	ILE	D	385	2275	2882	2226	-129	188	-183	C
	ATOM	3127	CD1	ILE	D	385	55.134	-2.472	-4.673	1.00	20.09		C
	ANISOU	3127	CD1	ILE	D	385	2475	2988	2170	-170	242	-163	C
	ATOM	3128	CG2	ILE	D	385	57.252	-0.256	-5.217	1.00	17.45		C
55	ANISOU	3128	CG2	ILE	D	385	2135	2503	1991	-68	-6	-224	C
	ATOM	3129	C	ILE	D	385	58.712	-0.916	-7.838	1.00	16.33		C
	ANISOU	3129	C	ILE	D	385	1790	2292	2123	-90	-48	-125	C
	ATOM	3130	O	ILE	D	385	59.401	-1.917	-7.778	1.00	15.60		O
	ANISOU	3130	O	ILE	D	385	1701	2171	2056	-114	-80	-82	O
60	ATOM	3131	N	VAL	D	386	59.193	0.302	-8.082	1.00	16.79		N
	ANISOU	3131	N	VAL	D	386	1830	2302	2249	-66	-89	-145	N
	ATOM	3132	CA	VAL	D	386	60.628	0.573	-8.316	1.00	16.53		C
	ANISOU	3132	CA	VAL	D	386	1754	2189	2338	-85	-170	-117	C
	ATOM	3133	CB	VAL	D	386	60.864	1.322	-9.646	1.00	16.12		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3133	CB	VAL	D	386	1628	2110	2389	-76	-119	-88	C
	ATOM	3134	CG1	VAL	D	386	62.343	1.365	-9.984	1.00	15.54		C
	ANISOU	3134	CG1	VAL	D	386	1475	1971	2459	-111	-161	-48	C
	ATOM	3135	CG2	VAL	D	386	60.077	0.665	-10.776	1.00	15.17		C
5	ANISOU	3135	CG2	VAL	D	386	1471	2064	2228	-55	-21	-62	C
	ATOM	3136	C	VAL	D	386	61.267	1.429	-7.207	1.00	18.00		C
	ANISOU	3136	C	VAL	D	386	2001	2310	2527	-99	-288	-165	C
	ATOM	3137	O	VAL	D	386	60.688	2.436	-6.757	1.00	17.63		O
	ANISOU	3137	O	VAL	D	386	2022	2246	2432	-78	-286	-229	O
10	ATOM	3138	N	SER	D	387	62.475	1.024	-6.818	1.00	17.98		N
	ANISOU	3138	N	SER	D	387	1968	2271	2593	-128	-398	-143	N
	ATOM	3139	CA	SER	D	387	63.295	1.740	-5.874	1.00	19.91		C
	ANISOU	3139	CA	SER	D	387	2246	2456	2863	-157	-549	-194	C
	ATOM	3140	CB	SER	D	387	63.525	0.862	-4.642	1.00	20.75		C
15	ANISOU	3140	CB	SER	D	387	2441	2593	2848	-148	-662	-190	C
	ATOM	3141	OG	SER	D	387	64.138	1.637	-3.629	1.00	26.41		O
	ANISOU	3141	OG	SER	D	387	3222	3268	3545	-174	-828	-263	O
	ATOM	3142	C	SER	D	387	64.614	2.081	-6.601	1.00	19.75		C
	ANISOU	3142	C	SER	D	387	2073	2372	3058	-200	-595	-160	C
20	ATOM	3143	O	SER	D	387	65.205	1.226	-7.243	1.00	19.61		O
	ANISOU	3143	O	SER	D	387	1949	2374	3129	-192	-563	-95	O
	ATOM	3144	N	GLY	D	388	65.045	3.336	-6.558	1.00	20.44		N
	ANISOU	3144	N	GLY	D	388	2147	2377	3242	-249	-648	-207	N
	ATOM	3145	CA	GLY	D	388	66.169	3.760	-7.373	1.00	20.71		C
25	ANISOU	3145	CA	GLY	D	388	2024	2350	3495	-310	-644	-164	C
	ATOM	3146	C	GLY	D	388	66.910	4.945	-6.819	1.00	22.28		C
	ANISOU	3146	C	GLY	D	388	2212	2442	3810	-396	-776	-233	C
	ATOM	3147	O	GLY	D	388	66.412	5.643	-5.960	1.00	22.74		O
	ANISOU	3147	O	GLY	D	388	2413	2458	3769	-398	-850	-326	O
30	ATOM	3148	N	LYS	D	389	68.118	5.162	-7.318	1.00	23.01		N
	ANISOU	3148	N	LYS	D	389	2130	2489	4124	-474	-798	-195	N
	ATOM	3149	CA	LYS	D	389	68.973	6.226	-6.823	1.00	25.51		C
	ANISOU	3149	CA	LYS	D	389	2401	2696	4597	-588	-939	-262	C
	ATOM	3150	CB	LYS	D	389	70.436	5.931	-7.166	1.00	27.03		C
35	ANISOU	3150	CB	LYS	D	389	2339	2893	5036	-662	-988	-213	C
	ATOM	3151	CG	LYS	D	389	71.016	4.768	-6.405	1.00	29.16		C
	ANISOU	3151	CG	LYS	D	389	2536	3261	5282	-606	-1149	-218	C
	ATOM	3152	CD	LYS	D	389	72.475	4.525	-6.778	1.00	33.37		C
	ANISOU	3152	CD	LYS	D	389	2779	3803	6095	-662	-1193	-174	C
40	ATOM	3153	CE	LYS	D	389	73.170	3.650	-5.740	1.00	38.88		C
	ANISOU	3153	CE	LYS	D	389	3409	4571	6792	-609	-1439	-199	C
	ATOM	3154	NZ	LYS	D	389	74.315	2.871	-6.313	1.00	42.89		N
	ANISOU	3154	NZ	LYS	D	389	3629	5130	7536	-578	-1414	-125	N
	ATOM	3155	C	LYS	D	389	68.574	7.622	-7.336	1.00	25.27		C
45	ANISOU	3155	C	LYS	D	389	2446	2528	4627	-643	-846	-275	C
	ATOM	3156	O	LYS	D	389	68.815	8.616	-6.671	1.00	27.52		O
	ANISOU	3156	O	LYS	D	389	2792	2696	4970	-722	-969	-371	O
	ATOM	3157	N	ASP	D	390	67.957	7.673	-8.502	1.00	23.52		N
	ANISOU	3157	N	ASP	D	390	2238	2314	4385	-594	-643	-180	N
50	ATOM	3158	CA	ASP	D	390	67.627	8.899	-9.203	1.00	24.41		C
	ANISOU	3158	CA	ASP	D	390	2418	2292	4565	-626	-538	-147	C
	ATOM	3159	CB	ASP	D	390	68.851	9.494	-9.933	1.00	25.90		C
	ANISOU	3159	CB	ASP	D	390	2446	2380	5014	-767	-487	-72	C
	ATOM	3160	CG	ASP	D	390	69.523	8.504	-10.892	1.00	26.86		C
55	ANISOU	3160	CG	ASP	D	390	2382	2621	5204	-760	-358	41	C
	ATOM	3161	OD1	ASP	D	390	69.057	8.339	-12.046	1.00	26.07		O
	ANISOU	3161	OD1	ASP	D	390	2311	2561	5035	-701	-169	145	O
	ATOM	3162	OD2	ASP	D	390	70.541	7.906	-10.494	1.00	27.91		O
	ANISOU	3162	OD2	ASP	D	390	2341	2805	5458	-807	-451	19	O
60	ATOM	3163	C	ASP	D	390	66.538	8.541	-10.190	1.00	23.04		C
	ANISOU	3163	C	ASP	D	390	2310	2197	4248	-508	-363	-61	C
	ATOM	3164	O	ASP	D	390	66.326	7.369	-10.478	1.00	20.52		O
	ANISOU	3164	O	ASP	D	390	1944	2019	3834	-443	-313	-25	O
	ATOM	3165	N	GLU	D	391	65.854	9.559	-10.695	1.00	24.31		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3165	N	GLU	D	391	2582	2254	4399	-480	-285	-32	N
	ATOM	3166	CA	GLU	D	391	64.698	9.375	-11.545	1.00	25.09		C
	ANISOU	3166	CA	GLU	D	391	2753	2426	4353	-357	-161	37	C
	ATOM	3167	CB	GLU	D	391	63.893	10.685	-11.645	1.00	25.59		C
5	ANISOU	3167	CB	GLU	D	391	2964	2345	4414	-303	-142	33	C
	ATOM	3168	CG	GLU	D	391	63.654	11.247	-13.044	1.00	29.26		C
	ANISOU	3168	CG	GLU	D	391	3463	2757	4898	-269	-8	185	C
	ATOM	3169	CD	GLU	D	391	63.469	12.790	-13.016	1.00	31.73		C
	ANISOU	3169	CD	GLU	D	391	3910	2836	5312	-270	-16	194	C
10	ATOM	3170	OE1	GLU	D	391	63.085	13.318	-11.941	1.00	37.16		O
	ANISOU	3170	OE1	GLU	D	391	4684	3437	5996	-243	-114	56	O
	ATOM	3171	OE2	GLU	D	391	63.683	13.469	-14.057	1.00	34.98		O
	ANISOU	3171	OE2	GLU	D	391	4359	3140	5793	-292	83	339	O
	ATOM	3172	C	GLU	D	391	65.058	8.781	-12.903	1.00	24.24		C
15	ANISOU	3172	C	GLU	D	391	2553	2399	4260	-360	-18	171	C
	ATOM	3173	O	GLU	D	391	64.273	8.010	-13.468	1.00	22.69		O
	ANISOU	3173	O	GLU	D	391	2374	2332	3915	-266	47	200	O
	ATOM	3174	N	GLN	D	392	66.247	9.114	-13.408	1.00	24.93		N
	ANISOU	3174	N	GLN	D	392	2538	2412	4524	-473	36	242	N
20	ATOM	3175	CA	GLN	D	392	66.743	8.484	-14.629	1.00	25.44		C
	ANISOU	3175	CA	GLN	D	392	2508	2561	4595	-478	192	356	C
	ATOM	3176	CB	GLN	D	392	68.044	9.130	-15.089	1.00	27.83		C
	ANISOU	3176	CB	GLN	D	392	2695	2758	5122	-620	273	435	C
	ATOM	3177	CG	GLN	D	392	68.528	8.613	-16.433	1.00	30.48		C
25	ANISOU	3177	CG	GLN	D	392	2956	3178	5449	-617	479	558	C
	ATOM	3178	CD	GLN	D	392	69.873	9.190	-16.862	1.00	32.38		C
	ANISOU	3178	CD	GLN	D	392	3046	3328	5929	-770	593	641	C
	ATOM	3179	OE1	GLN	D	392	70.866	9.160	-16.120	1.00	34.05		O
	ANISOU	3179	OE1	GLN	D	392	3083	3509	6346	-874	503	579	O
30	ATOM	3180	NE2	GLN	D	392	69.915	9.682	-18.098	1.00	36.39		N
	ANISOU	3180	NE2	GLN	D	392	3617	3803	6407	-787	796	790	N
	ATOM	3181	C	GLN	D	392	66.861	6.952	-14.515	1.00	23.36		C
	ANISOU	3181	C	GLN	D	392	2153	2465	4257	-425	183	315	C
	ATOM	3182	O	GLN	D	392	66.428	6.241	-15.420	1.00	22.71		O
35	ANISOU	3182	O	GLN	D	392	2091	2487	4051	-353	291	361	O
	ATOM	3183	N	SER	D	393	67.396	6.449	-13.399	1.00	22.65		N
	ANISOU	3183	N	SER	D	393	1984	2391	4230	-455	43	226	N
	ATOM	3184	CA	SER	D	393	67.491	5.002	-13.124	1.00	21.47		C
	ANISOU	3184	CA	SER	D	393	1772	2367	4020	-396	13	192	C
40	ATOM	3185	CB	SER	D	393	68.327	4.756	-11.883	1.00	21.62		C
	ANISOU	3185	CB	SER	D	393	1702	2368	4143	-443	-165	121	C
	ATOM	3186	OG	SER	D	393	69.540	5.423	-12.049	1.00	27.86		O
	ANISOU	3186	OG	SER	D	393	2342	3083	5162	-552	-165	148	O
	ATOM	3187	C	SER	D	393	66.148	4.332	-12.909	1.00	19.41		C
45	ANISOU	3187	C	SER	D	393	1642	2192	3542	-296	-2	151	C
	ATOM	3188	O	SER	D	393	65.985	3.151	-13.253	1.00	18.62		O
	ANISOU	3188	O	SER	D	393	1522	2183	3368	-242	46	156	O
	ATOM	3189	N	ILE	D	394	65.218	5.075	-12.314	1.00	18.26		N
	ANISOU	3189	N	ILE	D	394	1621	2007	3310	-275	-63	103	N
50	ATOM	3190	CA	ILE	D	394	63.857	4.613	-12.104	1.00	17.01		C
	ANISOU	3190	CA	ILE	D	394	1563	1931	2968	-189	-60	64	C
	ATOM	3191	CB	ILE	D	394	63.049	5.528	-11.111	1.00	17.01		C
	ANISOU	3191	CB	ILE	D	394	1678	1876	2909	-165	-137	-15	C
	ATOM	3192	CG1	ILE	D	394	63.665	5.443	-9.702	1.00	17.08		C
55	ANISOU	3192	CG1	ILE	D	394	1698	1854	2938	-213	-281	-98	C
	ATOM	3193	CD1	ILE	D	394	63.245	6.554	-8.715	1.00	19.53		C
	ANISOU	3193	CD1	ILE	D	394	2130	2075	3217	-209	-359	-197	C
	ATOM	3194	CG2	ILE	D	394	61.591	5.140	-11.069	1.00	15.94		C
	ANISOU	3194	CG2	ILE	D	394	1608	1838	2612	-76	-97	-43	C
60	ATOM	3195	C	ILE	D	394	63.185	4.408	-13.442	1.00	16.42		C
	ANISOU	3195	C	ILE	D	394	1505	1922	2813	-134	66	130	C
	ATOM	3196	O	ILE	D	394	62.597	3.330	-13.682	1.00	17.30		O
	ANISOU	3196	O	ILE	D	394	1618	2138	2819	-93	94	116	O
	ATOM	3197	N	ALA	D	395	63.298	5.400	-14.315	1.00	16.91		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3197	N	ALA	D	395	1588	1917	2920	-141	135	204	N
	ATOM	3198	CA	ALA	D	395	62.780	5.347	-15.687	1.00	17.37		C
	ANISOU	3198	CA	ALA	D	395	1681	2033	2883	-86	242	282	C
	ATOM	3199	CB	ALA	D	395	63.094	6.656	-16.431	1.00	18.96		C
5	ANISOU	3199	CB	ALA	D	395	1932	2120	3153	-106	307	386	C
	ATOM	3200	C	ALA	D	395	63.322	4.179	-16.485	1.00	17.20		C
	ANISOU	3200	C	ALA	D	395	1596	2104	2837	-93	329	304	C
	ATOM	3201	O	ALA	D	395	62.559	3.518	-17.161	1.00	17.12		O
	ANISOU	3201	O	ALA	D	395	1624	2193	2688	-37	361	297	O
10	ATOM	3202	N	GLU	D	396	64.642	3.945	-16.431	1.00	18.24		N
	ANISOU	3202	N	GLU	D	396	1621	2199	3109	-159	365	321	N
	ATOM	3203	CA	GLU	D	396	65.268	2.754	-17.052	1.00	19.05		C
	ANISOU	3203	CA	GLU	D	396	1650	2376	3211	-147	455	320	C
	ATOM	3204	CB	GLU	D	396	66.786	2.709	-16.793	1.00	19.83		C
15	ANISOU	3204	CB	GLU	D	396	1592	2423	3518	-212	479	336	C
	ATOM	3205	CG	GLU	D	396	67.552	3.855	-17.468	1.00	25.11		C
	ANISOU	3205	CG	GLU	D	396	2219	3017	4306	-286	591	433	C
	ATOM	3206	CD	GLU	D	396	69.015	4.000	-17.021	1.00	27.94		C
	ANISOU	3206	CD	GLU	D	396	2381	3319	4915	-376	586	439	C
20	ATOM	3207	OE1	GLU	D	396	69.468	3.298	-16.076	1.00	34.31		O
	ANISOU	3207	OE1	GLU	D	396	3089	4143	5805	-369	459	366	O
	ATOM	3208	OE2	GLU	D	396	69.726	4.828	-17.643	1.00	32.70		O
	ANISOU	3208	OE2	GLU	D	396	2925	3862	5638	-458	709	525	O
	ATOM	3209	C	GLU	D	396	64.601	1.433	-16.628	1.00	16.89		C
25	ANISOU	3209	C	GLU	D	396	1399	2181	2836	-97	395	236	C
	ATOM	3210	O	GLU	D	396	64.337	0.594	-17.467	1.00	17.29		O
	ANISOU	3210	O	GLU	D	396	1477	2301	2790	-57	470	225	O
	ATOM	3211	N	ALA	D	397	64.318	1.260	-15.340	1.00	16.42		N
	ANISOU	3211	N	ALA	D	397	1346	2104	2788	-105	265	178	N
30	ATOM	3212	CA	ALA	D	397	63.635	0.071	-14.829	1.00	15.26		C
	ANISOU	3212	CA	ALA	D	397	1236	2012	2549	-75	218	117	C
	ATOM	3213	CB	ALA	D	397	63.668	0.033	-13.291	1.00	15.13		C
	ANISOU	3213	CB	ALA	D	397	1230	1961	2557	-95	85	78	C
	ATOM	3214	C	ALA	D	397	62.215	-0.057	-15.320	1.00	15.97		C
35	ANISOU	3214	C	ALA	D	397	1408	2176	2484	-43	238	95	C
	ATOM	3215	O	ALA	D	397	61.786	-1.172	-15.654	1.00	16.45		O
	ANISOU	3215	O	ALA	D	397	1487	2289	2476	-32	262	58	O
	ATOM	3216	N	ILE	D	398	61.462	1.059	-15.321	1.00	16.01		N
	ANISOU	3216	N	ILE	D	398	1457	2178	2446	-26	217	108	N
40	ATOM	3217	CA	ILE	D	398	60.095	1.065	-15.859	1.00	16.25		C
	ANISOU	3217	CA	ILE	D	398	1533	2291	2348	19	219	92	C
	ATOM	3218	CB	ILE	D	398	59.352	2.440	-15.637	1.00	16.90		C
	ANISOU	3218	CB	ILE	D	398	1654	2346	2422	64	182	109	C
	ATOM	3219	CG1	ILE	D	398	59.198	2.757	-14.154	1.00	16.25		C
45	ANISOU	3219	CG1	ILE	D	398	1581	2218	2376	53	117	51	C
	ATOM	3220	CD1	ILE	D	398	58.939	4.211	-13.831	1.00	17.39		C
	ANISOU	3220	CD1	ILE	D	398	1771	2278	2557	94	91	55	C
	ATOM	3221	CG2	ILE	D	398	57.975	2.398	-16.248	1.00	15.79		C
	ANISOU	3221	CG2	ILE	D	398	1524	2306	2169	127	170	95	C
50	ATOM	3222	C	ILE	D	398	60.089	0.658	-17.357	1.00	16.35		C
	ANISOU	3222	C	ILE	D	398	1563	2365	2282	40	294	120	C
	ATOM	3223	O	ILE	D	398	59.343	-0.227	-17.770	1.00	16.18		O
	ANISOU	3223	O	ILE	D	398	1555	2424	2169	47	288	69	O
	ATOM	3224	N	ILE	D	399	60.961	1.269	-18.152	1.00	16.83		N
55	ANISOU	3224	N	ILE	D	399	1632	2386	2379	41	371	196	N
	ATOM	3225	CA	ILE	D	399	61.094	0.870	-19.567	1.00	16.97		C
	ANISOU	3225	CA	ILE	D	399	1691	2465	2293	64	463	222	C
	ATOM	3226	CB	ILE	D	399	62.227	1.668	-20.302	1.00	18.12		C
	ANISOU	3226	CB	ILE	D	399	1838	2552	2495	49	584	328	C
60	ATOM	3227	CG1	ILE	D	399	61.855	3.147	-20.442	1.00	16.73		C
	ANISOU	3227	CG1	ILE	D	399	1724	2317	2315	67	562	423	C
	ATOM	3228	CD1	ILE	D	399	63.062	4.110	-20.649	1.00	18.57		C
	ANISOU	3228	CD1	ILE	D	399	1936	2437	2683	8	667	531	C
	ATOM	3229	CG2	ILE	D	399	62.537	1.045	-21.698	1.00	17.41		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3229	CG2	ILE	D	399	1800	2535	2278	75	713	340	C
	ATOM	3230	C	ILE	D	399	61.312	-0.653	-19.738	1.00	16.98		C
	ANISOU	3230	C	ILE	D	399	1675	2507	2269	53	495	138	C
	ATOM	3231	O	ILE	D	399	60.592	-1.306	-20.497	1.00	17.78		O
5	ANISOU	3231	O	ILE	D	399	1832	2687	2237	73	491	87	O
	ATOM	3232	N	VAL	D	400	62.307	-1.207	-19.045	1.00	16.61		N
	ANISOU	3232	N	VAL	D	400	1556	2398	2359	26	512	120	N
	ATOM	3233	CA	VAL	D	400	62.608	-2.659	-19.102	1.00	15.36		C
	ANISOU	3233	CA	VAL	D	400	1388	2241	2209	32	541	46	C
10	ATOM	3234	CB	VAL	D	400	63.878	-2.999	-18.262	1.00	16.29		C
	ANISOU	3234	CB	VAL	D	400	1403	2277	2508	26	542	57	C
	ATOM	3235	CG1	VAL	D	400	64.115	-4.500	-18.195	1.00	13.50		C
	ANISOU	3235	CG1	VAL	D	400	1055	1897	2178	53	557	-12	C
	ATOM	3236	CG2	VAL	D	400	65.116	-2.244	-18.837	1.00	13.64		C
15	ANISOU	3236	CG2	VAL	D	400	986	1920	2278	24	654	130	C
	ATOM	3237	C	VAL	D	400	61.412	-3.538	-18.702	1.00	15.40		C
	ANISOU	3237	C	VAL	D	400	1440	2279	2133	16	456	-35	C
	ATOM	3238	O	VAL	D	400	61.069	-4.500	-19.408	1.00	16.47		O
	ANISOU	3238	O	VAL	D	400	1626	2443	2188	19	485	-105	O
20	ATOM	3239	N	ALA	D	401	60.759	-3.208	-17.597	1.00	14.49		N
	ANISOU	3239	N	ALA	D	401	1311	2156	2037	-10	363	-33	N
	ATOM	3240	CA	ALA	D	401	59.557	-3.930	-17.183	1.00	14.67		C
	ANISOU	3240	CA	ALA	D	401	1359	2218	1996	-43	305	-97	C
	ATOM	3241	CB	ALA	D	401	59.103	-3.452	-15.809	1.00	13.69		C
25	ANISOU	3241	CB	ALA	D	401	1219	2081	1904	-63	238	-82	C
	ATOM	3242	C	ALA	D	401	58.398	-3.848	-18.208	1.00	15.39		C
	ANISOU	3242	C	ALA	D	401	1478	2411	1958	-37	291	-135	C
	ATOM	3243	O	ALA	D	401	57.713	-4.818	-18.452	1.00	16.06		O
	ANISOU	3243	O	ALA	D	401	1579	2526	1997	-76	274	-209	O
30	ATOM	3244	N	MSE	D	402	58.174	-2.688	-18.801	1.00	16.28		N
	ANISOU	3244	N	MSE	D	402	1597	2569	2018	10	285	-82	N
	ATOM	3245	CA	MSE	D	402	57.144	-2.553	-19.841	1.00	18.26		C
	ANISOU	3245	CA	MSE	D	402	1875	2926	2137	36	243	-106	C
	ATOM	3246	CB	MSE	D	402	56.928	-1.071	-20.204	1.00	18.49		C
35	ANISOU	3246	CB	MSE	D	402	1919	2974	2132	108	222	-14	C
	ATOM	3247	CG	MSE	D	402	56.199	-0.248	-19.135	1.00	17.60		C
	ANISOU	3247	CG	MSE	D	402	1749	2850	2087	130	160	-1	C
	ATOM	3248	SE	MSE	D	402	56.146	1.624	-19.687	0.90	22.98		SE
	ANISOU	3248	SE	MSE	D	402	2485	3496	2753	237	146	125	SE
40	ATOM	3249	CE	MSE	D	402	55.076	2.410	-18.255	1.00	21.33		C
	ANISOU	3249	CE	MSE	D	402	2203	3271	2632	282	78	86	C
	ATOM	3250	C	MSE	D	402	57.429	-3.401	-21.105	1.00	17.59		C
	ANISOU	3250	C	MSE	D	402	1861	2875	1947	35	288	-158	C
	ATOM	3251	O	MSE	D	402	56.527	-4.090	-21.622	1.00	17.86		O
45	ANISOU	3251	O	MSE	D	402	1912	2982	1891	9	226	-245	O
	ATOM	3252	N	VAL	D	403	58.675	-3.365	-21.578	1.00	17.04		N
	ANISOU	3252	N	VAL	D	403	1828	2753	1894	59	399	-117	N
	ATOM	3253	CA	VAL	D	403	59.106	-4.194	-22.698	1.00	17.23		C
	ANISOU	3253	CA	VAL	D	403	1930	2797	1818	71	477	-179	C
50	ATOM	3254	CB	VAL	D	403	60.556	-3.848	-23.174	1.00	18.02		C
	ANISOU	3254	CB	VAL	D	403	2039	2850	1958	109	637	-106	C
	ATOM	3255	CG1	VAL	D	403	61.044	-4.814	-24.226	1.00	17.77		C
	ANISOU	3255	CG1	VAL	D	403	2091	2834	1828	135	747	-191	C
	ATOM	3256	CG2	VAL	D	403	60.625	-2.412	-23.711	1.00	17.84		C
55	ANISOU	3256	CG2	VAL	D	403	2047	2857	1873	143	665	26	C
	ATOM	3257	C	VAL	D	403	58.943	-5.683	-22.346	1.00	17.40		C
	ANISOU	3257	C	VAL	D	403	1955	2774	1884	20	460	-304	C
	ATOM	3258	O	VAL	D	403	58.320	-6.447	-23.087	1.00	17.38		O
	ANISOU	3258	O	VAL	D	403	2019	2816	1768	-1	427	-409	O
60	ATOM	3259	N	PHE	D	404	59.463	-6.068	-21.187	1.00	16.85		N
	ANISOU	3259	N	PHE	D	404	1821	2605	1975	-4	468	-290	N
	ATOM	3260	CA	PHE	D	404	59.430	-7.453	-20.709	1.00	16.94		C
	ANISOU	3260	CA	PHE	D	404	1850	2535	2053	-47	459	-377	C
	ATOM	3261	CB	PHE	D	404	60.112	-7.514	-19.346	1.00	15.89		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3261	CB	PHE	D	404	1652	2303	2081	-48	451	-311	C
	ATOM	3262	CG	PHE	D	404	60.205	-8.886	-18.770	1.00	14.98		C
	ANISOU	3262	CG	PHE	D	404	1571	2077	2043	-77	445	-364	C
	ATOM	3263	CD1	PHE	D	404	61.249	-9.757	-19.143	1.00	15.77		C
5	ANISOU	3263	CD1	PHE	D	404	1698	2082	2212	-16	525	-400	C
	ATOM	3264	CE1	PHE	D	404	61.321	-11.039	-18.585	1.00	17.63		C
	ANISOU	3264	CE1	PHE	D	404	1984	2185	2531	-30	513	-438	C
	ATOM	3265	CZ	PHE	D	404	60.388	-11.449	-17.653	1.00	16.05		C
10	ANISOU	3265	CZ	PHE	D	404	1812	1951	2336	-121	435	-426	C
	ATOM	3266	CE2	PHE	D	404	59.342	-10.569	-17.262	1.00	17.50		C
	ANISOU	3266	CE2	PHE	D	404	1951	2250	2448	-190	374	-393	C
	ATOM	3267	CD2	PHE	D	404	59.283	-9.297	-17.818	1.00	13.88		C
	ANISOU	3267	CD2	PHE	D	404	1438	1917	1919	-156	374	-367	C
	ATOM	3268	C	PHE	D	404	58.010	-8.031	-20.605	1.00	17.76		C
15	ANISOU	3268	C	PHE	D	404	1967	2679	2102	-130	361	-459	C
	ATOM	3269	O	PHE	D	404	57.797	-9.247	-20.769	1.00	17.49		O
	ANISOU	3269	O	PHE	D	404	1986	2584	2073	-180	361	-559	O
	ATOM	3270	N	SER	D	405	57.052	-7.151	-20.315	1.00	18.09		N
	ANISOU	3270	N	SER	D	405	1951	2814	2110	-146	283	-420	N
20	ATOM	3271	CA	SER	D	405	55.637	-7.523	-20.129	1.00	19.11		C
	ANISOU	3271	CA	SER	D	405	2039	3005	2216	-228	193	-487	C
	ATOM	3272	CB	SER	D	405	54.863	-6.332	-19.573	1.00	18.78		C
	ANISOU	3272	CB	SER	D	405	1906	3051	2179	-203	138	-418	C
	ATOM	3273	OG	SER	D	405	54.618	-5.349	-20.582	1.00	21.57		O
25	ANISOU	3273	OG	SER	D	405	2269	3504	2423	-125	96	-388	O
	ATOM	3274	C	SER	D	405	54.985	-8.034	-21.418	1.00	20.52		C
	ANISOU	3274	C	SER	D	405	2267	3260	2268	-254	138	-600	C
	ATOM	3275	O	SER	D	405	54.015	-8.769	-21.350	1.00	21.91		O
	ANISOU	3275	O	SER	D	405	2413	3456	2458	-351	72	-689	O
30	ATOM	3276	N	GLN	D	406	55.571	-7.670	-22.566	1.00	21.23		N
	ANISOU	3276	N	GLN	D	406	2441	3390	2236	-175	172	-596	N
	ATOM	3277	CA	GLN	D	406	55.127	-8.012	-23.897	1.00	22.62		C
	ANISOU	3277	CA	GLN	D	406	2703	3650	2242	-175	117	-699	C
	ATOM	3278	CB	GLN	D	406	55.211	-9.513	-24.125	1.00	23.49		C
35	ANISOU	3278	CB	GLN	D	406	2891	3667	2369	-252	136	-852	C
	ATOM	3279	CG	GLN	D	406	56.607	-10.072	-23.936	1.00	22.07		C
	ANISOU	3279	CG	GLN	D	406	2774	3339	2271	-202	291	-842	C
	ATOM	3280	CD	GLN	D	406	56.648	-11.573	-24.102	1.00	23.20		C
	ANISOU	3280	CD	GLN	D	406	3007	3356	2451	-264	309	-996	C
40	ATOM	3281	OE1	GLN	D	406	55.795	-12.289	-23.567	1.00	21.91		O
	ANISOU	3281	OE1	GLN	D	406	2815	3144	2366	-382	229	-1058	O
	ATOM	3282	NE2	GLN	D	406	57.631	-12.062	-24.863	1.00	22.17		N
	ANISOU	3282	NE2	GLN	D	406	2989	3163	2270	-186	426	-1061	N
	ATOM	3283	C	GLN	D	406	53.732	-7.462	-24.252	1.00	24.34		C
45	ANISOU	3283	C	GLN	D	406	2853	4022	2375	-190	-45	-716	C
	ATOM	3284	O	GLN	D	406	53.072	-8.002	-25.126	1.00	26.35		O
	ANISOU	3284	O	GLN	D	406	3151	4349	2512	-230	-144	-835	O
	ATOM	3285	N	GLU	D	407	53.301	-6.400	-23.576	1.00	23.86		N
	ANISOU	3285	N	GLU	D	407	2683	4006	2376	-150	-80	-607	N
50	ATOM	3286	CA	GLU	D	407	51.981	-5.796	-23.788	1.00	25.52		C
	ANISOU	3286	CA	GLU	D	407	2793	4360	2543	-134	-232	-609	C
	ATOM	3287	CB	GLU	D	407	51.717	-4.639	-22.799	1.00	24.44		C
	ANISOU	3287	CB	GLU	D	407	2544	4227	2515	-71	-223	-490	C
	ATOM	3288	CG	GLU	D	407	51.472	-5.060	-21.360	1.00	25.08		C
55	ANISOU	3288	CG	GLU	D	407	2519	4243	2767	-157	-170	-504	C
	ATOM	3289	CD	GLU	D	407	50.431	-4.211	-20.650	1.00	25.93		C
	ANISOU	3289	CD	GLU	D	407	2476	4430	2946	-117	-219	-468	C
	ATOM	3290	OE1	GLU	D	407	49.823	-3.328	-21.282	1.00	30.67		O
	ANISOU	3290	OE1	GLU	D	407	3037	5131	3485	-17	-316	-436	O
60	ATOM	3291	OE2	GLU	D	407	50.193	-4.445	-19.455	1.00	24.61		O
	ANISOU	3291	OE2	GLU	D	407	2235	4224	2892	-177	-157	-471	O
	ATOM	3292	C	GLU	D	407	51.805	-5.244	-25.195	1.00	26.98		C
	ANISOU	3292	C	GLU	D	407	3072	4661	2517	-44	-322	-598	C
	ATOM	3293	O	GLU	D	407	52.719	-4.653	-25.768	1.00	26.51		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3293	O	GLU	D	407	3136	4577	2359	43	-236	-508	O
	ATOM	3294	N	ASP	D	408	50.596	-5.404	-25.710	1.00	29.10		N
	ANISOU	3294	N	ASP	D	408	3273	5062	2720	-68	-498	-681	N
	ATOM	3295	CA	ASP	D	408	50.199	-4.853	-27.013	1.00	31.78		C
5	ANISOU	3295	CA	ASP	D	408	3697	5539	2839	27	-637	-666	C
	ATOM	3296	CB	ASP	D	408	48.762	-5.265	-27.372	1.00	34.18		C
	ANISOU	3296	CB	ASP	D	408	3873	5992	3124	-31	-866	-792	C
	ATOM	3297	CG	ASP	D	408	48.348	-4.814	-28.781	1.00	39.52		C
	ANISOU	3297	CG	ASP	D	408	4655	6821	3538	70	-1048	-789	C
10	ATOM	3298	OD1	ASP	D	408	49.101	-5.101	-29.741	1.00	40.65		O
	ANISOU	3298	OD1	ASP	D	408	5022	6953	3469	91	-999	-816	O
	ATOM	3299	OD2	ASP	D	408	47.267	-4.173	-28.920	1.00	42.45		O
	ANISOU	3299	OD2	ASP	D	408	4889	7328	3911	139	-1240	-758	O
	ATOM	3300	C	ASP	D	408	50.353	-3.342	-27.114	1.00	30.90		C
15	ANISOU	3300	C	ASP	D	408	3607	5449	2686	185	-631	-478	C
	ATOM	3301	O	ASP	D	408	50.746	-2.852	-28.164	1.00	32.78		O
	ANISOU	3301	O	ASP	D	408	4008	5725	2721	275	-638	-408	O
	ATOM	3302	N	ACYS	D	409	50.067	-2.594	-26.052	0.50	29.14		N
	ANISOU	3302	N	ACYS	D	409	3243	5189	2642	219	-609	-394	N
20	ATOM	3303	N	BCYS	D	409	50.023	-2.637	-26.028	0.50	29.40		N
	ANISOU	3303	N	BCYS	D	409	3268	5224	2679	214	-613	-401	N
	ATOM	3304	CA	ACYS	D	409	50.211	-1.138	-26.143	0.50	29.02		C
	ANISOU	3304	CA	ACYS	D	409	3266	5159	2603	370	-605	-222	C
	ATOM	3305	CA	BCYS	D	409	50.202	-1.188	-25.910	0.50	29.33		C
25	ANISOU	3305	CA	BCYS	D	409	3279	5184	2680	356	-592	-230	C
	ATOM	3306	CB	ACYS	D	409	49.420	-0.405	-25.050	0.50	28.83		C
	ANISOU	3306	CB	ACYS	D	409	3056	5130	2766	418	-640	-186	C
	ATOM	3307	CB	BCYS	D	409	49.874	-0.714	-24.481	0.50	28.22		C
	ANISOU	3307	CB	BCYS	D	409	2976	4982	2765	357	-546	-204	C
30	ATOM	3308	SG	ACYS	D	409	50.276	-0.105	-23.502	0.50	27.27		S
	ANISOU	3308	SG	ACYS	D	409	2828	4756	2776	378	-445	-139	S
	ATOM	3309	SG	BCYS	D	409	48.105	-0.436	-24.090	0.50	33.35		S
	ANISOU	3309	SG	BCYS	D	409	3379	5779	3515	404	-720	-257	S
	ATOM	3310	C	ACYS	D	409	51.667	-0.658	-26.204	0.50	27.74		C
35	ANISOU	3310	C	ACYS	D	409	3260	4860	2420	395	-416	-104	C
	ATOM	3311	C	BCYS	D	409	51.624	-0.756	-26.258	0.50	28.09		C
	ANISOU	3311	C	BCYS	D	409	3304	4913	2455	389	-423	-117	C
	ATOM	3312	O	ACYS	D	409	51.933	0.433	-26.730	0.50	28.22		O
	ANISOU	3312	O	ACYS	D	409	3420	4902	2398	505	-407	42	O
40	ATOM	3313	O	BCYS	D	409	51.824	0.197	-27.026	0.50	28.90		O
	ANISOU	3313	O	BCYS	D	409	3525	5025	2431	499	-434	14	O
	ATOM	3314	N	MSE	D	410	52.594	-1.466	-25.672	1.00	25.88		N
	ANISOU	3314	N	MSE	D	410	3037	4523	2272	295	-268	-161	N
	ATOM	3315	CA	MSE	D	410	54.024	-1.213	-25.835	1.00	24.44		C
45	ANISOU	3315	CA	MSE	D	410	2971	4231	2082	304	-88	-74	C
	ATOM	3316	CB	MSE	D	410	54.833	-2.065	-24.854	1.00	22.88		C
	ANISOU	3316	CB	MSE	D	410	2718	3922	2054	208	32	-139	C
	ATOM	3317	CG	MSE	D	410	56.350	-1.955	-24.998	1.00	21.58		C
	ANISOU	3317	CG	MSE	D	410	2626	3656	1917	211	213	-70	C
50	ATOM	3318	SE	MSE	D	410	57.152	-3.307	-26.167	0.90	25.86		SE
	ANISOU	3318	SE	MSE	D	410	3301	4215	2311	188	331	-187	SE
	ATOM	3319	CE	MSE	D	410	56.323	-4.892	-25.393	1.00	24.10		C
	ANISOU	3319	CE	MSE	D	410	2993	3974	2189	79	226	-383	C
	ATOM	3320	C	MSE	D	410	54.468	-1.456	-27.290	1.00	26.13		C
55	ANISOU	3320	C	MSE	D	410	3363	4505	2058	335	-51	-73	C
	ATOM	3321	O	MSE	D	410	55.180	-0.626	-27.871	1.00	26.11		O
	ANISOU	3321	O	MSE	D	410	3474	4473	1973	398	47	65	O
	ATOM	3322	N	ILE	D	411	54.017	-2.573	-27.865	1.00	26.59		N
	ANISOU	3322	N	ILE	D	411	3456	4644	2004	284	-125	-229	N
60	ATOM	3323	CA	ILE	D	411	54.312	-2.938	-29.242	1.00	28.85		C
	ANISOU	3323	CA	ILE	D	411	3929	5002	2031	313	-103	-269	C
	ATOM	3324	CB	ILE	D	411	53.870	-4.398	-29.528	1.00	29.45		C
	ANISOU	3324	CB	ILE	D	411	4020	5117	2054	221	-180	-493	C
	ATOM	3325	CG1	ILE	D	411	54.922	-5.354	-28.950	1.00	30.86		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3325	CG1	ILE	D	411	4192	5151	2384	152	9	-568	C
	ATOM	3326	CD1	ILE	D	411	54.414	-6.711	-28.627	1.00	33.71		C
	ANISOU	3326	CD1	ILE	D	411	4508	5477	2824	40	-62	-761	C
	ATOM	3327	CG2	ILE	D	411	53.748	-4.648	-31.007	1.00	32.12		C
5	ANISOU	3327	CG2	ILE	D	411	4558	5571	2076	263	-237	-560	C
	ATOM	3328	C	ILE	D	411	53.726	-1.918	-30.235	1.00	30.57		C
	ANISOU	3328	C	ILE	D	411	4252	5336	2025	427	-227	-151	C
	ATOM	3329	O	ILE	D	411	54.376	-1.536	-31.219	1.00	31.47		O
	ANISOU	3329	O	ILE	D	411	4553	5470	1935	489	-128	-62	O
10	ATOM	3330	N	LYS	D	412	52.501	-1.477	-29.956	1.00	30.42		N
	ANISOU	3330	N	LYS	D	412	4112	5395	2052	462	-436	-143	N
	ATOM	3331	CA	LYS	D	412	51.861	-0.437	-30.741	1.00	32.14		C
	ANISOU	3331	CA	LYS	D	412	4405	5709	2097	595	-584	-13	C
	ATOM	3332	CB	LYS	D	412	50.356	-0.417	-30.473	1.00	32.55		C
15	ANISOU	3332	CB	LYS	D	412	4273	5878	2215	618	-846	-83	C
	ATOM	3333	CG	LYS	D	412	49.618	-1.672	-30.980	1.00	35.49		C
	ANISOU	3333	CG	LYS	D	412	4615	6379	2489	522	-1011	-302	C
	ATOM	3334	CD	LYS	D	412	49.784	-1.869	-32.495	1.00	37.96		C
	ANISOU	3334	CD	LYS	D	412	5179	6799	2444	570	-1080	-323	C
20	ATOM	3335	CE	LYS	D	412	48.933	-3.010	-33.017	1.00	41.23		C
	ANISOU	3335	CE	LYS	D	412	5565	7342	2760	474	-1290	-557	C
	ATOM	3336	NZ	LYS	D	412	49.410	-4.347	-32.577	1.00	40.94		N
	ANISOU	3336	NZ	LYS	D	412	5511	7204	2841	307	-1155	-748	N
	ATOM	3337	C	LYS	D	412	52.488	0.954	-30.564	1.00	31.37		C
25	ANISOU	3337	C	LYS	D	412	4368	5501	2052	689	-464	219	C
	ATOM	3338	O	LYS	D	412	52.263	1.832	-31.384	1.00	34.17		O
	ANISOU	3338	O	LYS	D	412	4853	5899	2228	808	-535	364	O
	ATOM	3339	N	ALA	D	413	53.283	1.145	-29.513	1.00	28.83		N
	ANISOU	3339	N	ALA	D	413	3961	5027	1966	633	-291	254	N
30	ATOM	3340	CA	ALA	D	413	54.009	2.413	-29.275	1.00	28.38		C
	ANISOU	3340	CA	ALA	D	413	3958	4834	1993	687	-162	453	C
	ATOM	3341	CB	ALA	D	413	54.311	2.582	-27.805	1.00	25.93		C
	ANISOU	3341	CB	ALA	D	413	3482	4390	1981	626	-91	433	C
	ATOM	3342	C	ALA	D	413	55.295	2.553	-30.097	1.00	29.23		C
35	ANISOU	3342	C	ALA	D	413	4248	4891	1969	672	54	557	C
	ATOM	3343	O	ALA	D	413	55.935	3.610	-30.084	1.00	29.28		O
	ANISOU	3343	O	ALA	D	413	4316	4781	2026	698	170	734	O
	ATOM	3344	N	VAL	D	414	55.681	1.491	-30.803	1.00	29.64		N
	ANISOU	3344	N	VAL	D	414	4382	5018	1860	624	122	442	N
40	ATOM	3345	CA	VAL	D	414	56.838	1.555	-31.696	1.00	31.53		C
	ANISOU	3345	CA	VAL	D	414	4796	5239	1947	622	349	527	C
	ATOM	3346	CB	VAL	D	414	57.244	0.153	-32.204	1.00	31.72		C
	ANISOU	3346	CB	VAL	D	414	4872	5330	1851	568	433	337	C
	ATOM	3347	CG1	VAL	D	414	58.299	0.242	-33.322	1.00	32.64		C
45	ANISOU	3347	CG1	VAL	D	414	5189	5463	1751	592	677	419	C
	ATOM	3348	CG2	VAL	D	414	57.755	-0.679	-31.067	1.00	26.96		C
	ANISOU	3348	CG2	VAL	D	414	4084	4628	1532	474	509	207	C
	ATOM	3349	C	VAL	D	414	56.567	2.486	-32.871	1.00	34.97		C
	ANISOU	3349	C	VAL	D	414	5447	5737	2103	730	311	706	C
50	ATOM	3350	O	VAL	D	414	55.529	2.404	-33.514	1.00	37.43		O
	ANISOU	3350	O	VAL	D	414	5833	6183	2206	804	94	673	O
	ATOM	3351	N	ARG	D	415	57.504	3.384	-33.133	1.00	37.13		N
	ANISOU	3351	N	ARG	D	415	5819	5909	2380	735	517	905	N
	ATOM	3352	CA	ARG	D	415	57.422	4.265	-34.293	1.00	41.20		C
55	ANISOU	3352	CA	ARG	D	415	6579	6461	2613	830	529	1110	C
	ATOM	3353	CB	ARG	D	415	57.470	5.732	-33.856	1.00	41.42		C
	ANISOU	3353	CB	ARG	D	415	6605	6324	2807	867	539	1341	C
	ATOM	3354	CG	ARG	D	415	56.268	6.184	-33.006	1.00	40.12		C
	ANISOU	3354	CG	ARG	D	415	6292	6136	2814	940	267	1312	C
60	ATOM	3355	CD	ARG	D	415	54.948	6.139	-33.791	1.00	40.78		C
	ANISOU	3355	CD	ARG	D	415	6465	6391	2638	1079	-17	1301	C
	ATOM	3356	NE	ARG	D	415	53.810	6.480	-32.938	1.00	40.08		N
	ANISOU	3356	NE	ARG	D	415	6189	6295	2746	1151	-253	1252	N
	ATOM	3357	CZ	ARG	D	415	53.013	5.596	-32.344	1.00	38.46		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3357	CZ	ARG	D	415	5779	6195	2639	1117	-410	1034	C
	ATOM	3358	NH1	ARG	D	415	53.202	4.298	-32.529	1.00	38.97		N
	ANISOU	3358	NH1	ARG	D	415	5819	6364	2626	1012	-379	843	N
	ATOM	3359	NH2	ARG	D	415	52.011	6.011	-31.573	1.00	36.41		N
5	ANISOU	3359	NH2	ARG	D	415	5342	5928	2563	1190	-586	1008	N
	ATOM	3360	C	ARG	D	415	58.551	3.952	-35.281	1.00	43.98		C
	ANISOU	3360	C	ARG	D	415	7110	6845	2756	796	815	1153	C
	ATOM	3361	O	ARG	D	415	59.724	3.892	-34.899	1.00	43.78		O
10	ANISOU	3361	O	ARG	D	415	6999	6716	2919	706	1074	1170	O
	ATOM	3362	N	GLY	D	416	58.191	3.744	-36.545	1.00	47.07		N
	ANISOU	3362	N	GLY	D	416	7743	7387	2756	874	766	1163	N
	ATOM	3363	CA	GLY	D	416	59.167	3.367	-37.555	1.00	50.12		C
	ANISOU	3363	CA	GLY	D	416	8322	7829	2894	856	1047	1180	C
	ATOM	3364	C	GLY	D	416	59.585	1.904	-37.482	1.00	49.71		C
15	ANISOU	3364	C	GLY	D	416	8192	7833	2861	793	1140	902	C
	ATOM	3365	O	GLY	D	416	59.098	1.128	-36.639	1.00	47.48		O
	ANISOU	3365	O	GLY	D	416	7713	7542	2783	750	976	701	O
	ATOM	3366	N	ASP	D	417	60.483	1.527	-38.386	1.00	52.34		N
20	ANISOU	3366	N	ASP	D	417	8692	8219	2976	793	1417	896	N
	ATOM	3367	CA	ASP	D	417	60.963	0.150	-38.487	1.00	52.48		C
	ANISOU	3367	CA	ASP	D	417	8681	8279	2981	761	1539	635	C
	ATOM	3368	CB	ASP	D	417	61.397	-0.171	-39.931	1.00	56.31		C
	ANISOU	3368	CB	ASP	D	417	9473	8894	3029	820	1741	619	C
	ATOM	3369	CG	ASP	D	417	60.213	-0.435	-40.865	1.00	59.32		C
25	ANISOU	3369	CG	ASP	D	417	10103	9446	2990	899	1447	528	C
	ATOM	3370	OD1	ASP	D	417	59.072	-0.585	-40.386	1.00	59.62		O
	ANISOU	3370	OD1	ASP	D	417	10036	9508	3109	898	1092	434	O
	ATOM	3371	OD2	ASP	D	417	60.426	-0.508	-42.095	1.00	65.27		O
30	ANISOU	3371	OD2	ASP	D	417	11157	10319	3324	961	1571	544	O
	ATOM	3372	C	ASP	D	417	62.098	-0.116	-37.495	1.00	49.99		C
	ANISOU	3372	C	ASP	D	417	8103	7818	3073	676	1773	604	C
	ATOM	3373	O	ASP	D	417	62.852	0.793	-37.130	1.00	49.00		O
	ANISOU	3373	O	ASP	D	417	7885	7587	3145	634	1948	804	O
35	ATOM	3374	N	LEU	D	418	62.205	-1.370	-37.064	1.00	48.76		N
	ANISOU	3374	N	LEU	D	418	7831	7652	3045	649	1760	353	N
	ATOM	3375	CA	LEU	D	418	63.263	-1.792	-36.159	1.00	47.10		C
	ANISOU	3375	CA	LEU	D	418	7377	7317	3201	592	1951	302	C
	ATOM	3376	CB	LEU	D	418	62.671	-2.523	-34.951	1.00	43.74		C
40	ANISOU	3376	CB	LEU	D	418	6747	6820	3051	545	1712	135	C
	ATOM	3377	CG	LEU	D	418	61.641	-1.770	-34.088	1.00	41.30		C
	ANISOU	3377	CG	LEU	D	418	6331	6480	2881	518	1426	222	C
	ATOM	3378	CD1	LEU	D	418	61.103	-2.653	-32.963	1.00	38.43		C
	ANISOU	3378	CD1	LEU	D	418	5787	6060	2756	466	1240	45	C
45	ATOM	3379	CD2	LEU	D	418	62.198	-0.471	-33.502	1.00	40.54		C
	ANISOU	3379	CD2	LEU	D	418	6125	6279	2999	488	1516	456	C
	ATOM	3380	C	LEU	D	418	64.314	-2.643	-36.873	1.00	49.82		C
	ANISOU	3380	C	LEU	D	418	7792	7692	3447	625	2264	186	C
	ATOM	3381	O	LEU	D	418	64.020	-3.727	-37.397	1.00	50.62		O
50	ANISOU	3381	O	LEU	D	418	8020	7854	3358	665	2228	-37	O
	ATOM	3382	N	ASN	D	419	65.543	-2.131	-36.890	1.00	51.58		N
	ANISOU	3382	N	ASN	D	419	7923	7863	3811	605	2578	331	N
	ATOM	3383	CA	ASN	D	419	66.641	-2.741	-37.637	1.00	55.38		C
	ANISOU	3383	CA	ASN	D	419	8453	8383	4204	650	2935	258	C
55	ATOM	3384	CB	ASN	D	419	66.810	-2.036	-38.993	1.00	59.00		C
	ANISOU	3384	CB	ASN	D	419	9195	8957	4265	688	3148	420	C
	ATOM	3385	CG	ASN	D	419	65.665	-2.308	-39.945	1.00	61.70		C
	ANISOU	3385	CG	ASN	D	419	9864	9436	4145	756	2933	329	C
	ATOM	3386	OD1	ASN	D	419	65.411	-3.454	-40.327	1.00	65.31		O
60	ANISOU	3386	OD1	ASN	D	419	10428	9949	4440	806	2887	70	O
	ATOM	3387	ND2	ASN	D	419	64.978	-1.249	-40.352	1.00	63.31		N
	ANISOU	3387	ND2	ASN	D	419	10234	9687	4135	763	2791	539	N
	ATOM	3388	C	ASN	D	419	67.967	-2.719	-36.875	1.00	55.20		C
	ANISOU	3388	C	ASN	D	419	8127	8253	4594	607	3178	304	C
	ATOM	3389	O	ASN	D	419	69.023	-2.657	-37.482	1.00	57.94		O



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3389	O	ASN	D	419	8467	8629	4917	625	3529	357	O
	ATOM	3390	N	PHE	D	420	67.907	-2.779	-35.544	1.00	53.13		N
	ANISOU	3390	N	PHE	D	420	7606	7875	4704	552	2988	281	N
	ATOM	3391	CA	PHE	D	420	69.109	-2.716	-34.699	1.00	52.97		C
5	ANISOU	3391	CA	PHE	D	420	7276	7755	5095	508	3151	324	C
	ATOM	3392	CB	PHE	D	420	68.768	-2.606	-33.210	1.00	49.23		C
	ANISOU	3392	CB	PHE	D	420	6582	7166	4956	444	2866	319	C
	ATOM	3393	CG	PHE	D	420	68.193	-1.287	-32.813	1.00	47.59		C
	ANISOU	3393	CG	PHE	D	420	6385	6920	4777	366	2702	511	C
10	ATOM	3394	CD1	PHE	D	420	66.832	-1.155	-32.549	1.00	44.55		C
	ANISOU	3394	CD1	PHE	D	420	6113	6548	4267	372	2390	485	C
	ATOM	3395	CE1	PHE	D	420	66.292	0.070	-32.189	1.00	42.45		C
	ANISOU	3395	CE1	PHE	D	420	5858	6235	4036	326	2247	653	C
	ATOM	3396	CZ	PHE	D	420	67.108	1.173	-32.079	1.00	44.31		C
15	ANISOU	3396	CZ	PHE	D	420	6013	6391	4434	255	2405	848	C
	ATOM	3397	CE2	PHE	D	420	68.467	1.060	-32.333	1.00	47.66		C
	ANISOU	3397	CE2	PHE	D	420	6314	6802	4991	223	2712	881	C
	ATOM	3398	CD2	PHE	D	420	69.007	-0.170	-32.699	1.00	48.65		C
	ANISOU	3398	CD2	PHE	D	420	6408	6994	5082	287	2863	713	C
20	ATOM	3399	C	PHE	D	420	70.044	-3.885	-34.897	1.00	55.24		C
	ANISOU	3399	C	PHE	D	420	7475	8045	5470	588	3382	148	C
	ATOM	3400	O	PHE	D	420	69.616	-5.017	-35.139	1.00	55.65		O
	ANISOU	3400	O	PHE	D	420	7645	8113	5387	664	3310	-68	O
	ATOM	3401	N	VAL	D	421	71.326	-3.572	-34.740	1.00	57.63		N
25	ANISOU	3401	N	VAL	D	421	7549	8317	6030	565	3651	242	N
	ATOM	3402	CA	VAL	D	421	72.446	-4.448	-35.036	1.00	60.77		C
	ANISOU	3402	CA	VAL	D	421	7821	8726	6542	654	3948	120	C
	ATOM	3403	CB	VAL	D	421	73.166	-3.930	-36.322	1.00	64.47		C
	ANISOU	3403	CB	VAL	D	421	8404	9304	6788	666	4360	236	C
30	ATOM	3404	CG1	VAL	D	421	74.630	-4.300	-36.367	1.00	67.05		C
	ANISOU	3404	CG1	VAL	D	421	8458	9632	7386	714	4721	208	C
	ATOM	3405	CG2	VAL	D	421	72.428	-4.388	-37.580	1.00	66.03		C
	ANISOU	3405	CG2	VAL	D	421	8997	9617	6475	754	4400	126	C
	ATOM	3406	C	VAL	D	421	73.361	-4.471	-33.799	1.00	60.35		C
35	ANISOU	3406	C	VAL	D	421	7378	8567	6985	619	3924	144	C
	ATOM	3407	O	VAL	D	421	73.403	-3.496	-33.045	1.00	58.87		O
	ANISOU	3407	O	VAL	D	421	7042	8323	7003	501	3800	305	O
	ATOM	3408	N	ASN	D	422	74.043	-5.593	-33.555	1.00	62.10		N
	ANISOU	3408	N	ASN	D	422	7446	8752	7397	728	4012	-23	N
40	ATOM	3409	CA	ASN	D	422	75.069	-5.636	-32.502	1.00	62.56		C
	ANISOU	3409	CA	ASN	D	422	7120	8730	7918	718	4012	6	C
	ATOM	3410	CB	ASN	D	422	75.045	-6.970	-31.720	1.00	61.54		C
	ANISOU	3410	CB	ASN	D	422	6907	8505	7969	834	3835	-189	C
	ATOM	3411	CG	ASN	D	422	75.460	-8.203	-32.559	1.00	64.42		C
45	ANISOU	3411	CG	ASN	D	422	7361	8885	8231	1012	4080	-391	C
	ATOM	3412	OD1	ASN	D	422	75.195	-9.336	-32.147	1.00	63.87		O
	ANISOU	3412	OD1	ASN	D	422	7329	8720	8219	1110	3933	-561	O
	ATOM	3413	ND2	ASN	D	422	76.118	-7.995	-33.700	1.00	67.10		N
	ANISOU	3413	ND2	ASN	D	422	7740	9330	8425	1055	4460	-372	N
50	ATOM	3414	C	ASN	D	422	76.469	-5.287	-33.033	1.00	66.36		C
	ANISOU	3414	C	ASN	D	422	7376	9270	8567	724	4415	91	C
	ATOM	3415	O	ASN	D	422	76.626	-4.987	-34.223	1.00	69.23		O
	ANISOU	3415	O	ASN	D	422	7905	9734	8666	733	4718	140	O
	ATOM	3416	N	ARG	D	423	77.475	-5.324	-32.158	1.00	67.11		N
55	ANISOU	3416	N	ARG	D	423	7093	9311	9095	719	4419	113	N
	ATOM	3417	CA	ARG	D	423	78.878	-5.054	-32.539	1.00	71.12		C
	ANISOU	3417	CA	ARG	D	423	7306	9875	9840	720	4794	183	C
	ATOM	3418	CB	ARG	D	423	79.805	-5.272	-31.338	1.00	70.83		C
	ANISOU	3418	CB	ARG	D	423	6839	9769	10305	731	4668	172	C
60	ATOM	3419	CG	ARG	D	423	81.105	-4.524	-31.468	1.00	75.85		C
	ANISOU	3419	CG	ARG	D	423	7115	10456	11248	641	4957	306	C
	ATOM	3420	CD	ARG	D	423	82.094	-4.875	-30.379	1.00	78.88		C
	ANISOU	3420	CD	ARG	D	423	7053	10793	12126	681	4832	269	C
	ATOM	3421	NE	ARG	D	423	83.449	-4.480	-30.778	1.00	83.39		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3421	NE	ARG	D	423	7254	11442	12987	644	5197	346	N
	ATOM	3422	CZ	ARG	D	423	84.346	-3.929	-29.962	1.00	85.30		C
	ANISOU	3422	CZ	ARG	D	423	7077	11667	13667	531	5116	429	C
	ATOM	3423	NH1	ARG	D	423	84.039	-3.684	-28.689	1.00	83.30		N
5	ANISOU	3423	NH1	ARG	D	423	6747	11320	13584	452	4676	442	N
	ATOM	3424	NH2	ARG	D	423	85.547	-3.606	-30.420	1.00	88.44		N
	ANISOU	3424	NH2	ARG	D	423	7128	12146	14328	490	5478	494	N
	ATOM	3425	C	ARG	D	423	79.401	-5.843	-33.761	1.00	74.67		C
	ANISOU	3425	C	ARG	D	423	7845	10417	10109	882	5200	61	C
10	ATOM	3426	O	ARG	D	423	80.280	-5.369	-34.493	1.00	78.15		O
	ANISOU	3426	O	ARG	D	423	8167	10945	10580	855	5588	155	O
	ATOM	3427	N	ALA	D	424	78.849	-7.036	-33.971	1.00	74.34		N
	ANISOU	3427	N	ALA	D	424	8018	10348	9879	1042	5120	-153	N
	ATOM	3428	CA	ALA	D	424	79.275	-7.945	-35.036	1.00	77.50		C
15	ANISOU	3428	CA	ALA	D	424	8532	10811	10104	1222	5468	-322	C
	ATOM	3429	CB	ALA	D	424	79.327	-9.375	-34.497	1.00	77.08		C
	ANISOU	3429	CB	ALA	D	424	8426	10642	10219	1410	5328	-554	C
	ATOM	3430	C	ALA	D	424	78.429	-7.881	-36.329	1.00	78.58		C
	ANISOU	3430	C	ALA	D	424	9131	11043	9682	1227	5589	-362	C
20	ATOM	3431	O	ALA	D	424	78.708	-8.612	-37.287	1.00	81.61		O
	ANISOU	3431	O	ALA	D	424	9666	11484	9858	1375	5881	-520	O
	ATOM	3432	N	ASN	D	425	77.396	-7.032	-36.340	1.00	76.24		N
	ANISOU	3432	N	ASN	D	425	9062	10762	9143	1081	5352	-230	N
	ATOM	3433	CA	ASN	D	425	76.541	-6.773	-37.531	1.00	77.06		C
25	ANISOU	3433	CA	ASN	D	425	9601	10971	8708	1070	5413	-224	C
	ATOM	3434	CB	ASN	D	425	77.382	-6.619	-38.817	1.00	81.53		C
	ANISOU	3434	CB	ASN	D	425	10245	11670	9062	1128	5927	-191	C
	ATOM	3435	CG	ASN	D	425	76.892	-5.487	-39.721	1.00	82.66		C
	ANISOU	3435	CG	ASN	D	425	10683	11919	8803	1017	6017	23	C
30	ATOM	3436	OD1	ASN	D	425	75.842	-4.884	-39.484	1.00	79.73		O
	ANISOU	3436	OD1	ASN	D	425	10484	11524	8284	921	5681	122	O
	ATOM	3437	ND2	ASN	D	425	77.670	-5.189	-40.763	1.00	87.19		N
	ANISOU	3437	ND2	ASN	D	425	11314	12609	9204	1038	6484	104	N
	ATOM	3438	C	ASN	D	425	75.343	-7.727	-37.759	1.00	75.53		C
35	ANISOU	3438	C	ASN	D	425	9745	10754	8199	1149	5142	-450	C
	ATOM	3439	O	ASN	D	425	74.857	-7.888	-38.889	1.00	77.60		O
	ANISOU	3439	O	ASN	D	425	10357	11113	8012	1196	5244	-527	O
	ATOM	3440	N	GLN	D	426	74.866	-8.349	-36.685	1.00	72.05		N
	ANISOU	3440	N	GLN	D	426	9203	10184	7987	1153	4795	-555	N
40	ATOM	3441	CA	GLN	D	426	73.650	-9.164	-36.756	1.00	70.27		C
	ANISOU	3441	CA	GLN	D	426	9262	9919	7517	1181	4501	-748	C
	ATOM	3442	CB	GLN	D	426	73.803	-10.451	-35.941	1.00	69.42		C
	ANISOU	3442	CB	GLN	D	426	9024	9655	7697	1280	4372	-950	C
	ATOM	3443	CG	GLN	D	426	74.946	-11.353	-36.387	1.00	73.99		C
45	ANISOU	3443	CG	GLN	D	426	9510	10209	8392	1461	4723	-1107	C
	ATOM	3444	CD	GLN	D	426	75.603	-12.085	-35.226	1.00	74.03		C
	ANISOU	3444	CD	GLN	D	426	9200	10055	8872	1543	4632	-1157	C
	ATOM	3445	OE1	GLN	D	426	75.551	-11.640	-34.081	1.00	71.79		O
	ANISOU	3445	OE1	GLN	D	426	8697	9713	8868	1449	4387	-1016	O
50	ATOM	3446	NE2	GLN	D	426	76.238	-13.210	-35.525	1.00	76.73		N
	ANISOU	3446	NE2	GLN	D	426	9532	10324	9297	1733	4831	-1361	N
	ATOM	3447	C	GLN	D	426	72.469	-8.361	-36.228	1.00	66.34		C
	ANISOU	3447	C	GLN	D	426	8844	9421	6942	1033	4126	-613	C
	ATOM	3448	O	GLN	D	426	72.648	-7.428	-35.444	1.00	64.20		O
55	ANISOU	3448	O	GLN	D	426	8361	9122	6912	930	4038	-414	O
	ATOM	3449	N	ARG	D	427	71.267	-8.715	-36.673	1.00	65.24		N
	ANISOU	3449	N	ARG	D	427	9004	9310	6472	1027	3906	-733	N
	ATOM	3450	CA	ARG	D	427	70.051	-8.191	-36.069	1.00	61.55		C
	ANISOU	3450	CA	ARG	D	427	8583	8831	5972	913	3523	-653	C
60	ATOM	3451	CB	ARG	D	427	68.814	-8.575	-36.886	1.00	62.29		C
	ANISOU	3451	CB	ARG	D	427	9018	9000	5650	917	3336	-797	C
	ATOM	3452	CG	ARG	D	427	68.261	-7.481	-37.795	1.00	64.44		C
	ANISOU	3452	CG	ARG	D	427	9512	9421	5551	879	3327	-631	C
	ATOM	3453	CD	ARG	D	427	66.962	-7.945	-38.473	1.00	65.91		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3453	CD	ARG	D	427	10000	9683	5358	883	3067	-794	C
	ATOM	3454	NE	ARG	D	427	65.923	-8.303	-37.500	1.00	66.69		N
	ANISOU	3454	NE	ARG	D	427	10003	9701	5634	809	2687	-872	N
	ATOM	3455	CZ	ARG	D	427	64.760	-7.663	-37.349	1.00	67.25		C
5	ANISOU	3455	CZ	ARG	D	427	10120	9829	5603	741	2381	-785	C
	ATOM	3456	NH1	ARG	D	427	64.467	-6.631	-38.135	1.00	69.18		N
	ANISOU	3456	NH1	ARG	D	427	10527	10201	5557	750	2385	-613	N
	ATOM	3457	NH2	ARG	D	427	63.886	-8.059	-36.414	1.00	63.74		N
10	ANISOU	3457	NH2	ARG	D	427	9559	9311	5349	671	2080	-864	N
	ATOM	3458	C	ARG	D	427	69.909	-8.721	-34.642	1.00	57.19		C
	ANISOU	3458	C	ARG	D	427	7803	8128	5798	883	3273	-704	C
	ATOM	3459	O	ARG	D	427	70.103	-9.914	-34.377	1.00	57.69		O
	ANISOU	3459	O	ARG	D	427	7840	8092	5987	959	3269	-894	O
	ATOM	3460	N	LEU	D	428	69.595	-7.815	-33.724	1.00	52.80		N
15	ANISOU	3460	N	LEU	D	428	7098	7547	5418	778	3076	-527	N
	ATOM	3461	CA	LEU	D	428	69.144	-8.185	-32.399	1.00	48.04		C
	ANISOU	3461	CA	LEU	D	428	6348	6827	5079	732	2792	-559	C
	ATOM	3462	CB	LEU	D	428	68.918	-6.930	-31.545	1.00	45.72		C
	ANISOU	3462	CB	LEU	D	428	5911	6527	4933	622	2636	-347	C
20	ATOM	3463	CG	LEU	D	428	70.023	-5.875	-31.426	1.00	45.49		C
	ANISOU	3463	CG	LEU	D	428	5686	6505	5093	586	2834	-153	C
	ATOM	3464	CD1	LEU	D	428	69.597	-4.802	-30.425	1.00	41.45		C
	ANISOU	3464	CD1	LEU	D	428	5066	5948	4733	475	2612	4	C
	ATOM	3465	CD2	LEU	D	428	71.353	-6.491	-31.016	1.00	45.37		C
25	ANISOU	3465	CD2	LEU	D	428	5422	6426	5391	651	3013	-200	C
	ATOM	3466	C	LEU	D	428	67.846	-8.982	-32.525	1.00	46.17		C
	ANISOU	3466	C	LEU	D	428	6321	6580	4642	717	2547	-732	C
	ATOM	3467	O	LEU	D	428	67.099	-8.802	-33.495	1.00	46.00		O
30	ANISOU	3467	O	LEU	D	428	6533	6665	4279	710	2512	-766	O
	ATOM	3468	N	ASN	D	429	67.587	-9.863	-31.556	1.00	43.68		N
	ANISOU	3468	N	ASN	D	429	5922	6137	4538	708	2374	-834	N
	ATOM	3469	CA	ASN	D	429	66.288	-10.534	-31.500	1.00	42.36		C
	ANISOU	3469	CA	ASN	D	429	5910	5947	4237	654	2121	-976	C
	ATOM	3470	CB	ASN	D	429	66.290	-11.755	-30.550	1.00	41.80		C
35	ANISOU	3470	CB	ASN	D	429	5766	5699	4415	662	2019	-1102	C
	ATOM	3471	CG	ASN	D	429	66.394	-11.396	-29.062	1.00	40.02		C
	ANISOU	3471	CG	ASN	D	429	5314	5396	4495	608	1878	-956	C
	ATOM	3472	OD1	ASN	D	429	66.177	-10.270	-28.644	1.00	40.08		O
	ANISOU	3472	OD1	ASN	D	429	5232	5473	4524	542	1798	-792	O
40	ATOM	3473	ND2	ASN	D	429	66.713	-12.395	-28.251	1.00	41.75		N
	ANISOU	3473	ND2	ASN	D	429	5463	5458	4943	644	1840	-1024	N
	ATOM	3474	C	ASN	D	429	65.147	-9.524	-31.230	1.00	39.73		C
	ANISOU	3474	C	ASN	D	429	5590	5701	3805	548	1883	-849	C
	ATOM	3475	O	ASN	D	429	65.412	-8.410	-30.755	1.00	37.87		O
45	ANISOU	3475	O	ASN	D	429	5221	5490	3678	516	1887	-655	O
	ATOM	3476	N	PRO	D	430	63.894	-9.878	-31.600	1.00	39.17		N
	ANISOU	3476	N	PRO	D	430	5679	5677	3529	497	1681	-965	N
	ATOM	3477	CA	PRO	D	430	62.734	-8.984	-31.432	1.00	37.02		C
	ANISOU	3477	CA	PRO	D	430	5410	5497	3159	420	1451	-863	C
50	ATOM	3478	CB	PRO	D	430	61.553	-9.913	-31.669	1.00	37.39		C
	ANISOU	3478	CB	PRO	D	430	5577	5550	3079	364	1242	-1062	C
	ATOM	3479	CG	PRO	D	430	62.081	-10.877	-32.687	1.00	40.79		C
	ANISOU	3479	CG	PRO	D	430	6190	5964	3346	432	1404	-1251	C
	ATOM	3480	CD	PRO	D	430	63.507	-11.136	-32.276	1.00	40.91		C
55	ANISOU	3480	CD	PRO	D	430	6084	5865	3594	513	1659	-1213	C
	ATOM	3481	C	PRO	D	430	62.622	-8.261	-30.087	1.00	33.75		C
	ANISOU	3481	C	PRO	D	430	4783	5029	3011	363	1338	-704	C
	ATOM	3482	O	PRO	D	430	62.364	-7.059	-30.075	1.00	33.39		O
	ANISOU	3482	O	PRO	D	430	4712	5054	2922	350	1292	-543	O
60	ATOM	3483	N	MSE	D	431	62.848	-8.958	-28.971	1.00	31.86		N
	ANISOU	3483	N	MSE	D	431	4412	4658	3035	338	1298	-746	N
	ATOM	3484	CA	MSE	D	431	62.743	-8.348	-27.632	1.00	28.73		C
	ANISOU	3484	CA	MSE	D	431	3838	4212	2866	286	1187	-615	C
	ATOM	3485	CB	MSE	D	431	62.750	-9.420	-26.522	1.00	27.66		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3485	CB	MSE	D	431	3625	3936	2949	257	1113	-693	C
	ATOM	3486	CG	MSE	D	431	61.493	-10.315	-26.470	1.00	27.35		C
	ANISOU	3486	CG	MSE	D	431	3673	3880	2840	179	946	-835	C
	ATOM	3487	SE	MSE	D	431	59.849	-9.332	-26.102	0.90	31.03		SE
5	ANISOU	3487	SE	MSE	D	431	4095	4475	3220	81	709	-763	SE
	ATOM	3488	CE	MSE	D	431	60.279	-8.893	-24.268	1.00	22.81		C
	ANISOU	3488	CE	MSE	D	431	2865	3332	2469	58	684	-614	C
	ATOM	3489	C	MSE	D	431	63.805	-7.287	-27.358	1.00	28.34		C
	ANISOU	3489	C	MSE	D	431	3663	4159	2948	313	1319	-441	C
10	ATOM	3490	O	MSE	D	431	63.527	-6.285	-26.719	1.00	26.80		O
	ANISOU	3490	O	MSE	D	431	3388	3975	2822	271	1226	-314	O
	ATOM	3491	N	HIS	D	432	65.023	-7.514	-27.840	1.00	30.47		N
	ANISOU	3491	N	HIS	D	432	3907	4407	3264	380	1540	-445	N
	ATOM	3492	CA	HIS	D	432	66.103	-6.525	-27.751	1.00	31.28		C
15	ANISOU	3492	CA	HIS	D	432	3877	4513	3497	388	1692	-287	C
	ATOM	3493	CB	HIS	D	432	67.466	-7.225	-27.838	1.00	32.69		C
	ANISOU	3493	CB	HIS	D	432	3946	4634	3841	464	1905	-335	C
	ATOM	3494	CG	HIS	D	432	67.822	-7.950	-26.579	1.00	33.74		C
	ANISOU	3494	CG	HIS	D	432	3924	4646	4251	475	1799	-373	C
20	ATOM	3495	ND1	HIS	D	432	67.295	-9.184	-26.261	1.00	34.66		N
	ANISOU	3495	ND1	HIS	D	432	4117	4682	4371	496	1690	-514	N
	ATOM	3496	CE1	HIS	D	432	67.748	-9.561	-25.077	1.00	34.47		C
	ANISOU	3496	CE1	HIS	D	432	3947	4553	4597	508	1603	-490	C
	ATOM	3497	NE2	HIS	D	432	68.534	-8.608	-24.606	1.00	33.88		N
25	ANISOU	3497	NE2	HIS	D	432	3695	4499	4680	491	1632	-354	N
	ATOM	3498	CD2	HIS	D	432	68.587	-7.583	-25.521	1.00	33.50		C
	ANISOU	3498	CD2	HIS	D	432	3682	4555	4490	461	1760	-279	C
	ATOM	3499	C	HIS	D	432	65.961	-5.388	-28.772	1.00	32.02		C
	ANISOU	3499	C	HIS	D	432	4081	4712	3373	380	1782	-166	C
30	ATOM	3500	O	HIS	D	432	66.410	-4.265	-28.541	1.00	31.60		O
	ANISOU	3500	O	HIS	D	432	3939	4650	3418	343	1831	-4	O
	ATOM	3501	N	GLN	D	433	65.317	-5.703	-29.889	1.00	33.25		N
	ANISOU	3501	N	GLN	D	433	4447	4957	3229	412	1790	-247	N
	ATOM	3502	CA	GLN	D	433	64.893	-4.737	-30.897	1.00	34.81		C
35	ANISOU	3502	CA	GLN	D	433	4806	5264	3155	417	1816	-136	C
	ATOM	3503	CB	GLN	D	433	64.124	-5.526	-31.969	1.00	37.14		C
	ANISOU	3503	CB	GLN	D	433	5332	5652	3127	458	1766	-297	C
	ATOM	3504	CG	GLN	D	433	64.229	-5.159	-33.425	1.00	40.17		C
	ANISOU	3504	CG	GLN	D	433	5942	6157	3166	513	1917	-256	C
40	ATOM	3505	CD	GLN	D	433	65.636	-4.990	-33.941	1.00	42.73		C
	ANISOU	3505	CD	GLN	D	433	6242	6477	3518	553	2269	-184	C
	ATOM	3506	OE1	GLN	D	433	66.081	-3.868	-34.122	1.00	42.34		O
	ANISOU	3506	OE1	GLN	D	433	6173	6441	3473	532	2393	22	O
	ATOM	3507	NE2	GLN	D	433	66.331	-6.095	-34.227	1.00	44.78		N
45	ANISOU	3507	NE2	GLN	D	433	6506	6712	3797	612	2445	-355	N
	ATOM	3508	C	GLN	D	433	63.985	-3.705	-30.188	1.00	33.00		C
	ANISOU	3508	C	GLN	D	433	4532	5029	2979	363	1591	-12	C
	ATOM	3509	O	GLN	D	433	64.238	-2.508	-30.244	1.00	33.66		O
	ANISOU	3509	O	GLN	D	433	4602	5106	3081	347	1644	167	O
50	ATOM	3510	N	LEU	D	434	62.956	-4.188	-29.488	1.00	30.54		N
	ANISOU	3510	N	LEU	D	434	4191	4705	2709	334	1355	-111	N
	ATOM	3511	CA	LEU	D	434	62.019	-3.349	-28.723	1.00	28.54		C
	ANISOU	3511	CA	LEU	D	434	3877	4447	2519	298	1147	-27	C
	ATOM	3512	CB	LEU	D	434	60.860	-4.193	-28.170	1.00	26.57		C
55	ANISOU	3512	CB	LEU	D	434	3605	4209	2281	263	932	-173	C
	ATOM	3513	CG	LEU	D	434	59.960	-4.841	-29.225	1.00	28.19		C
	ANISOU	3513	CG	LEU	D	434	3969	4522	2219	278	838	-304	C
	ATOM	3514	CD1	LEU	D	434	59.179	-6.004	-28.622	1.00	25.09		C
	ANISOU	3514	CD1	LEU	D	434	3526	4099	1908	213	690	-476	C
60	ATOM	3515	CD2	LEU	D	434	59.035	-3.808	-29.879	1.00	26.55		C
	ANISOU	3515	CD2	LEU	D	434	3849	4430	1809	316	706	-203	C
	ATOM	3516	C	LEU	D	434	62.664	-2.581	-27.568	1.00	27.04		C
	ANISOU	3516	C	LEU	D	434	3514	4152	2609	258	1167	91	C
	ATOM	3517	O	LEU	D	434	62.423	-1.387	-27.390	1.00	25.53		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3517	O	LEU	D	434	3318	3948	2436	251	1119	227	O
	ATOM	3518	N	LEU	D	435	63.462	-3.285	-26.775	1.00	26.54		N
	ANISOU	3518	N	LEU	D	435	3318	4005	2760	239	1220	31	N
	ATOM	3519	CA	LEU	D	435	64.256	-2.688	-25.702	1.00	26.16		C
5	ANISOU	3519	CA	LEU	D	435	3103	3862	2975	200	1234	119	C
	ATOM	3520	CB	LEU	D	435	65.092	-3.789	-25.043	1.00	25.47		C
	ANISOU	3520	CB	LEU	D	435	2895	3705	3077	208	1276	27	C
	ATOM	3521	CG	LEU	D	435	65.725	-3.556	-23.679	1.00	24.89		C
	ANISOU	3521	CG	LEU	D	435	2647	3540	3271	171	1207	70	C
10	ATOM	3522	CD1	LEU	D	435	64.682	-3.442	-22.582	1.00	20.95		C
	ANISOU	3522	CD1	LEU	D	435	2152	3019	2787	132	993	52	C
	ATOM	3523	CD2	LEU	D	435	66.673	-4.719	-23.380	1.00	26.46		C
	ANISOU	3523	CD2	LEU	D	435	2748	3683	3624	217	1274	-9	C
	ATOM	3524	C	LEU	D	435	65.136	-1.488	-26.142	1.00	27.72		C
15	ANISOU	3524	C	LEU	D	435	3277	4043	3215	183	1392	280	C
	ATOM	3525	O	LEU	D	435	65.062	-0.432	-25.523	1.00	27.64		O
	ANISOU	3525	O	LEU	D	435	3216	3976	3311	140	1321	381	O
	ATOM	3526	N	ARG	D	436	65.954	-1.635	-27.191	1.00	30.12		N
	ANISOU	3526	N	ARG	D	436	3621	4384	3438	211	1617	302	N
20	ATOM	3527	CA	ARG	D	436	66.820	-0.532	-27.661	1.00	32.34		C
	ANISOU	3527	CA	ARG	D	436	3877	4644	3766	175	1803	469	C
	ATOM	3528	CB	ARG	D	436	67.825	-0.970	-28.749	1.00	34.74		C
	ANISOU	3528	CB	ARG	D	436	4200	5003	3997	211	2095	466	C
	ATOM	3529	CG	ARG	D	436	68.788	-2.119	-28.428	1.00	38.82		C
25	ANISOU	3529	CG	ARG	D	436	4552	5499	4700	249	2201	339	C
	ATOM	3530	CD	ARG	D	436	69.651	-1.978	-27.166	1.00	45.47		C
	ANISOU	3530	CD	ARG	D	436	5125	6244	5908	197	2148	361	C
	ATOM	3531	NE	ARG	D	436	70.087	-3.302	-26.682	1.00	50.46		N
	ANISOU	3531	NE	ARG	D	436	5647	6850	6677	269	2131	214	N
30	ATOM	3532	CZ	ARG	D	436	70.128	-3.695	-25.402	1.00	51.20		C
	ANISOU	3532	CZ	ARG	D	436	5607	6868	6978	261	1938	168	C
	ATOM	3533	NH1	ARG	D	436	69.776	-2.873	-24.420	1.00	50.06		N
	ANISOU	3533	NH1	ARG	D	436	5415	6676	6930	180	1748	238	N
	ATOM	3534	NH2	ARG	D	436	70.533	-4.928	-25.097	1.00	53.27		N
35	ANISOU	3534	NH2	ARG	D	436	5801	7095	7346	344	1938	52	N
	ATOM	3535	C	ARG	D	436	66.028	0.663	-28.204	1.00	32.58		C
	ANISOU	3535	C	ARG	D	436	4070	4692	3616	169	1749	610	C
	ATOM	3536	O	ARG	D	436	66.482	1.801	-28.113	1.00	33.26		O
	ANISOU	3536	O	ARG	D	436	4125	4705	3810	112	1815	763	O
40	ATOM	3537	N	HIS	D	437	64.874	0.396	-28.813	1.00	32.38		N
	ANISOU	3537	N	HIS	D	437	4222	4757	3325	230	1627	560	N
	ATOM	3538	CA	HIS	D	437	63.992	1.447	-29.316	1.00	32.23		C
	ANISOU	3538	CA	HIS	D	437	4358	4760	3127	257	1533	689	C
	ATOM	3539	CB	HIS	D	437	62.776	0.835	-29.996	1.00	32.33		C
45	ANISOU	3539	CB	HIS	D	437	4528	4902	2856	329	1377	588	C
	ATOM	3540	CG	HIS	D	437	61.792	1.845	-30.505	1.00	32.58		C
	ANISOU	3540	CG	HIS	D	437	4705	4969	2705	384	1241	716	C
	ATOM	3541	ND1	HIS	D	437	62.005	2.587	-31.652	1.00	33.44		N
	ANISOU	3541	ND1	HIS	D	437	5004	5109	2594	423	1364	882	N
50	ATOM	3542	CE1	HIS	D	437	60.975	3.389	-31.850	1.00	32.84		C
	ANISOU	3542	CE1	HIS	D	437	5028	5050	2399	489	1178	978	C
	ATOM	3543	NE2	HIS	D	437	60.100	3.192	-30.877	1.00	31.03		N
	ANISOU	3543	NE2	HIS	D	437	4663	4812	2316	493	955	869	N
	ATOM	3544	CD2	HIS	D	437	60.589	2.233	-30.023	1.00	28.67		C
55	ANISOU	3544	CD2	HIS	D	437	4193	4482	2217	419	996	711	C
	ATOM	3545	C	HIS	D	437	63.529	2.367	-28.191	1.00	31.00		C
	ANISOU	3545	C	HIS	D	437	4111	4501	3166	224	1360	750	C
	ATOM	3546	O	HIS	D	437	63.642	3.606	-28.303	1.00	31.79		O
	ANISOU	3546	O	HIS	D	437	4259	4524	3297	208	1393	917	O
60	ATOM	3547	N	PHE	D	438	63.015	1.763	-27.119	1.00	28.21		N
	ANISOU	3547	N	PHE	D	438	3643	4136	2938	213	1191	616	N
	ATOM	3548	CA	PHE	D	438	62.438	2.523	-26.020	1.00	27.04		C
	ANISOU	3548	CA	PHE	D	438	3427	3908	2940	198	1026	640	C
	ATOM	3549	CB	PHE	D	438	61.377	1.704	-25.284	1.00	24.52		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3549	CB	PHE	D	438	3057	3643	2616	215	836	490	C
	ATOM	3550	CG	PHE	D	438	60.176	1.379	-26.140	1.00	23.90		C
	ANISOU	3550	CG	PHE	D	438	3093	3692	2294	282	727	446	C
	ATOM	3551	CD1	PHE	D	438	59.391	2.399	-26.676	1.00	23.65		C
5	ANISOU	3551	CD1	PHE	D	438	3161	3687	2138	351	643	555	C
	ATOM	3552	CE1	PHE	D	438	58.280	2.110	-27.459	1.00	24.54		C
	ANISOU	3552	CE1	PHE	D	438	3360	3932	2032	417	509	512	C
	ATOM	3553	CZ	PHE	D	438	57.941	0.772	-27.715	1.00	25.28		C
	ANISOU	3553	CZ	PHE	D	438	3448	4125	2034	392	465	343	C
10	ATOM	3554	CE2	PHE	D	438	58.734	-0.261	-27.196	1.00	23.25		C
	ANISOU	3554	CE2	PHE	D	438	3113	3818	1903	320	569	233	C
	ATOM	3555	CD2	PHE	D	438	59.836	0.052	-26.416	1.00	22.04		C
	ANISOU	3555	CD2	PHE	D	438	2868	3543	1964	276	694	292	C
	ATOM	3556	C	PHE	D	438	63.462	3.158	-25.072	1.00	27.33		C
15	ANISOU	3556	C	PHE	D	438	3326	3806	3251	116	1082	694	C
	ATOM	3557	O	PHE	D	438	63.182	4.188	-24.467	1.00	27.54		O
	ANISOU	3557	O	PHE	D	438	3351	3740	3375	103	998	758	O
	ATOM	3558	N	GLN	D	439	64.639	2.551	-24.975	1.00	27.93		N
	ANISOU	3558	N	GLN	D	439	3289	3867	3455	69	1218	661	N
20	ATOM	3559	CA	GLN	D	439	65.790	3.129	-24.318	1.00	28.89		C
	ANISOU	3559	CA	GLN	D	439	3266	3877	3835	-18	1287	717	C
	ATOM	3560	CB	GLN	D	439	66.920	2.062	-24.200	1.00	29.69		C
	ANISOU	3560	CB	GLN	D	439	3213	4002	4067	-32	1401	637	C
	ATOM	3561	CG	GLN	D	439	66.621	0.950	-23.141	1.00	26.15		C
25	ANISOU	3561	CG	GLN	D	439	2686	3563	3686	-6	1239	487	C
	ATOM	3562	CD	GLN	D	439	67.662	-0.160	-23.094	1.00	28.79		C
	ANISOU	3562	CD	GLN	D	439	2888	3909	4142	14	1338	414	C
	ATOM	3563	OE1	GLN	D	439	68.317	-0.497	-24.104	1.00	32.54		O
	ANISOU	3563	OE1	GLN	D	439	3363	4430	4572	44	1542	425	O
30	ATOM	3564	NE2	GLN	D	439	67.822	-0.748	-21.912	1.00	28.30		N
	ANISOU	3564	NE2	GLN	D	439	2720	3805	4230	12	1198	340	N
	ATOM	3565	C	GLN	D	439	66.284	4.385	-25.045	1.00	31.94		C
	ANISOU	3565	C	GLN	D	439	3715	4193	4229	-65	1434	895	C
	ATOM	3566	O	GLN	D	439	66.781	5.320	-24.410	1.00	32.63		O
35	ANISOU	3566	O	GLN	D	439	3727	4152	4519	-149	1421	959	O
	ATOM	3567	N	LYS	D	440	66.162	4.415	-26.374	1.00	34.31		N
	ANISOU	3567	N	LYS	D	440	4167	4567	4301	-18	1575	976	N
	ATOM	3568	CA	LYS	D	440	66.529	5.601	-27.135	1.00	37.03		C
	ANISOU	3568	CA	LYS	D	440	4613	4841	4618	-60	1725	1173	C
40	ATOM	3569	CB	LYS	D	440	66.617	5.319	-28.642	1.00	39.69		C
	ANISOU	3569	CB	LYS	D	440	5117	5293	4672	-5	1921	1245	C
	ATOM	3570	CG	LYS	D	440	67.882	4.548	-29.032	1.00	43.01		C
	ANISOU	3570	CG	LYS	D	440	5411	5768	5163	-42	2176	1205	C
	ATOM	3571	CD	LYS	D	440	68.388	4.877	-30.420	1.00	49.43		C
45	ANISOU	3571	CD	LYS	D	440	6372	6631	5777	-42	2461	1354	C
	ATOM	3572	CE	LYS	D	440	69.683	4.104	-30.681	1.00	52.40		C
	ANISOU	3572	CE	LYS	D	440	6580	7061	6271	-70	2732	1294	C
	ATOM	3573	NZ	LYS	D	440	70.294	4.407	-32.006	1.00	56.62		N
	ANISOU	3573	NZ	LYS	D	440	7243	7651	6617	-78	3064	1439	N
50	ATOM	3574	C	LYS	D	440	65.556	6.741	-26.849	1.00	36.89		C
	ANISOU	3574	C	LYS	D	440	4715	4726	4575	-33	1555	1259	C
	ATOM	3575	O	LYS	D	440	65.993	7.846	-26.543	1.00	37.86		O
	ANISOU	3575	O	LYS	D	440	4824	4692	4869	-113	1589	1372	O
	ATOM	3576	N	ASP	D	441	64.250	6.442	-26.917	1.00	35.37		N
55	ANISOU	3576	N	ASP	D	441	4626	4620	4192	79	1370	1193	N
	ATOM	3577	CA	ASP	D	441	63.183	7.396	-26.655	1.00	34.86		C
	ANISOU	3577	CA	ASP	D	441	4660	4486	4100	145	1196	1252	C
	ATOM	3578	CB	ASP	D	441	62.914	8.221	-27.913	1.00	37.92		C
	ANISOU	3578	CB	ASP	D	441	5267	4866	4275	207	1267	1450	C
60	ATOM	3579	CG	ASP	D	441	61.804	9.261	-27.730	1.00	40.30		C
	ANISOU	3579	CG	ASP	D	441	5676	5081	4554	307	1084	1529	C
	ATOM	3580	OD1	ASP	D	441	61.425	9.618	-26.576	1.00	39.22		O
	ANISOU	3580	OD1	ASP	D	441	5443	4850	4609	306	947	1449	O
	ATOM	3581	OD2	ASP	D	441	61.301	9.721	-28.784	1.00	45.16		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3581	OD2	ASP	D	441	6486	5729	4944	401	1080	1674	O
	ATOM	3582	C	ASP	D	441	61.900	6.717	-26.136	1.00	32.31		C
	ANISOU	3582	C	ASP	D	441	4311	4270	3697	235	971	1096	C
	ATOM	3583	O	ASP	D	441	61.199	6.013	-26.871	1.00	32.02		O
5	ANISOU	3583	O	ASP	D	441	4348	4382	3436	310	920	1048	O
	ATOM	3584	N	ALA	D	442	61.576	6.945	-24.867	1.00	29.74		N
	ANISOU	3584	N	ALA	D	442	3881	3867	3552	220	839	1014	N
	ATOM	3585	CA	ALA	D	442	60.377	6.300	-24.287	1.00	27.57		C
	ANISOU	3585	CA	ALA	D	442	3558	3693	3225	289	658	871	C
10	ATOM	3586	CB	ALA	D	442	60.695	5.663	-22.929	1.00	24.90		C
	ANISOU	3586	CB	ALA	D	442	3063	3329	3068	217	615	728	C
	ATOM	3587	C	ALA	D	442	59.104	7.154	-24.217	1.00	27.63		C
	ANISOU	3587	C	ALA	D	442	3630	3685	3182	404	506	909	C
	ATOM	3588	O	ALA	D	442	58.109	6.710	-23.648	1.00	27.53		O
15	ANISOU	3588	O	ALA	D	442	3547	3753	3160	452	372	793	O
	ATOM	3589	N	LYS	D	443	59.122	8.344	-24.818	1.00	29.38		N
	ANISOU	3589	N	LYS	D	443	3983	3804	3377	452	535	1077	N
	ATOM	3590	CA	LYS	D	443	57.985	9.293	-24.817	1.00	30.50		C
	ANISOU	3590	CA	LYS	D	443	4196	3903	3492	591	395	1137	C
20	ATOM	3591	CB	LYS	D	443	58.290	10.528	-25.671	1.00	33.67		C
	ANISOU	3591	CB	LYS	D	443	4779	4162	3853	630	465	1361	C
	ATOM	3592	CG	LYS	D	443	59.229	11.526	-25.065	1.00	36.65		C
	ANISOU	3592	CG	LYS	D	443	5167	4298	4461	529	567	1432	C
	ATOM	3593	CD	LYS	D	443	59.650	12.550	-26.133	1.00	45.40		C
25	ANISOU	3593	CD	LYS	D	443	6473	5274	5503	538	680	1678	C
	ATOM	3594	CE	LYS	D	443	60.962	13.265	-25.747	1.00	47.82		C
	ANISOU	3594	CE	LYS	D	443	6766	5359	6046	363	843	1750	C
	ATOM	3595	NZ	LYS	D	443	61.530	14.054	-26.889	1.00	50.87		N
	ANISOU	3595	NZ	LYS	D	443	7337	5634	6356	332	1010	2003	N
30	ATOM	3596	C	LYS	D	443	56.646	8.725	-25.307	1.00	30.23		C
	ANISOU	3596	C	LYS	D	443	4154	4060	3271	716	235	1077	C
	ATOM	3597	O	LYS	D	443	55.631	8.934	-24.669	1.00	29.75		O
	ANISOU	3597	O	LYS	D	443	4018	4015	3270	802	100	1008	O
	ATOM	3598	N	VAL	D	444	56.638	8.041	-26.453	1.00	30.26		N
35	ANISOU	3598	N	VAL	D	444	4234	4210	3051	726	252	1098	N
	ATOM	3599	CA	VAL	D	444	55.407	7.466	-26.998	1.00	29.10		C
	ANISOU	3599	CA	VAL	D	444	4078	4254	2725	825	78	1029	C
	ATOM	3600	CB	VAL	D	444	55.585	6.963	-28.484	1.00	31.06		C
	ANISOU	3600	CB	VAL	D	444	4485	4636	2681	840	109	1084	C
40	ATOM	3601	CG1	VAL	D	444	54.288	6.421	-29.035	1.00	29.96		C
	ANISOU	3601	CG1	VAL	D	444	4330	4691	2363	934	-109	999	C
	ATOM	3602	CG2	VAL	D	444	56.115	8.078	-29.394	1.00	30.95		C
	ANISOU	3602	CG2	VAL	D	444	4684	4520	2557	891	208	1324	C
	ATOM	3603	C	VAL	D	444	54.875	6.360	-26.079	1.00	27.62		C
45	ANISOU	3603	C	VAL	D	444	3699	4166	2629	768	3	815	C
	ATOM	3604	O	VAL	D	444	53.680	6.285	-25.819	1.00	27.97		O
	ANISOU	3604	O	VAL	D	444	3650	4300	2679	844	-156	743	O
	ATOM	3605	N	LEU	D	445	55.788	5.542	-25.567	1.00	25.93		N
	ANISOU	3605	N	LEU	D	445	3422	3927	2503	636	126	725	N
50	ATOM	3606	CA	LEU	D	445	55.501	4.447	-24.647	1.00	23.92		C
	ANISOU	3606	CA	LEU	D	445	3016	3731	2341	563	89	546	C
	ATOM	3607	CB	LEU	D	445	56.804	3.645	-24.334	1.00	21.91		C
	ANISOU	3607	CB	LEU	D	445	2738	3423	2166	439	243	496	C
	ATOM	3608	CG	LEU	D	445	56.751	2.511	-23.313	1.00	20.89		C
55	ANISOU	3608	CG	LEU	D	445	2483	3313	2143	358	226	342	C
	ATOM	3609	CD1	LEU	D	445	55.801	1.381	-23.778	1.00	20.54		C
	ANISOU	3609	CD1	LEU	D	445	2418	3414	1973	353	132	220	C
	ATOM	3610	CD2	LEU	D	445	58.144	1.953	-22.982	1.00	18.80		C
	ANISOU	3610	CD2	LEU	D	445	2194	2968	1982	270	365	327	C
60	ATOM	3611	C	LEU	D	445	54.862	4.932	-23.354	1.00	23.22		C
	ANISOU	3611	C	LEU	D	445	2811	3585	2427	587	19	499	C
	ATOM	3612	O	LEU	D	445	53.820	4.424	-22.965	1.00	24.32		O
	ANISOU	3612	O	LEU	D	445	2843	3827	2571	605	-83	395	O
	ATOM	3613	N	PHE	D	446	55.525	5.867	-22.678	1.00	22.66		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3613	N	PHE	D	446	2760	3351	2500	576	85	565	N
	ATOM	3614	CA	PHE	D	446	55.043	6.489	-21.438	1.00	21.33		C
	ANISOU	3614	CA	PHE	D	446	2518	3103	2482	609	39	517	C
	ATOM	3615	CB	PHE	D	446	56.138	7.400	-20.838	1.00	20.56		C
5	ANISOU	3615	CB	PHE	D	446	2473	2806	2534	555	124	577	C
	ATOM	3616	CG	PHE	D	446	57.229	6.646	-20.076	1.00	19.42		C
	ANISOU	3616	CG	PHE	D	446	2266	2630	2484	414	198	502	C
	ATOM	3617	CD1	PHE	D	446	57.332	5.253	-20.143	1.00	17.40		C
10	ANISOU	3617	CD1	PHE	D	446	1945	2496	2168	352	213	418	C
	ATOM	3618	CE1	PHE	D	446	58.339	4.559	-19.453	1.00	20.22		C
	ANISOU	3618	CE1	PHE	D	446	2246	2816	2619	249	265	363	C
	ATOM	3619	CZ	PHE	D	446	59.301	5.271	-18.691	1.00	19.91		C
	ANISOU	3619	CZ	PHE	D	446	2198	2633	2733	192	291	386	C
	ATOM	3620	CE2	PHE	D	446	59.217	6.678	-18.646	1.00	19.69		C
15	ANISOU	3620	CE2	PHE	D	446	2236	2480	2765	229	279	458	C
	ATOM	3621	CD2	PHE	D	446	58.186	7.346	-19.330	1.00	18.60		C
	ANISOU	3621	CD2	PHE	D	446	2170	2362	2535	345	240	519	C
	ATOM	3622	C	PHE	D	446	53.719	7.274	-21.629	1.00	22.61		C
20	ANISOU	3622	C	PHE	D	446	2672	3302	2617	769	-82	546	C
	ATOM	3623	O	PHE	D	446	52.788	7.129	-20.834	1.00	21.26		O
	ANISOU	3623	O	PHE	D	446	2384	3189	2505	810	-143	444	O
	ATOM	3624	N	GLN	D	447	53.634	8.092	-22.683	1.00	24.31		N
	ANISOU	3624	N	GLN	D	447	3009	3485	2743	868	-111	691	N
	ATOM	3625	CA	GLN	D	447	52.434	8.923	-22.930	1.00	26.58		C
25	ANISOU	3625	CA	GLN	D	447	3294	3792	3015	1051	-242	741	C
	ATOM	3626	CB	GLN	D	447	52.727	10.052	-23.948	1.00	28.74		C
	ANISOU	3626	CB	GLN	D	447	3759	3946	3215	1147	-240	948	C
	ATOM	3627	CG	GLN	D	447	53.822	11.037	-23.521	1.00	28.97		C
30	ANISOU	3627	CG	GLN	D	447	3898	3721	3387	1085	-109	1039	C
	ATOM	3628	CD	GLN	D	447	53.417	11.958	-22.367	1.00	31.94		C
	ANISOU	3628	CD	GLN	D	447	4237	3939	3959	1160	-136	984	C
	ATOM	3629	OE1	GLN	D	447	52.467	11.685	-21.632	1.00	31.98		O
	ANISOU	3629	OE1	GLN	D	447	4103	4036	4012	1229	-210	849	O
	ATOM	3630	NE2	GLN	D	447	54.147	13.060	-22.209	1.00	32.72		N
35	ANISOU	3630	NE2	GLN	D	447	4465	3791	4174	1139	-64	1083	N
	ATOM	3631	C	GLN	D	447	51.172	8.138	-23.353	1.00	27.31		C
	ANISOU	3631	C	GLN	D	447	3261	4112	3003	1115	-388	657	C
	ATOM	3632	O	GLN	D	447	50.059	8.620	-23.205	1.00	28.77		O
40	ANISOU	3632	O	GLN	D	447	3359	4341	3230	1259	-502	646	O
	ATOM	3633	N	ASN	D	448	51.353	6.919	-23.839	1.00	27.07		N
	ANISOU	3633	N	ASN	D	448	3210	4218	2855	1005	-385	585	N
	ATOM	3634	CA	ASN	D	448	50.262	6.088	-24.336	1.00	27.76		C
	ANISOU	3634	CA	ASN	D	448	3189	4515	2844	1027	-531	492	C
	ATOM	3635	CB	ASN	D	448	50.574	5.642	-25.776	1.00	28.82		C
45	ANISOU	3635	CB	ASN	D	448	3470	4742	2740	1014	-568	545	C
	ATOM	3636	CG	ASN	D	448	50.346	6.749	-26.784	1.00	28.94		C
	ANISOU	3636	CG	ASN	D	448	3635	4738	2623	1181	-656	726	C
	ATOM	3637	OD1	ASN	D	448	49.218	7.083	-27.082	1.00	31.76		O
50	ANISOU	3637	OD1	ASN	D	448	3924	5192	2950	1320	-840	738	O
	ATOM	3638	ND2	ASN	D	448	51.414	7.321	-27.300	1.00	26.91		N
	ANISOU	3638	ND2	ASN	D	448	3577	4353	2295	1168	-523	876	N
	ATOM	3639	C	ASN	D	448	49.972	4.866	-23.458	1.00	27.61		C
	ANISOU	3639	C	ASN	D	448	3000	4579	2912	892	-508	312	C
	ATOM	3640	O	ASN	D	448	49.042	4.091	-23.740	1.00	28.34		O
55	ANISOU	3640	O	ASN	D	448	2973	4834	2960	874	-623	214	O
	ATOM	3641	N	TRP	D	449	50.740	4.720	-22.378	1.00	26.08		N
	ANISOU	3641	N	TRP	D	449	2795	4267	2845	793	-369	274	N
	ATOM	3642	CA	TRP	D	449	50.617	3.569	-21.487	1.00	26.10		C
	ANISOU	3642	CA	TRP	D	449	2678	4318	2922	661	-326	133	C
60	ATOM	3643	CB	TRP	D	449	51.844	3.464	-20.552	1.00	22.77		C
	ANISOU	3643	CB	TRP	D	449	2311	3748	2592	562	-183	131	C
	ATOM	3644	CG	TRP	D	449	51.796	2.288	-19.626	1.00	22.86		C
	ANISOU	3644	CG	TRP	D	449	2234	3788	2662	436	-140	15	C
	ATOM	3645	CD1	TRP	D	449	51.346	2.273	-18.330	1.00	19.13		C



# ES 2 454 773 T3

		ANISOU	3645	CD1	TRP	D	449	1674	3305	2290	418	-109	-46	C
		ATOM	3646	NE1	TRP	D	449	51.479	1.021	-17.799	1.00	18.46		N
		ANISOU	3646	NE1	TRP	D	449	1555	3239	2218	288	-65	-120	N
		ATOM	3647	CE2	TRP	D	449	52.025	0.180	-18.738	1.00	19.96		C
5		ANISOU	3647	CE2	TRP	D	449	1806	3444	2335	226	-70	-126	C
		ATOM	3648	CD2	TRP	D	449	52.254	0.945	-19.905	1.00	22.60		C
		ANISOU	3648	CD2	TRP	D	449	2219	3784	2585	316	-109	-47	C
		ATOM	3649	CE3	TRP	D	449	52.810	0.315	-21.036	1.00	22.07		C
		ANISOU	3649	CE3	TRP	D	449	2239	3740	2407	283	-102	-46	C
10		ATOM	3650	CZ3	TRP	D	449	53.121	-1.038	-20.960	1.00	20.32		C
		ANISOU	3650	CZ3	TRP	D	449	2018	3518	2186	172	-64	-135	C
		ATOM	3651	CH2	TRP	D	449	52.904	-1.767	-19.775	1.00	19.50		C
		ANISOU	3651	CH2	TRP	D	449	1836	3385	2187	86	-36	-201	C
		ATOM	3652	CZ2	TRP	D	449	52.368	-1.173	-18.652	1.00	19.23		C
15		ANISOU	3652	CZ2	TRP	D	449	1723	3343	2240	108	-34	-191	C
		ATOM	3653	C	TRP	D	449	49.301	3.488	-20.696	1.00	26.80		C
		ANISOU	3653	C	TRP	D	449	2575	4500	3107	694	-385	42	C
		ATOM	3654	O	TRP	D	449	48.820	2.383	-20.387	1.00	28.17		O
		ANISOU	3654	O	TRP	D	449	2636	4768	3300	585	-389	-67	O
20		ATOM	3655	N	GLY	D	450	48.724	4.626	-20.338	1.00	27.01		N
		ANISOU	3655	N	GLY	D	450	2562	4494	3209	839	-413	84	N
		ATOM	3656	CA	GLY	D	450	47.550	4.564	-19.465	1.00	26.85		C
		ANISOU	3656	CA	GLY	D	450	2343	4561	3298	873	-423	-10	C
		ATOM	3657	C	GLY	D	450	47.850	5.155	-18.104	1.00	26.36		C
25		ANISOU	3657	C	GLY	D	450	2299	4371	3347	887	-298	-33	C
		ATOM	3658	O	GLY	D	450	48.936	4.913	-17.524	1.00	24.35		O
		ANISOU	3658	O	GLY	D	450	2156	4003	3095	777	-201	-34	O
		ATOM	3659	N	ILE	D	451	46.877	5.919	-17.597	1.00	26.86		N
		ANISOU	3659	N	ILE	D	451	2250	4457	3500	1030	-308	-60	N
30		ATOM	3660	CA	ILE	D	451	47.001	6.664	-16.348	1.00	26.37		C
		ANISOU	3660	CA	ILE	D	451	2221	4274	3526	1082	-198	-98	C
		ATOM	3661	CB	ILE	D	451	46.969	8.237	-16.581	1.00	27.89		C
		ANISOU	3661	CB	ILE	D	451	2507	4318	3770	1289	-238	-20	C
		ATOM	3662	CG1	ILE	D	451	47.657	9.008	-15.440	1.00	25.93		C
35		ANISOU	3662	CG1	ILE	D	451	2392	3875	3584	1293	-129	-57	C
		ATOM	3663	CD1	ILE	D	451	49.176	9.125	-15.584	1.00	21.81		C
		ANISOU	3663	CD1	ILE	D	451	2069	3187	3030	1167	-106	13	C
		ATOM	3664	CG2	ILE	D	451	45.544	8.748	-16.801	1.00	27.64		C
		ANISOU	3664	CG2	ILE	D	451	2298	4397	3809	1490	-315	-36	C
40		ATOM	3665	C	ILE	D	451	45.874	6.181	-15.432	1.00	27.18		C
		ANISOU	3665	C	ILE	D	451	2116	4514	3696	1077	-132	-215	C
		ATOM	3666	O	ILE	D	451	44.791	5.803	-15.904	1.00	28.28		O
		ANISOU	3666	O	ILE	D	451	2060	4822	3862	1110	-204	-243	O
		ATOM	3667	N	GLU	D	452	46.130	6.140	-14.131	1.00	26.29		N
45		ANISOU	3667	N	GLU	D	452	2042	4341	3606	1022	4	-283	N
		ATOM	3668	CA	GLU	D	452	45.061	5.692	-13.194	1.00	27.65		C
		ANISOU	3668	CA	GLU	D	452	2028	4647	3830	1011	109	-385	C
		ATOM	3669	CB	GLU	D	452	45.256	4.198	-12.798	1.00	26.19		C
		ANISOU	3669	CB	GLU	D	452	1818	4538	3597	781	176	-418	C
50		ATOM	3670	CG	GLU	D	452	46.647	3.878	-12.149	1.00	24.41		C
		ANISOU	3670	CG	GLU	D	452	1815	4166	3293	656	231	-398	C
		ATOM	3671	CD	GLU	D	452	46.830	2.423	-11.743	1.00	24.76		C
		ANISOU	3671	CD	GLU	D	452	1852	4259	3296	455	291	-414	C
		ATOM	3672	OE1	GLU	D	452	45.888	1.618	-11.901	1.00	31.91		O
55		ANISOU	3672	OE1	GLU	D	452	2587	5300	4236	384	309	-448	O
		ATOM	3673	OE2	GLU	D	452	47.908	2.057	-11.253	1.00	23.36		O
		ANISOU	3673	OE2	GLU	D	452	1834	3978	3064	366	315	-392	O
		ATOM	3674	C	GLU	D	452	45.042	6.574	-11.949	1.00	27.37		C
		ANISOU	3674	C	GLU	D	452	2061	4513	3825	1111	234	-449	C
60		ATOM	3675	O	GLU	D	452	46.052	7.169	-11.604	1.00	26.55		O
		ANISOU	3675	O	GLU	D	452	2164	4236	3690	1111	242	-433	O
		ATOM	3676	N	AHIS	D	453	43.898	6.648	-11.278	0.50	29.37		N
		ANISOU	3676	N	AHIS	D	453	2137	4881	4142	1189	336	-532	N
		ATOM	3677	N	BHIS	D	453	43.885	6.656	-11.308	0.50	29.06		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3677	N	BHIS	D	453	2095	4843	4104	1192	332	-531	N
	ATOM	3678	CA	AHIS	D	453	43.836	7.247	-9.942	0.50	30.28		C
	ANISOU	3678	CA	AHIS	D	453	2326	4928	4250	1259	493	-622	C
	ATOM	3679	CA	BHIS	D	453	43.774	7.182	-9.955	0.50	29.69		C
5	ANISOU	3679	CA	BHIS	D	453	2237	4868	4178	1254	495	-623	C
	ATOM	3680	CB	AHIS	D	453	42.418	7.692	-9.572	0.50	32.76		C
	ANISOU	3680	CB	AHIS	D	453	2411	5367	4670	1432	592	-703	C
	ATOM	3681	CB	BHIS	D	453	42.302	7.269	-9.541	0.50	31.70		C
	ANISOU	3681	CB	BHIS	D	453	2229	5287	4527	1371	609	-705	C
10	ATOM	3682	CG	AHIS	D	453	42.349	8.492	-8.302	0.50	34.48		C
	ANISOU	3682	CG	AHIS	D	453	2734	5498	4869	1546	757	-810	C
	ATOM	3683	CG	BHIS	D	453	41.496	8.296	-10.288	0.50	33.06		C
	ANISOU	3683	CG	BHIS	D	453	2263	5469	4828	1622	512	-693	C
	ATOM	3684	ND1A	AHIS	D	453	41.699	8.043	-7.170	0.50	37.07		N
15	ANISOU	3684	ND1A	AHIS	D	453	2974	5946	5164	1508	969	-904	N
	ATOM	3685	ND1B	BHIS	D	453	40.830	8.013	-11.463	0.50	33.68		N
	ANISOU	3685	ND1B	BHIS	D	453	2135	5683	4978	1653	357	-636	N
	ATOM	3686	CE1A	AHIS	D	453	41.803	8.950	-6.214	0.50	37.81		C
	ANISOU	3686	CE1A	AHIS	D	453	3219	5928	5219	1638	1082	-1002	C
20	ATOM	3687	CE1B	BHIS	D	453	40.176	9.092	-11.868	0.50	34.95		C
	ANISOU	3687	CE1B	BHIS	D	453	2210	5823	5246	1913	285	-627	C
	ATOM	3688	NE2A	AHIS	D	453	42.505	9.967	-6.682	0.50	37.40		N
	ANISOU	3688	NE2A	AHIS	D	453	3344	5671	5195	1747	942	-976	N
	ATOM	3689	NE2B	BHIS	D	453	40.397	10.065	-11.001	0.50	33.44		N
25	ANISOU	3689	NE2B	BHIS	D	453	2168	5472	5067	2049	403	-686	N
	ATOM	3690	CD2A	AHIS	D	453	42.863	9.704	-7.982	0.50	34.66		C
	ANISOU	3690	CD2A	AHIS	D	453	2960	5318	4892	1690	748	-845	C
	ATOM	3691	CD2B	BHIS	D	453	41.208	9.589	-9.998	0.50	33.77		C
	ANISOU	3691	CD2B	BHIS	D	453	2392	5449	4990	1865	542	-736	C
30	ATOM	3692	C	AHIS	D	453	44.368	6.267	-8.900	0.50	29.31		C
	ANISOU	3692	C	AHIS	D	453	2300	4818	4018	1058	615	-655	C
	ATOM	3693	C	BHIS	D	453	44.521	6.231	-8.998	0.50	28.61		C
	ANISOU	3693	C	BHIS	D	453	2231	4715	3923	1044	596	-643	C
	ATOM	3694	O	AHIS	D	453	44.077	5.067	-8.933	0.50	29.41		O
35	ANISOU	3694	O	AHIS	D	453	2203	4957	4013	899	649	-643	O
	ATOM	3695	O	BHIS	D	453	44.536	5.005	-9.196	0.50	27.91		O
	ANISOU	3695	O	BHIS	D	453	2079	4722	3805	868	596	-612	O
	ATOM	3696	N	ILE	D	454	45.164	6.783	-7.978	1.00	28.76		N
	ANISOU	3696	N	ILE	D	454	2449	4605	3874	1063	667	-695	N
40	ATOM	3697	CA	ILE	D	454	45.777	5.937	-6.964	1.00	28.13		C
	ANISOU	3697	CA	ILE	D	454	2498	4524	3669	893	751	-712	C
	ATOM	3698	CB	ILE	D	454	47.332	5.999	-7.018	1.00	26.26		C
	ANISOU	3698	CB	ILE	D	454	2490	4116	3371	803	634	-662	C
	ATOM	3699	CG1	ILE	D	454	47.890	7.250	-6.344	1.00	24.68		C
45	ANISOU	3699	CG1	ILE	D	454	2478	3746	3152	906	625	-733	C
	ATOM	3700	CD1	ILE	D	454	49.392	7.303	-6.398	1.00	25.66		C
	ANISOU	3700	CD1	ILE	D	454	2783	3717	3249	801	503	-689	C
	ATOM	3701	CG2	ILE	D	454	47.826	5.855	-8.457	1.00	23.15		C
	ANISOU	3701	CG2	ILE	D	454	2062	3692	3042	772	483	-559	C
50	ATOM	3702	C	ILE	D	454	45.222	6.230	-5.576	1.00	30.71		C
	ANISOU	3702	C	ILE	D	454	2860	4884	3925	953	938	-822	C
	ATOM	3703	O	ILE	D	454	44.661	7.306	-5.345	1.00	32.07		O
	ANISOU	3703	O	ILE	D	454	3011	5025	4150	1141	991	-901	O
	ATOM	3704	N	ASP	D	455	45.333	5.234	-4.691	1.00	32.26		N
55	ANISOU	3704	N	ASP	D	455	3111	5146	4000	800	1047	-821	N
	ATOM	3705	CA	ASP	D	455	45.106	5.380	-3.250	1.00	34.47		C
	ANISOU	3705	CA	ASP	D	455	3507	5446	4142	822	1227	-911	C
	ATOM	3706	CB	ASP	D	455	44.729	4.030	-2.628	1.00	35.56		C
	ANISOU	3706	CB	ASP	D	455	3602	5719	4189	648	1374	-865	C
60	ATOM	3707	CG	ASP	D	455	43.446	3.430	-3.228	1.00	39.76		C
	ANISOU	3707	CG	ASP	D	455	3816	6426	4866	618	1465	-844	C
	ATOM	3708	OD1	ASP	D	455	42.493	4.181	-3.532	1.00	42.46		O
	ANISOU	3708	OD1	ASP	D	455	3961	6837	5333	779	1511	-908	O
	ATOM	3709	OD2	ASP	D	455	43.394	2.189	-3.401	1.00	44.22		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3709	OD2	ASP	D	455	4320	7051	5432	431	1479	-765	O
	ATOM	3710	C	ASP	D	455	46.372	5.899	-2.568	1.00	34.03		C
	ANISOU	3710	C	ASP	D	455	3751	5221	3959	814	1139	-945	C
	ATOM	3711	O	ASP	D	455	47.494	5.599	-2.992	1.00	31.59		O
5	ANISOU	3711	O	ASP	D	455	3543	4815	3646	712	975	-870	O
	ATOM	3712	N	ASN	D	456	46.191	6.679	-1.505	1.00	36.31		N
	ANISOU	3712	N	ASN	D	456	4174	5475	4146	921	1248	-1069	N
	ATOM	3713	CA	ASN	D	456	47.306	7.068	-0.637	1.00	36.72		C
10	ANISOU	3713	CA	ASN	D	456	4519	5389	4046	891	1168	-1127	C
	ATOM	3714	CB	ASN	D	456	46.871	8.172	0.341	1.00	39.40		C
	ANISOU	3714	CB	ASN	D	456	4986	5683	4301	1056	1292	-1302	C
	ATOM	3715	CG	ASN	D	456	46.475	9.447	-0.357	1.00	40.47		C
	ANISOU	3715	CG	ASN	D	456	5043	5708	4625	1250	1255	-1367	C
	ATOM	3716	OD1	ASN	D	456	47.200	9.934	-1.227	1.00	42.70		O
15	ANISOU	3716	OD1	ASN	D	456	5348	5842	5034	1246	1067	-1312	O
	ATOM	3717	ND2	ASN	D	456	45.322	9.995	0.010	1.00	40.50		N
	ANISOU	3717	ND2	ASN	D	456	4954	5779	4655	1427	1445	-1475	N
	ATOM	3718	C	ASN	D	456	47.813	5.870	0.159	1.00	36.38		C
20	ANISOU	3718	C	ASN	D	456	4600	5409	3814	717	1191	-1062	C
	ATOM	3719	O	ASN	D	456	47.117	5.374	1.047	1.00	39.46		O
	ANISOU	3719	O	ASN	D	456	5005	5924	4065	698	1387	-1084	O
	ATOM	3720	N	VAL	D	457	49.004	5.398	-0.170	1.00	34.18		N
	ANISOU	3720	N	VAL	D	457	4405	5046	3536	597	1001	-974	N
	ATOM	3721	CA	VAL	D	457	49.676	4.338	0.582	1.00	33.74		C
25	ANISOU	3721	CA	VAL	D	457	4497	5014	3310	455	975	-903	C
	ATOM	3722	CB	VAL	D	457	49.883	3.059	-0.286	1.00	32.28		C
	ANISOU	3722	CB	VAL	D	457	4179	4866	3220	319	921	-748	C
	ATOM	3723	CG1	VAL	D	457	50.617	1.967	0.500	1.00	32.61		C
30	ANISOU	3723	CG1	VAL	D	457	4387	4904	3098	195	883	-661	C
	ATOM	3724	CG2	VAL	D	457	48.541	2.522	-0.807	1.00	33.51		C
	ANISOU	3724	CG2	VAL	D	457	4097	5162	3471	308	1091	-717	C
	ATOM	3725	C	VAL	D	457	51.031	4.904	1.032	1.00	32.68		C
	ANISOU	3725	C	VAL	D	457	4580	4731	3105	444	773	-949	C
35	ATOM	3726	O	VAL	D	457	51.822	5.334	0.185	1.00	30.77		O
	ANISOU	3726	O	VAL	D	457	4297	4375	3018	437	604	-926	O
	ATOM	3727	N	MSE	D	458	51.279	4.935	2.348	1.00	33.57		N
	ANISOU	3727	N	MSE	D	458	4921	4852	2984	440	792	-1018	N
	ATOM	3728	CA	MSE	D	458	52.542	5.460	2.892	1.00	33.03		C
40	ANISOU	3728	CA	MSE	D	458	5058	4656	2837	420	576	-1082	C
	ATOM	3729	CB	MSE	D	458	52.509	5.541	4.421	1.00	35.52		C
	ANISOU	3729	CB	MSE	D	458	5638	5013	2845	439	627	-1182	C
	ATOM	3730	CG	MSE	D	458	53.711	6.288	5.016	1.00	34.66		C
	ANISOU	3730	CG	MSE	D	458	5739	4772	2659	428	383	-1294	C
45	ATOM	3731	SE	MSE	D	458	53.851	6.197	6.940	0.90	39.03		SE
	ANISOU	3731	SE	MSE	D	458	6670	5394	2765	437	388	-1406	SE
	ATOM	3732	CE	MSE	D	458	55.169	7.548	7.238	1.00	40.64		C
	ANISOU	3732	CE	MSE	D	458	7044	5395	3003	434	59	-1605	C
	ATOM	3733	C	MSE	D	458	53.711	4.597	2.449	1.00	31.60		C
50	ANISOU	3733	C	MSE	D	458	4852	4434	2721	297	378	-943	C
	ATOM	3734	O	MSE	D	458	53.591	3.367	2.390	1.00	31.80		O
	ANISOU	3734	O	MSE	D	458	4832	4541	2711	221	428	-811	O
	ATOM	3735	N	GLY	D	459	54.833	5.231	2.119	1.00	30.97		N
	ANISOU	3735	N	GLY	D	459	4791	4220	2755	277	165	-973	N
55	ATOM	3736	CA	GLY	D	459	56.032	4.514	1.643	1.00	29.96		C
	ANISOU	3736	CA	GLY	D	459	4609	4050	2725	178	-21	-853	C
	ATOM	3737	C	GLY	D	459	56.149	4.354	0.118	1.00	28.53		C
	ANISOU	3737	C	GLY	D	459	4203	3839	2800	157	-25	-754	C
	ATOM	3738	O	GLY	D	459	57.067	3.695	-0.379	1.00	27.21		O
60	ANISOU	3738	O	GLY	D	459	3968	3645	2726	88	-141	-656	O
	ATOM	3739	N	MSE	D	460	55.240	4.983	-0.620	1.00	28.31		N
	ANISOU	3739	N	MSE	D	460	4064	3815	2879	230	96	-784	N
	ATOM	3740	CA	MSE	D	460	55.042	4.734	-2.044	1.00	28.35		C
	ANISOU	3740	CA	MSE	D	460	3874	3830	3069	225	124	-688	C
	ATOM	3741	CB	MSE	D	460	54.078	3.573	-2.174	1.00	27.77		C

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	3741	CB	MSE	D	460	3709	3898	2944	200	267	-617	C
		ATOM	3742	CG	MSE	D	460	54.112	2.810	-3.436	1.00	30.07		C
		ANISOU	3742	CG	MSE	D	460	3842	4216	3368	152	259	-511	C
		ATOM	3743	SE	MSE	D	460	52.689	1.457	-3.282	0.90	33.52		SE
5		ANISOU	3743	SE	MSE	D	460	4185	4819	3732	100	451	-464	SE
		ATOM	3744	CE	MSE	D	460	53.605	0.285	-1.992	1.00	34.15		C
		ANISOU	3744	CE	MSE	D	460	4467	4874	3636	-1	401	-395	C
		ATOM	3745	C	MSE	D	460	54.378	5.961	-2.667	1.00	26.69		C
		ANISOU	3745	C	MSE	D	460	3605	3566	2972	333	177	-750	C
10		ATOM	3746	O	MSE	D	460	53.553	6.615	-2.027	1.00	27.88		O
		ANISOU	3746	O	MSE	D	460	3813	3730	3051	427	275	-855	O
		ATOM	3747	N	VAL	D	461	54.750	6.277	-3.901	1.00	24.21		N
		ANISOU	3747	N	VAL	D	461	3187	3185	2826	331	120	-682	N
		ATOM	3748	CA	VAL	D	461	54.111	7.350	-4.657	1.00	23.60		C
15		ANISOU	3748	CA	VAL	D	461	3055	3051	2861	443	159	-701	C
		ATOM	3749	CB	VAL	D	461	54.973	8.683	-4.716	1.00	24.29		C
		ANISOU	3749	CB	VAL	D	461	3246	2931	3053	454	54	-748	C
		ATOM	3750	CG1	VAL	D	461	54.919	9.441	-3.418	1.00	26.49		C
		ANISOU	3750	CG1	VAL	D	461	3693	3135	3236	497	49	-907	C
20		ATOM	3751	CG2	VAL	D	461	56.409	8.417	-5.145	1.00	21.55		C
		ANISOU	3751	CG2	VAL	D	461	2887	2510	2790	322	-73	-669	C
		ATOM	3752	C	VAL	D	461	53.857	6.895	-6.082	1.00	21.54		C
		ANISOU	3752	C	VAL	D	461	2635	2848	2701	440	169	-582	C
		ATOM	3753	O	VAL	D	461	54.504	5.950	-6.569	1.00	20.30		O
25		ANISOU	3753	O	VAL	D	461	2431	2727	2556	340	127	-497	O
		ATOM	3754	N	GLY	D	462	52.960	7.610	-6.757	1.00	21.64		N
		ANISOU	3754	N	GLY	D	462	2577	2862	2782	561	213	-581	N
		ATOM	3755	CA	GLY	D	462	52.766	7.470	-8.213	1.00	20.05		C
		ANISOU	3755	CA	GLY	D	462	2259	2696	2664	580	191	-472	C
30		ATOM	3756	C	GLY	D	462	53.780	8.244	-9.042	1.00	19.20		C
		ANISOU	3756	C	GLY	D	462	2210	2429	2656	563	109	-399	C
		ATOM	3757	O	GLY	D	462	54.540	9.061	-8.544	1.00	19.52		O
		ANISOU	3757	O	GLY	D	462	2363	2313	2739	543	65	-439	O
		ATOM	3758	N	VAL	D	463	53.780	8.004	-10.337	1.00	18.47		N
35		ANISOU	3758	N	VAL	D	463	2045	2375	2599	563	93	-292	N
		ATOM	3759	CA	VAL	D	463	54.761	8.620	-11.196	1.00	18.33		C
		ANISOU	3759	CA	VAL	D	463	2080	2223	2662	531	49	-199	C
		ATOM	3760	CB	VAL	D	463	56.088	7.738	-11.343	1.00	18.13		C
		ANISOU	3760	CB	VAL	D	463	2045	2200	2645	374	27	-152	C
40		ATOM	3761	CG1	VAL	D	463	55.844	6.407	-12.051	1.00	15.46		C
		ANISOU	3761	CG1	VAL	D	463	1612	2021	2239	337	52	-108	C
		ATOM	3762	CG2	VAL	D	463	57.144	8.490	-12.103	1.00	18.20		C
		ANISOU	3762	CG2	VAL	D	463	2096	2063	2755	329	12	-63	C
		ATOM	3763	C	VAL	D	463	54.076	8.889	-12.517	1.00	18.79		C
45		ANISOU	3763	C	VAL	D	463	2091	2324	2726	630	47	-103	C
		ATOM	3764	O	VAL	D	463	53.343	8.039	-13.061	1.00	18.59		O
		ANISOU	3764	O	VAL	D	463	1963	2463	2636	645	53	-87	O
		ATOM	3765	N	LEU	D	464	54.245	10.107	-12.999	1.00	19.85		N
		ANISOU	3765	N	LEU	D	464	2307	2300	2934	701	29	-42	N
50		ATOM	3766	CA	LEU	D	464	53.639	10.532	-14.258	1.00	20.22		C
		ANISOU	3766	CA	LEU	D	464	2344	2365	2972	816	9	71	C
		ATOM	3767	CB	LEU	D	464	53.298	12.015	-14.196	1.00	21.24		C
		ANISOU	3767	CB	LEU	D	464	2572	2308	3190	958	-6	86	C
		ATOM	3768	CG	LEU	D	464	52.392	12.555	-13.082	1.00	21.78		C
55		ANISOU	3768	CG	LEU	D	464	2634	2349	3293	1085	11	-55	C
		ATOM	3769	CD1	LEU	D	464	52.192	14.033	-13.307	1.00	21.48		C
		ANISOU	3769	CD1	LEU	D	464	2714	2089	3357	1234	-8	-13	C
		ATOM	3770	CD2	LEU	D	464	51.033	11.835	-13.039	1.00	19.48		C
		ANISOU	3770	CD2	LEU	D	464	2173	2290	2938	1184	22	-109	C
60		ATOM	3771	C	LEU	D	464	54.600	10.221	-15.434	1.00	20.13		C
		ANISOU	3771	C	LEU	D	464	2363	2346	2938	720	16	205	C
		ATOM	3772	O	LEU	D	464	55.774	9.957	-15.215	1.00	19.34		O
		ANISOU	3772	O	LEU	D	464	2286	2186	2877	580	42	209	O
		ATOM	3773	N	PRO	D	465	54.096	10.203	-16.684	1.00	21.70		N

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	3773	N	PRO	D	465	2556	2622	3065	799	-8	311	N
		ATOM	3774	CA	PRO	D	465	54.985	9.992	-17.845	1.00	22.57		C
		ANISOU	3774	CA	PRO	D	465	2723	2726	3126	722	25	440	C
		ATOM	3775	CB	PRO	D	465	54.069	10.254	-19.037	1.00	23.86		C
5		ANISOU	3775	CB	PRO	D	465	2910	2970	3187	865	-34	540	C
		ATOM	3776	CG	PRO	D	465	52.699	9.890	-18.550	1.00	23.05		C
		ANISOU	3776	CG	PRO	D	465	2677	3013	3067	968	-105	429	C
		ATOM	3777	CD	PRO	D	465	52.675	10.307	-17.092	1.00	22.87		C
10		ANISOU	3777	CD	PRO	D	465	2637	2889	3164	965	-71	311	C
		ATOM	3778	C	PRO	D	465	56.248	10.874	-17.928	1.00	25.04		C
		ANISOU	3778	C	PRO	D	465	3145	2825	3544	637	84	529	C
		ATOM	3779	O	PRO	D	465	57.278	10.395	-18.414	1.00	25.30		O
		ANISOU	3779	O	PRO	D	465	3176	2867	3570	517	149	583	O
15		ATOM	3780	N	ASP	D	466	56.170	12.133	-17.480	1.00	26.78		N
		ANISOU	3780	N	ASP	D	466	3452	2849	3874	696	69	538	N
		ATOM	3781	CA	ASP	D	466	57.344	13.009	-17.382	1.00	28.69		C
		ANISOU	3781	CA	ASP	D	466	3786	2862	4253	586	117	599	C
		ATOM	3782	CB	ASP	D	466	56.953	14.498	-17.491	1.00	31.09		C
20		ANISOU	3782	CB	ASP	D	466	4230	2938	4643	702	98	670	C
		ATOM	3783	CG	ASP	D	466	56.078	14.998	-16.330	1.00	32.24		C
		ANISOU	3783	CG	ASP	D	466	4380	3024	4845	822	37	512	C
		ATOM	3784	OD1	ASP	D	466	55.823	14.292	-15.330	1.00	30.53		O
		ANISOU	3784	OD1	ASP	D	466	4070	2932	4599	800	19	349	O
		ATOM	3785	OD2	ASP	D	466	55.642	16.161	-16.413	1.00	38.19		O
25		ANISOU	3785	OD2	ASP	D	466	5248	3591	5673	948	19	556	O
		ATOM	3786	C	ASP	D	466	58.190	12.757	-16.130	1.00	28.75		C
		ANISOU	3786	C	ASP	D	466	3742	2819	4363	442	111	460	C
		ATOM	3787	O	ASP	D	466	59.120	13.523	-15.851	1.00	29.86		O
30		ANISOU	3787	O	ASP	D	466	3937	2764	4644	338	125	475	O
		ATOM	3788	N	MSE	D	467	57.871	11.674	-15.404	1.00	27.82		N
		ANISOU	3788	N	MSE	D	467	3523	2874	4173	430	82	334	N
		ATOM	3789	CA	MSE	D	467	58.653	11.191	-14.238	1.00	27.18		C
		ANISOU	3789	CA	MSE	D	467	3395	2788	4144	304	55	213	C
35		ATOM	3790	CB	MSE	D	467	60.143	11.016	-14.581	1.00	27.16		C
		ANISOU	3790	CB	MSE	D	467	3352	2728	4238	142	90	280	C
		ATOM	3791	CG	MSE	D	467	60.473	9.801	-15.486	1.00	26.75		C
		ANISOU	3791	CG	MSE	D	467	3210	2847	4106	108	154	349	C
		ATOM	3792	SE	MSE	D	467	59.696	8.138	-14.902	0.90	30.05		SE
		ANISOU	3792	SE	MSE	D	467	3540	3499	4378	144	116	232	SE
40		ATOM	3793	CE	MSE	D	467	60.578	8.025	-13.137	1.00	28.88		C
		ANISOU	3793	CE	MSE	D	467	3369	3279	4325	39	26	100	C
		ATOM	3794	C	MSE	D	467	58.470	12.021	-12.971	1.00	27.94		C
		ANISOU	3794	C	MSE	D	467	3565	2749	4304	327	-1	81	C
45		ATOM	3795	O	MSE	D	467	59.154	11.804	-11.978	1.00	28.10		O
		ANISOU	3795	O	MSE	D	467	3577	2745	4357	227	-48	-18	O
		ATOM	3796	N	THR	D	468	57.548	12.977	-13.020	1.00	28.97		N
		ANISOU	3796	N	THR	D	468	3776	2788	4443	470	-3	77	N
		ATOM	3797	CA	THR	D	468	57.137	13.732	-11.838	1.00	30.36		C
50		ANISOU	3797	CA	THR	D	468	4035	2848	4652	533	-37	-73	C
		ATOM	3798	CB	THR	D	468	56.270	14.949	-12.237	1.00	32.44		C
		ANISOU	3798	CB	THR	D	468	4395	2963	4969	710	-26	-37	C
		ATOM	3799	OG1	THR	D	468	57.079	15.883	-12.965	1.00	35.37		O
		ANISOU	3799	OG1	THR	D	468	4863	3109	5468	645	-20	91	O
55		ATOM	3800	CG2	THR	D	468	55.697	15.678	-11.014	1.00	36.00		C
		ANISOU	3800	CG2	THR	D	468	4932	3304	5441	809	-40	-217	C
		ATOM	3801	C	THR	D	468	56.377	12.807	-10.868	1.00	28.96		C
		ANISOU	3801	C	THR	D	468	3791	2867	4345	575	-35	-208	C
		ATOM	3802	O	THR	D	468	55.453	12.082	-11.295	1.00	27.88		O
		ANISOU	3802	O	THR	D	468	3558	2917	4118	657	-2	-178	O
60		ATOM	3803	N	PRO	D	469	56.760	12.819	-9.568	1.00	28.78		N
		ANISOU	3803	N	PRO	D	469	3824	2804	4307	512	-72	-354	N
		ATOM	3804	CA	PRO	D	469	56.011	12.034	-8.581	1.00	28.00		C
		ANISOU	3804	CA	PRO	D	469	3694	2876	4068	554	-47	-469	C
		ATOM	3805	CB	PRO	D	469	56.847	12.161	-7.306	1.00	28.47		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3805	CB	PRO	D	469	3854	2854	4107	451	-118	-600	C
	ATOM	3806	CG	PRO	D	469	57.615	13.422	-7.471	1.00	30.60		C
	ANISOU	3806	CG	PRO	D	469	4223	2871	4532	407	-176	-605	C
	ATOM	3807	CD	PRO	D	469	57.864	13.578	-8.946	1.00	30.30		C
5	ANISOU	3807	CD	PRO	D	469	4118	2793	4602	395	-144	-421	C
	ATOM	3808	C	PRO	D	469	54.628	12.624	-8.344	1.00	28.95		C
	ANISOU	3808	C	PRO	D	469	3830	3009	4161	746	18	-541	C
	ATOM	3809	O	PRO	D	469	54.422	13.821	-8.471	1.00	31.03		O
	ANISOU	3809	O	PRO	D	469	4181	3092	4515	846	15	-558	O
10	ATOM	3810	N	SER	D	470	53.680	11.773	-8.007	1.00	28.12		N
	ANISOU	3810	N	SER	D	470	3630	3107	3946	799	84	-579	N
	ATOM	3811	CA	SER	D	470	52.325	12.211	-7.789	1.00	28.32		C
	ANISOU	3811	CA	SER	D	470	3619	3181	3962	984	162	-647	C
	ATOM	3812	CB	SER	D	470	51.519	12.098	-9.070	1.00	27.33		C
15	ANISOU	3812	CB	SER	D	470	3351	3150	3883	1084	164	-524	C
	ATOM	3813	OG	SER	D	470	50.209	12.579	-8.834	1.00	30.16		O
	ANISOU	3813	OG	SER	D	470	3644	3556	4261	1280	230	-595	O
	ATOM	3814	C	SER	D	470	51.727	11.317	-6.739	1.00	28.11		C
	ANISOU	3814	C	SER	D	470	3546	3336	3798	967	247	-746	C
20	ATOM	3815	O	SER	D	470	51.955	10.097	-6.738	1.00	26.67		O
	ANISOU	3815	O	SER	D	470	3294	3298	3541	842	249	-697	O
	ATOM	3816	N	THR	D	471	50.970	11.922	-5.847	1.00	29.88		N
	ANISOU	3816	N	THR	D	471	3821	3542	3989	1095	330	-882	N
	ATOM	3817	CA	THR	D	471	50.235	11.190	-4.825	1.00	31.76		C
25	ANISOU	3817	CA	THR	D	471	4022	3958	4090	1099	454	-973	C
	ATOM	3818	CB	THR	D	471	50.322	11.895	-3.438	1.00	34.06		C
	ANISOU	3818	CB	THR	D	471	4508	4151	4283	1147	504	-1155	C
	ATOM	3819	OG1	THR	D	471	49.928	13.268	-3.563	1.00	36.80		O
	ANISOU	3819	OG1	THR	D	471	4916	4323	4743	1327	515	-1233	O
30	ATOM	3820	CG2	THR	D	471	51.762	11.842	-2.895	1.00	34.68		C
	ANISOU	3820	CG2	THR	D	471	4765	4112	4299	980	369	-1177	C
	ATOM	3821	C	THR	D	471	48.769	10.996	-5.221	1.00	32.22		C
	ANISOU	3821	C	THR	D	471	3872	4182	4189	1237	567	-962	C
	ATOM	3822	O	THR	D	471	47.976	10.500	-4.422	1.00	33.96		O
35	ANISOU	3822	O	THR	D	471	4032	4552	4321	1256	707	-1035	O
	ATOM	3823	N	GLU	D	472	48.430	11.356	-6.463	1.00	31.70		N
	ANISOU	3823	N	GLU	D	472	3692	4098	4254	1325	502	-862	N
	ATOM	3824	CA	GLU	D	472	47.035	11.363	-6.926	1.00	32.30		C
	ANISOU	3824	CA	GLU	D	472	3552	4318	4400	1483	566	-856	C
40	ATOM	3825	CB	GLU	D	472	46.564	12.792	-7.215	1.00	34.20		C
	ANISOU	3825	CB	GLU	D	472	3825	4402	4768	1721	548	-885	C
	ATOM	3826	CG	GLU	D	472	46.472	13.710	-6.001	1.00	39.23		C
	ANISOU	3826	CG	GLU	D	472	4619	4902	5385	1834	650	-1059	C
	ATOM	3827	CD	GLU	D	472	47.149	15.074	-6.249	1.00	44.76		C
45	ANISOU	3827	CD	GLU	D	472	5528	5294	6185	1917	554	-1063	C
	ATOM	3828	OE1	GLU	D	472	46.462	16.121	-6.201	1.00	47.87		O
	ANISOU	3828	OE1	GLU	D	472	5937	5570	6681	2147	593	-1130	O
	ATOM	3829	OE2	GLU	D	472	48.384	15.090	-6.500	1.00	45.99		O
	ANISOU	3829	OE2	GLU	D	472	5826	5316	6333	1749	444	-998	O
50	ATOM	3830	C	GLU	D	472	46.839	10.501	-8.164	1.00	29.96		C
	ANISOU	3830	C	GLU	D	472	3083	4165	4136	1413	484	-717	C
	ATOM	3831	O	GLU	D	472	45.842	9.804	-8.275	1.00	29.57		O
	ANISOU	3831	O	GLU	D	472	2827	4313	4094	1424	541	-722	O
	ATOM	3832	N	MSE	D	473	47.796	10.559	-9.100	1.00	28.19		N
55	ANISOU	3832	N	MSE	D	473	2943	3839	3930	1336	355	-601	N
	ATOM	3833	CA	MSE	D	473	47.703	9.800	-10.341	1.00	26.31		C
	ANISOU	3833	CA	MSE	D	473	2581	3719	3695	1276	272	-481	C
	ATOM	3834	CB	MSE	D	473	47.452	10.726	-11.552	1.00	27.81		C
	ANISOU	3834	CB	MSE	D	473	2766	3834	3967	1434	167	-380	C
60	ATOM	3835	CG	MSE	D	473	46.264	11.657	-11.443	1.00	26.21		C
	ANISOU	3835	CG	MSE	D	473	2472	3630	3858	1680	188	-429	C
	ATOM	3836	SE	MSE	D	473	44.516	10.785	-11.482	0.90	29.78		SE
	ANISOU	3836	SE	MSE	D	473	2569	4404	4342	1752	231	-487	SE
	ATOM	3837	CE	MSE	D	473	44.552	10.081	-13.324	1.00	24.55		C

# ES 2 454 773 T3

		ANISOU	3837	CE	MSE	D	473	1821	3865	3642	1686	30	-325	C
		ATOM	3838	C	MSE	D	473	48.978	9.045	-10.570	1.00	24.24		C
		ANISOU	3838	C	MSE	D	473	2418	3421	3371	1074	225	-417	C
		ATOM	3839	O	MSE	D	473	50.039	9.420	-10.051	1.00	23.22		O
5		ANISOU	3839	O	MSE	D	473	2450	3138	3233	1006	216	-432	O
		ATOM	3840	N	SER	D	474	48.890	8.004	-11.387	1.00	22.74		N
		ANISOU	3840	N	SER	D	474	2125	3368	3148	983	187	-352	N
		ATOM	3841	CA	SER	D	474	50.092	7.287	-11.803	1.00	20.80		C
		ANISOU	3841	CA	SER	D	474	1959	3086	2859	820	146	-285	C
10		ATOM	3842	CB	SER	D	474	50.489	6.264	-10.751	1.00	19.28		C
		ANISOU	3842	CB	SER	D	474	1787	2935	2604	675	208	-343	C
		ATOM	3843	OG	SER	D	474	51.820	5.854	-10.984	1.00	16.43		O
		ANISOU	3843	OG	SER	D	474	1518	2493	2230	553	164	-287	O
		ATOM	3844	C	SER	D	474	49.928	6.603	-13.137	1.00	20.73		C
15		ANISOU	3844	C	SER	D	474	1868	3182	2825	789	81	-205	C
		ATOM	3845	O	SER	D	474	48.821	6.295	-13.530	1.00	21.95		O
		ANISOU	3845	O	SER	D	474	1877	3482	2983	843	62	-221	O
		ATOM	3846	N	MSE	D	475	51.037	6.376	-13.838	1.00	20.98		N
		ANISOU	3846	N	MSE	D	475	1989	3147	2833	702	46	-127	N
20		ATOM	3847	CA	MSE	D	475	51.056	5.443	-14.964	1.00	21.48		C
		ANISOU	3847	CA	MSE	D	475	2006	3317	2838	639	5	-80	C
		ATOM	3848	CB	MSE	D	475	52.472	5.270	-15.530	1.00	19.83		C
		ANISOU	3848	CB	MSE	D	475	1910	3013	2612	548	10	-6	C
		ATOM	3849	CG	MSE	D	475	52.894	6.455	-16.381	1.00	20.37		C
25		ANISOU	3849	CG	MSE	D	475	2076	2969	2696	631	-15	102	C
		ATOM	3850	SE	MSE	D	475	54.525	6.239	-17.395	0.90	22.90		SE
		ANISOU	3850	SE	MSE	D	475	2500	3209	2992	523	29	211	SE
		ATOM	3851	CE	MSE	D	475	55.763	6.073	-15.923	1.00	15.43		C
		ANISOU	3851	CE	MSE	D	475	1566	2140	2155	395	75	144	C
30		ATOM	3852	C	MSE	D	475	50.505	4.108	-14.458	1.00	21.28		C
		ANISOU	3852	C	MSE	D	475	1873	3425	2786	535	40	-159	C
		ATOM	3853	O	MSE	D	475	50.898	3.647	-13.399	1.00	20.98		O
		ANISOU	3853	O	MSE	D	475	1867	3355	2749	451	102	-203	O
		ATOM	3854	N	ARG	D	476	49.570	3.531	-15.206	1.00	22.47		N
35		ANISOU	3854	N	ARG	D	476	1904	3721	2914	539	-9	-173	N
		ATOM	3855	CA	ARG	D	476	48.834	2.320	-14.818	1.00	22.84		C
		ANISOU	3855	CA	ARG	D	476	1826	3891	2961	432	23	-248	C
		ATOM	3856	CB	ARG	D	476	47.933	1.869	-15.985	1.00	23.67		C
		ANISOU	3856	CB	ARG	D	476	1807	4140	3046	439	-79	-261	C
40		ATOM	3857	CG	ARG	D	476	47.287	0.475	-15.783	1.00	27.51		C
		ANISOU	3857	CG	ARG	D	476	2172	4732	3549	284	-56	-339	C
		ATOM	3858	CD	ARG	D	476	46.787	-0.218	-17.071	1.00	27.82		C
		ANISOU	3858	CD	ARG	D	476	2140	4882	3546	238	-183	-369	C
		ATOM	3859	NE	ARG	D	476	47.530	0.020	-18.335	1.00	32.26		N
45		ANISOU	3859	NE	ARG	D	476	2845	5411	4002	288	-273	-313	N
		ATOM	3860	CZ	ARG	D	476	48.407	-0.822	-18.879	1.00	31.84		C
		ANISOU	3860	CZ	ARG	D	476	2916	5306	3876	190	-263	-319	C
		ATOM	3861	NH1	ARG	D	476	48.759	-1.946	-18.240	1.00	32.87		N
		ANISOU	3861	NH1	ARG	D	476	3064	5384	4042	43	-180	-370	N
50		ATOM	3862	NH2	ARG	D	476	48.962	-0.521	-20.040	1.00	28.92		N
		ANISOU	3862	NH2	ARG	D	476	2666	4927	3395	249	-323	-268	N
		ATOM	3863	C	ARG	D	476	49.715	1.168	-14.282	1.00	20.44		C
		ANISOU	3863	C	ARG	D	476	1601	3533	2632	271	84	-261	C
		ATOM	3864	O	ARG	D	476	50.603	0.659	-14.985	1.00	19.53		O
55		ANISOU	3864	O	ARG	D	476	1567	3372	2481	213	57	-227	O
		ATOM	3865	N	GLY	D	477	49.476	0.777	-13.028	1.00	20.13		N
		ANISOU	3865	N	GLY	D	477	1544	3497	2606	212	174	-303	N
		ATOM	3866	CA	GLY	D	477	50.241	-0.307	-12.377	1.00	19.10		C
		ANISOU	3866	CA	GLY	D	477	1500	3308	2451	77	223	-300	C
60		ATOM	3867	C	GLY	D	477	51.654	0.032	-11.943	1.00	18.37		C
		ANISOU	3867	C	GLY	D	477	1558	3076	2345	81	215	-259	C
		ATOM	3868	O	GLY	D	477	52.351	-0.837	-11.447	1.00	18.98		O
		ANISOU	3868	O	GLY	D	477	1702	3100	2407	-7	233	-246	O
		ATOM	3869	N	ILE	D	478	52.094	1.285	-12.110	1.00	18.42		N

## ES 2 454 773 T3

			ANISOU 3869	N	ILE	D	478	1614	3013	2371	179	180	-235	N
			ATOM 3870	CA	ILE	D	478	53.467	1.698	-11.747	1.00	17.40		C
			ANISOU 3870	CA	ILE	D	478	1602	2752	2259	167	158	-203	C
			ATOM 3871	CB	ILE	D	478	54.167	2.509	-12.862	1.00	17.64		C
5			ANISOU 3871	CB	ILE	D	478	1662	2712	2328	215	115	-140	C
			ATOM 3872	CG1	ILE	D	478	53.884	1.926	-14.282	1.00	18.18		C
			ANISOU 3872	CG1	ILE	D	478	1682	2862	2363	211	98	-108	C
			ATOM 3873	CD1	ILE	D	478	54.456	0.525	-14.545	1.00	17.82		C
10			ANISOU 3873	CD1	ILE	D	478	1642	2831	2299	109	115	-115	C
			ATOM 3874	CG2	ILE	D	478	55.699	2.688	-12.556	1.00	16.84		C
			ANISOU 3874	CG2	ILE	D	478	1638	2484	2276	163	98	-107	C
			ATOM 3875	C	ILE	D	478	53.516	2.522	-10.450	1.00	18.27		C
			ANISOU 3875	C	ILE	D	478	1780	2801	2362	205	175	-248	C
			ATOM 3876	O	ILE	D	478	52.759	3.501	-10.278	1.00	19.57		O
15			ANISOU 3876	O	ILE	D	478	1928	2971	2538	304	192	-284	O
			ATOM 3877	N	ARG	D	479	54.407	2.131	-9.538	1.00	17.66		N
			ANISOU 3877	N	ARG	D	479	1785	2662	2261	138	160	-252	N
			ATOM 3878	CA	ARG	D	479	54.620	2.867	-8.297	1.00	18.17		C
			ANISOU 3878	CA	ARG	D	479	1947	2665	2291	163	152	-308	C
20			ATOM 3879	CB	ARG	D	479	53.947	2.147	-7.108	1.00	19.25		C
			ANISOU 3879	CB	ARG	D	479	2115	2880	2318	131	225	-348	C
			ATOM 3880	CG	ARG	D	479	52.436	1.937	-7.217	1.00	19.34		C
			ANISOU 3880	CG	ARG	D	479	2015	3018	2313	163	334	-376	C
			ATOM 3881	CD	ARG	D	479	51.652	3.264	-7.152	1.00	22.05		C
25			ANISOU 3881	CD	ARG	D	479	2332	3364	2683	298	368	-442	C
			ATOM 3882	NE	ARG	D	479	50.213	3.019	-7.118	1.00	23.03		N
			ANISOU 3882	NE	ARG	D	479	2316	3626	2807	332	477	-475	N
			ATOM 3883	CZ	ARG	D	479	49.448	2.766	-8.182	1.00	24.23		C
			ANISOU 3883	CZ	ARG	D	479	2306	3868	3033	347	466	-451	C
30			ATOM 3884	NH1	ARG	D	479	49.944	2.768	-9.423	1.00	22.96		N
			ANISOU 3884	NH1	ARG	D	479	2127	3672	2923	344	360	-392	N
			ATOM 3885	NH2	ARG	D	479	48.161	2.542	-7.998	1.00	26.72		N
			ANISOU 3885	NH2	ARG	D	479	2471	4316	3365	367	563	-491	N
			ATOM 3886	C	ARG	D	479	56.113	3.010	-8.047	1.00	18.00		C
35			ANISOU 3886	C	ARG	D	479	2000	2531	2310	111	60	-286	C
			ATOM 3887	O	ARG	D	479	56.893	2.152	-8.450	1.00	17.43		O
			ANISOU 3887	O	ARG	D	479	1902	2452	2268	49	31	-230	O
			ATOM 3888	N	VAL	D	480	56.506	4.091	-7.376	1.00	18.88		N
			ANISOU 3888	N	VAL	D	480	2194	2547	2431	138	13	-340	N
40			ATOM 3889	CA	VAL	D	480	57.872	4.288	-6.941	1.00	18.12		C
			ANISOU 3889	CA	VAL	D	480	2153	2351	2382	77	-95	-341	C
			ATOM 3890	CB	VAL	D	480	58.424	5.658	-7.477	1.00	19.53		C
			ANISOU 3890	CB	VAL	D	480	2339	2392	2689	91	-137	-344	C
			ATOM 3891	CG1	VAL	D	480	59.811	6.004	-6.914	1.00	16.90		C
45			ANISOU 3891	CG1	VAL	D	480	2041	1951	2430	9	-261	-368	C
			ATOM 3892	CG2	VAL	D	480	58.462	5.665	-8.979	1.00	16.55		C
			ANISOU 3892	CG2	VAL	D	480	1871	2019	2398	100	-88	-246	C
			ATOM 3893	C	VAL	D	480	57.914	4.199	-5.402	1.00	20.38		C
			ANISOU 3893	C	VAL	D	480	2561	2642	2541	65	-138	-419	C
50			ATOM 3894	O	VAL	D	480	57.129	4.864	-4.687	1.00	20.96		O
			ANISOU 3894	O	VAL	D	480	2713	2720	2531	126	-92	-507	O
			ATOM 3895	N	SER	D	481	58.821	3.365	-4.894	1.00	20.39		N
			ANISOU 3895	N	SER	D	481	2584	2645	2517	1	-225	-387	N
			ATOM 3896	CA	SER	D	481	59.058	3.257	-3.454	1.00	22.99		C
55			ANISOU 3896	CA	SER	D	481	3052	2978	2703	-11	-302	-444	C
			ATOM 3897	CB	SER	D	481	59.874	1.996	-3.174	1.00	22.03		C
			ANISOU 3897	CB	SER	D	481	2928	2881	2562	-61	-385	-362	C
			ATOM 3898	OG	SER	D	481	60.138	1.858	-1.810	1.00	21.23		O
			ANISOU 3898	OG	SER	D	481	2978	2789	2300	-66	-480	-399	O
60			ATOM 3899	C	SER	D	481	59.757	4.490	-2.835	1.00	25.71		C
			ANISOU 3899	C	SER	D	481	3483	3214	3072	-19	-429	-546	C
			ATOM 3900	O	SER	D	481	60.658	5.061	-3.420	1.00	25.93		O
			ANISOU 3900	O	SER	D	481	3439	3147	3265	-59	-511	-535	O
			ATOM 3901	N	LYS	D	482	59.321	4.900	-1.655	1.00	29.14		N



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3901	N	LYS	D	482	4076	3658	3339	13	-436	-651	N
	ATOM	3902	CA	LYS	D	482	60.019	5.935	-0.899	1.00	33.36		C
	ANISOU	3902	CA	LYS	D	482	4723	4086	3866	-7	-583	-772	C
	ATOM	3903	CB	LYS	D	482	59.022	6.840	-0.155	1.00	34.30		C
5	ANISOU	3903	CB	LYS	D	482	4994	4191	3848	75	-492	-915	C
	ATOM	3904	CG	LYS	D	482	58.218	7.746	-1.062	1.00	35.12		C
	ANISOU	3904	CG	LYS	D	482	5025	4233	4086	151	-361	-933	C
	ATOM	3905	CD	LYS	D	482	57.186	8.541	-0.242	1.00	38.57		C
	ANISOU	3905	CD	LYS	D	482	5604	4663	4387	260	-254	-1083	C
10	ATOM	3906	CE	LYS	D	482	57.252	10.056	-0.537	1.00	45.10		C
	ANISOU	3906	CE	LYS	D	482	6478	5298	5359	308	-284	-1185	C
	ATOM	3907	NZ	LYS	D	482	56.099	10.810	0.069	1.00	47.81		N
	ANISOU	3907	NZ	LYS	D	482	6933	5632	5603	453	-143	-1329	N
	ATOM	3908	C	LYS	D	482	61.038	5.332	0.072	1.00	35.24		C
15	ANISOU	3908	C	LYS	D	482	5039	4343	4008	-65	-774	-772	C
	ATOM	3909	O	LYS	D	482	61.727	6.074	0.758	1.00	37.45		O
	ANISOU	3909	O	LYS	D	482	5410	4546	4275	-99	-937	-880	O
	ATOM	3910	N	MSE	D	483	61.139	3.993	0.102	1.00	35.93		N
	ANISOU	3910	N	MSE	D	483	5093	4523	4037	-74	-766	-651	N
20	ATOM	3911	CA	MSE	D	483	62.049	3.244	0.994	1.00	38.63		C
	ANISOU	3911	CA	MSE	D	483	5507	4890	4278	-103	-953	-617	C
	ATOM	3912	CB	MSE	D	483	61.526	1.809	1.265	1.00	38.49		C
	ANISOU	3912	CB	MSE	D	483	5539	4971	4113	-80	-858	-492	C
	ATOM	3913	CG	MSE	D	483	60.174	1.672	1.929	1.00	38.95		C
25	ANISOU	3913	CG	MSE	D	483	5746	5112	3940	-43	-667	-517	C
	ATOM	3914	SE	MSE	D	483	60.058	2.796	3.498	0.90	48.19		SE
	ANISOU	3914	SE	MSE	D	483	7190	6282	4839	-11	-748	-705	SE
	ATOM	3915	CE	MSE	D	483	61.347	1.963	4.722	1.00	38.88		C
	ANISOU	3915	CE	MSE	D	483	6178	5122	3472	-35	-1049	-643	C
30	ATOM	3916	C	MSE	D	483	63.440	3.077	0.385	1.00	39.71		C
	ANISOU	3916	C	MSE	D	483	5470	4969	4647	-156	-1120	-557	C
	ATOM	3917	O	MSE	D	483	63.582	2.646	-0.783	1.00	39.13		O
	ANISOU	3917	O	MSE	D	483	5221	4891	4756	-163	-1031	-463	O
	ATOM	3918	OXT	MSE	D	483	64.451	3.268	1.060	1.00	42.00		O
35	ANISOU	3918	OXT	MSE	D	483	5786	5231	4942	-190	-1344	-601	O
	ATOM	3919	N	SER	E	320	17.288	-30.979	-15.413	1.00	45.14		N
	ANISOU	3919	N	SER	E	320	4874	5333	6943	-1348	253	-1314	N
	ATOM	3920	CA	SER	E	320	18.777	-31.109	-15.580	1.00	43.13		C
	ANISOU	3920	CA	SER	E	320	4877	4914	6598	-1261	271	-1210	C
40	ATOM	3921	CB	SER	E	320	19.237	-30.250	-16.770	1.00	42.79		C
	ANISOU	3921	CB	SER	E	320	4873	4954	6429	-1088	116	-1208	C
	ATOM	3922	OG	SER	E	320	20.570	-30.562	-17.153	1.00	42.94		O
	ANISOU	3922	OG	SER	E	320	5102	4848	6364	-1042	136	-1161	O
	ATOM	3923	C	SER	E	320	19.579	-30.728	-14.308	1.00	40.67		C
45	ANISOU	3923	C	SER	E	320	4675	4506	6270	-1199	402	-1051	C
	ATOM	3924	O	SER	E	320	20.651	-30.104	-14.400	1.00	38.93		O
	ANISOU	3924	O	SER	E	320	4584	4241	5966	-1052	384	-962	O
	ATOM	3925	N	SER	E	321	19.089	-31.107	-13.126	1.00	39.80		N
	ANISOU	3925	N	SER	E	321	4515	4379	6227	-1326	537	-1019	N
50	ATOM	3926	CA	SER	E	321	19.714	-30.590	-11.897	1.00	37.65		C
	ANISOU	3926	CA	SER	E	321	4321	4074	5908	-1264	645	-884	C
	ATOM	3927	CB	SER	E	321	18.684	-29.870	-11.033	1.00	38.56		C
	ANISOU	3927	CB	SER	E	321	4239	4357	6053	-1282	719	-919	C
	ATOM	3928	OG	SER	E	321	17.883	-30.781	-10.335	1.00	42.51		O
55	ANISOU	3928	OG	SER	E	321	4667	4871	6613	-1506	844	-940	O
	ATOM	3929	C	SER	E	321	20.577	-31.528	-11.043	1.00	35.74		C
	ANISOU	3929	C	SER	E	321	4273	3651	5656	-1347	751	-758	C
	ATOM	3930	O	SER	E	321	20.985	-31.157	-9.954	1.00	35.15		O
	ANISOU	3930	O	SER	E	321	4249	3580	5525	-1318	835	-651	O
60	ATOM	3931	N	SER	E	322	20.888	-32.716	-11.566	1.00	34.84		N
	ANISOU	3931	N	SER	E	322	4269	3374	5595	-1437	733	-776	N
	ATOM	3932	CA	SER	E	322	21.599	-33.753	-10.828	1.00	33.04		C
	ANISOU	3932	CA	SER	E	322	4224	2938	5393	-1514	809	-653	C
	ATOM	3933	CB	SER	E	322	20.570	-34.509	-9.996	1.00	35.56		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3933	CB	SER	E	322	4485	3245	5779	-1754	925	-626	C
	ATOM	3934	OG	SER	E	322	21.115	-35.024	-8.821	1.00	37.24		O
	ANISOU	3934	OG	SER	E	322	4855	3332	5961	-1811	1016	-441	O
	ATOM	3935	C	SER	E	322	22.235	-34.682	-11.863	1.00	31.91		C
5	ANISOU	3935	C	SER	E	322	4198	2615	5311	-1502	734	-725	C
	ATOM	3936	O	SER	E	322	21.534	-35.240	-12.700	1.00	32.42		O
	ANISOU	3936	O	SER	E	322	4194	2677	5448	-1608	693	-870	O
	ATOM	3937	N	PHE	E	323	23.554	-34.840	-11.834	1.00	29.63		N
	ANISOU	3937	N	PHE	E	323	4068	2192	4996	-1371	715	-650	N
10	ATOM	3938	CA	PHE	E	323	24.244	-35.599	-12.891	1.00	29.75		C
	ANISOU	3938	CA	PHE	E	323	4174	2063	5065	-1325	650	-758	C
	ATOM	3939	CB	PHE	E	323	24.149	-34.903	-14.263	1.00	28.38		C
	ANISOU	3939	CB	PHE	E	323	3911	2061	4813	-1241	558	-915	C
	ATOM	3940	CG	PHE	E	323	24.548	-33.447	-14.229	1.00	26.56		C
15	ANISOU	3940	CG	PHE	E	323	3636	2007	4449	-1083	532	-845	C
	ATOM	3941	CD1	PHE	E	323	25.862	-33.076	-14.466	1.00	22.90		C
	ANISOU	3941	CD1	PHE	E	323	3264	1521	3918	-932	519	-808	C
	ATOM	3942	CE1	PHE	E	323	26.235	-31.770	-14.412	1.00	24.39		C
	ANISOU	3942	CE1	PHE	E	323	3422	1843	4002	-815	501	-741	C
20	ATOM	3943	CZ	PHE	E	323	25.292	-30.792	-14.111	1.00	23.48		C
	ANISOU	3943	CZ	PHE	E	323	3191	1869	3862	-821	488	-715	C
	ATOM	3944	CE2	PHE	E	323	23.978	-31.148	-13.862	1.00	24.40		C
	ANISOU	3944	CE2	PHE	E	323	3199	2025	4048	-947	500	-764	C
	ATOM	3945	CD2	PHE	E	323	23.615	-32.469	-13.928	1.00	24.02		C
25	ANISOU	3945	CD2	PHE	E	323	3176	1861	4091	-1090	526	-826	C
	ATOM	3946	C	PHE	E	323	25.685	-35.852	-12.537	1.00	29.09		C
	ANISOU	3946	C	PHE	E	323	4245	1828	4982	-1184	651	-658	C
	ATOM	3947	O	PHE	E	323	26.186	-35.304	-11.578	1.00	27.33		O
	ANISOU	3947	O	PHE	E	323	4053	1639	4692	-1113	681	-508	O
30	ATOM	3948	N	SER	E	324	26.322	-36.718	-13.318	1.00	31.14		N
	ANISOU	3948	N	SER	E	324	4586	1925	5321	-1147	614	-765	N
	ATOM	3949	CA	SER	E	324	27.734	-37.036	-13.197	1.00	31.70		C
	ANISOU	3949	CA	SER	E	324	4771	1855	5418	-989	600	-719	C
	ATOM	3950	CB	SER	E	324	27.870	-38.553	-13.286	1.00	34.12		C
35	ANISOU	3950	CB	SER	E	324	5192	1860	5913	-1047	596	-770	C
	ATOM	3951	OG	SER	E	324	29.065	-38.980	-12.669	1.00	38.99		O
	ANISOU	3951	OG	SER	E	324	5921	2300	6591	-905	581	-655	O
	ATOM	3952	C	SER	E	324	28.506	-36.359	-14.344	1.00	30.11		C
	ANISOU	3952	C	SER	E	324	4525	1797	5118	-844	560	-855	C
40	ATOM	3953	O	SER	E	324	28.106	-36.436	-15.500	1.00	31.59		O
	ANISOU	3953	O	SER	E	324	4663	2058	5282	-883	530	-1033	O
	ATOM	3954	N	PHE	E	325	29.598	-35.683	-14.036	1.00	28.89		N
	ANISOU	3954	N	PHE	E	325	4383	1701	4891	-694	561	-773	N
	ATOM	3955	CA	PHE	E	325	30.474	-35.145	-15.073	1.00	27.03		C
45	ANISOU	3955	CA	PHE	E	325	4117	1587	4568	-576	545	-888	C
	ATOM	3956	CB	PHE	E	325	30.028	-33.721	-15.485	1.00	25.71		C
	ANISOU	3956	CB	PHE	E	325	3861	1671	4236	-581	531	-870	C
	ATOM	3957	CG	PHE	E	325	30.847	-33.123	-16.611	1.00	24.39		C
	ANISOU	3957	CG	PHE	E	325	3676	1643	3950	-499	524	-964	C
50	ATOM	3958	CD1	PHE	E	325	30.800	-33.667	-17.896	1.00	26.53		C
	ANISOU	3958	CD1	PHE	E	325	3946	1946	4189	-527	510	-1154	C
	ATOM	3959	CE1	PHE	E	325	31.557	-33.143	-18.941	1.00	26.12		C
	ANISOU	3959	CE1	PHE	E	325	3882	2048	3996	-474	523	-1236	C
	ATOM	3960	CZ	PHE	E	325	32.370	-32.062	-18.716	1.00	25.88		C
55	ANISOU	3960	CZ	PHE	E	325	3837	2119	3876	-402	549	-1121	C
	ATOM	3961	CE2	PHE	E	325	32.432	-31.495	-17.417	1.00	23.76		C
	ANISOU	3961	CE2	PHE	E	325	3565	1800	3661	-371	553	-942	C
	ATOM	3962	CD2	PHE	E	325	31.668	-32.040	-16.383	1.00	22.30		C
	ANISOU	3962	CD2	PHE	E	325	3395	1484	3596	-415	540	-870	C
60	ATOM	3963	C	PHE	E	325	31.902	-35.144	-14.575	1.00	26.40		C
	ANISOU	3963	C	PHE	E	325	4074	1446	4509	-425	553	-823	C
	ATOM	3964	O	PHE	E	325	32.194	-34.540	-13.538	1.00	26.23		O
	ANISOU	3964	O	PHE	E	325	4054	1463	4449	-387	556	-660	O
	ATOM	3965	N	GLY	E	326	32.796	-35.792	-15.322	1.00	27.37		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3965	N	GLY	E	326	4212	1496	4692	-336	554	-970	N
	ATOM	3966	CA	GLY	E	326	34.235	-35.778	-15.041	1.00	26.54		C
	ANISOU	3966	CA	GLY	E	326	4100	1366	4617	-174	556	-952	C
	ATOM	3967	C	GLY	E	326	34.617	-36.415	-13.719	1.00	27.28		C
5	ANISOU	3967	C	GLY	E	326	4264	1264	4837	-114	519	-785	C
	ATOM	3968	O	GLY	E	326	35.626	-36.061	-13.130	1.00	26.73		O
	ANISOU	3968	O	GLY	E	326	4170	1232	4755	5	500	-704	O
	ATOM	3969	N	GLY	E	327	33.802	-37.361	-13.255	1.00	28.74		N
	ANISOU	3969	N	GLY	E	327	4538	1245	5136	-209	504	-726	N
10	ATOM	3970	CA	GLY	E	327	34.068	-38.077	-12.017	1.00	29.31		C
	ANISOU	3970	CA	GLY	E	327	4711	1111	5316	-173	461	-535	C
	ATOM	3971	C	GLY	E	327	33.462	-37.392	-10.811	1.00	28.45		C
	ANISOU	3971	C	GLY	E	327	4617	1109	5084	-268	472	-313	C
	ATOM	3972	O	GLY	E	327	33.702	-37.801	-9.695	1.00	29.85		O
15	ANISOU	3972	O	GLY	E	327	4879	1173	5289	-249	436	-125	O
	ATOM	3973	N	PHE	E	328	32.672	-36.346	-11.040	1.00	27.12		N
	ANISOU	3973	N	PHE	E	328	4367	1164	4775	-365	519	-340	N
	ATOM	3974	CA	PHE	E	328	32.019	-35.572	-9.968	1.00	26.05		C
	ANISOU	3974	CA	PHE	E	328	4218	1162	4519	-453	548	-181	C
20	ATOM	3975	CB	PHE	E	328	32.455	-34.102	-10.014	1.00	23.69		C
	ANISOU	3975	CB	PHE	E	328	3822	1103	4075	-380	554	-197	C
	ATOM	3976	CG	PHE	E	328	33.877	-33.872	-9.572	1.00	23.60		C
	ANISOU	3976	CG	PHE	E	328	3813	1108	4048	-226	510	-147	C
	ATOM	3977	CD1	PHE	E	328	34.167	-33.591	-8.245	1.00	22.43		C
25	ANISOU	3977	CD1	PHE	E	328	3694	1000	3828	-211	488	14	C
	ATOM	3978	CE1	PHE	E	328	35.475	-33.394	-7.831	1.00	23.44		C
	ANISOU	3978	CE1	PHE	E	328	3804	1160	3943	-72	429	48	C
	ATOM	3979	CZ	PHE	E	328	36.506	-33.431	-8.745	1.00	21.73		C
	ANISOU	3979	CZ	PHE	E	328	3523	942	3793	50	409	-84	C
30	ATOM	3980	CE2	PHE	E	328	36.228	-33.706	-10.080	1.00	22.34		C
	ANISOU	3980	CE2	PHE	E	328	3575	984	3929	31	451	-248	C
	ATOM	3981	CD2	PHE	E	328	34.921	-33.932	-10.485	1.00	21.48		C
	ANISOU	3981	CD2	PHE	E	328	3500	839	3823	-105	492	-276	C
	ATOM	3982	C	PHE	E	328	30.497	-35.621	-10.086	1.00	26.19		C
35	ANISOU	3982	C	PHE	E	328	4206	1214	4532	-642	600	-207	C
	ATOM	3983	O	PHE	E	328	29.950	-35.431	-11.172	1.00	26.07		O
	ANISOU	3983	O	PHE	E	328	4118	1269	4517	-682	603	-365	O
	ATOM	3984	N	THR	E	329	29.819	-35.857	-8.968	1.00	26.51		N
	ANISOU	3984	N	THR	E	329	4290	1228	4553	-764	638	-54	N
40	ATOM	3985	CA	THR	E	329	28.360	-35.708	-8.900	1.00	26.59		C
	ANISOU	3985	CA	THR	E	329	4228	1329	4544	-949	705	-80	C
	ATOM	3986	CB	THR	E	329	27.755	-36.554	-7.740	1.00	28.57		C
	ANISOU	3986	CB	THR	E	329	4571	1463	4820	-1117	762	93	C
	ATOM	3987	OG1	THR	E	329	28.147	-37.920	-7.876	1.00	29.01		O
45	ANISOU	3987	OG1	THR	E	329	4767	1221	5033	-1129	723	133	O
	ATOM	3988	CG2	THR	E	329	26.239	-36.497	-7.744	1.00	28.98		C
	ANISOU	3988	CG2	THR	E	329	4518	1619	4875	-1326	845	36	C
	ATOM	3989	C	THR	E	329	28.025	-34.221	-8.688	1.00	25.15		C
	ANISOU	3989	C	THR	E	329	3921	1415	4220	-919	731	-98	C
50	ATOM	3990	O	THR	E	329	28.444	-33.613	-7.696	1.00	24.93		O
	ANISOU	3990	O	THR	E	329	3907	1473	4091	-873	746	12	O
	ATOM	3991	N	PHE	E	330	27.315	-33.629	-9.642	1.00	24.51		N
	ANISOU	3991	N	PHE	E	330	3721	1458	4135	-936	723	-244	N
	ATOM	3992	CA	PHE	E	330	26.858	-32.240	-9.556	1.00	23.01		C
55	ANISOU	3992	CA	PHE	E	330	3410	1483	3850	-900	734	-274	C
	ATOM	3993	CB	PHE	E	330	26.817	-31.604	-10.941	1.00	21.72		C
	ANISOU	3993	CB	PHE	E	330	3173	1403	3676	-825	666	-409	C
	ATOM	3994	CG	PHE	E	330	28.177	-31.190	-11.498	1.00	21.21		C
	ANISOU	3994	CG	PHE	E	330	3166	1329	3566	-677	621	-415	C
60	ATOM	3995	CD1	PHE	E	330	28.458	-29.852	-11.723	1.00	15.46		C
	ANISOU	3995	CD1	PHE	E	330	2388	729	2756	-587	599	-415	C
	ATOM	3996	CE1	PHE	E	330	29.657	-29.480	-12.246	1.00	17.14		C
	ANISOU	3996	CE1	PHE	E	330	2641	946	2926	-487	576	-422	C
	ATOM	3997	CZ	PHE	E	330	30.629	-30.427	-12.567	1.00	16.73		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	3997	CZ	PHE	E	330	2657	787	2913	-450	574	-450	C
	ATOM	3998	CE2	PHE	E	330	30.376	-31.764	-12.358	1.00	17.20		C
	ANISOU	3998	CE2	PHE	E	330	2768	698	3069	-508	583	-460	C
	ATOM	3999	CD2	PHE	E	330	29.154	-32.149	-11.835	1.00	21.06		C
5	ANISOU	3999	CD2	PHE	E	330	3238	1164	3598	-632	606	-432	C
	ATOM	4000	C	PHE	E	330	25.453	-32.252	-9.007	1.00	24.29		C
	ANISOU	4000	C	PHE	E	330	3474	1732	4023	-1056	804	-281	C
	ATOM	4001	O	PHE	E	330	24.630	-33.022	-9.465	1.00	26.43		O
	ANISOU	4001	O	PHE	E	330	3710	1954	4378	-1183	811	-348	O
10	ATOM	4002	N	LYS	E	331	25.180	-31.429	-7.999	1.00	24.67		N
	ANISOU	4002	N	LYS	E	331	3469	1917	3990	-1057	863	-230	N
	ATOM	4003	CA	LYS	E	331	23.812	-31.224	-7.513	1.00	26.44		C
	ANISOU	4003	CA	LYS	E	331	3552	2275	4217	-1188	945	-275	C
	ATOM	4004	CB	LYS	E	331	23.617	-31.802	-6.093	1.00	27.86		C
15	ANISOU	4004	CB	LYS	E	331	3795	2455	4336	-1333	1061	-141	C
	ATOM	4005	CG	LYS	E	331	23.960	-33.297	-5.951	1.00	31.24		C
	ANISOU	4005	CG	LYS	E	331	4390	2659	4822	-1444	1064	-17	C
	ATOM	4006	CD	LYS	E	331	23.547	-33.844	-4.584	1.00	33.05		C
	ANISOU	4006	CD	LYS	E	331	4681	2905	4972	-1626	1184	138	C
20	ATOM	4007	CE	LYS	E	331	23.640	-35.361	-4.566	1.00	38.36		C
	ANISOU	4007	CE	LYS	E	331	5513	3318	5742	-1762	1182	262	C
	ATOM	4008	NZ	LYS	E	331	22.905	-35.921	-3.365	1.00	42.80		N
	ANISOU	4008	NZ	LYS	E	331	6117	3916	6230	-2004	1321	413	N
	ATOM	4009	C	LYS	E	331	23.523	-29.732	-7.509	1.00	25.02		C
25	ANISOU	4009	C	LYS	E	331	3240	2275	3994	-1072	934	-357	C
	ATOM	4010	O	LYS	E	331	24.129	-28.997	-6.727	1.00	24.10		O
	ANISOU	4010	O	LYS	E	331	3157	2208	3793	-994	956	-308	O
	ATOM	4011	N	ARG	E	332	22.604	-29.291	-8.370	1.00	25.04		N
	ANISOU	4011	N	ARG	E	332	3089	2363	4061	-1059	886	-484	N
30	ATOM	4012	CA	ARG	E	332	22.229	-27.881	-8.446	1.00	24.35		C
	ANISOU	4012	CA	ARG	E	332	2874	2411	3969	-932	855	-562	C
	ATOM	4013	CB	ARG	E	332	21.285	-27.616	-9.610	1.00	25.25		C
	ANISOU	4013	CB	ARG	E	332	2839	2593	4163	-905	757	-680	C
	ATOM	4014	CG	ARG	E	332	21.014	-26.115	-9.816	1.00	21.87		C
35	ANISOU	4014	CG	ARG	E	332	2303	2255	3752	-736	689	-736	C
	ATOM	4015	CD	ARG	E	332	20.462	-25.836	-11.209	1.00	20.39		C
	ANISOU	4015	CD	ARG	E	332	2030	2105	3611	-667	535	-801	C
	ATOM	4016	NE	ARG	E	332	19.065	-26.242	-11.251	1.00	24.14		N
	ANISOU	4016	NE	ARG	E	332	2301	2699	4172	-764	543	-916	N
40	ATOM	4017	CZ	ARG	E	332	18.397	-26.578	-12.351	1.00	23.40		C
	ANISOU	4017	CZ	ARG	E	332	2117	2660	4116	-788	424	-991	C
	ATOM	4018	NH1	ARG	E	332	18.988	-26.571	-13.538	1.00	21.11		N
	ANISOU	4018	NH1	ARG	E	332	1938	2320	3762	-722	293	-959	N
	ATOM	4019	NH2	ARG	E	332	17.126	-26.891	-12.252	1.00	20.98		N
45	ANISOU	4019	NH2	ARG	E	332	1594	2479	3898	-885	440	-1109	N
	ATOM	4020	C	ARG	E	332	21.525	-27.438	-7.198	1.00	26.32		C
	ANISOU	4020	C	ARG	E	332	3014	2794	4193	-986	977	-590	C
	ATOM	4021	O	ARG	E	332	20.536	-28.054	-6.779	1.00	27.98		O
	ANISOU	4021	O	ARG	E	332	3124	3075	4432	-1144	1068	-625	O
50	ATOM	4022	N	THR	E	333	22.010	-26.355	-6.605	1.00	25.21		N
	ANISOU	4022	N	THR	E	333	2884	2698	3998	-869	988	-593	N
	ATOM	4023	CA	THR	E	333	21.397	-25.862	-5.375	1.00	26.76		C
	ANISOU	4023	CA	THR	E	333	2975	3042	4151	-911	1115	-652	C
	ATOM	4024	CB	THR	E	333	22.430	-25.785	-4.254	1.00	26.26		C
55	ANISOU	4024	CB	THR	E	333	3060	2971	3947	-914	1174	-557	C
	ATOM	4025	OG1	THR	E	333	23.540	-25.025	-4.725	1.00	26.60		O
	ANISOU	4025	OG1	THR	E	333	3196	2922	3989	-755	1066	-537	O
	ATOM	4026	CG2	THR	E	333	22.913	-27.195	-3.863	1.00	26.22		C
	ANISOU	4026	CG2	THR	E	333	3215	2876	3869	-1058	1210	-394	C
60	ATOM	4027	C	THR	E	333	20.663	-24.526	-5.541	1.00	26.87		C
	ANISOU	4027	C	THR	E	333	2805	3156	4249	-774	1087	-809	C
	ATOM	4028	O	THR	E	333	19.854	-24.162	-4.697	1.00	28.07		O
	ANISOU	4028	O	THR	E	333	2810	3455	4401	-809	1199	-916	O
	ATOM	4029	N	SER	E	334	20.951	-23.808	-6.627	1.00	26.17		N

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4029	N	SER	E	334	2727	2986	4232	-617	940	-820	N
	ATOM	4030	CA	SER	E	334	20.279	-22.542	-6.963	1.00	27.33		C
	ANISOU	4030	CA	SER	E	334	2719	3177	4488	-459	871	-942	C
	ATOM	4031	CB	SER	E	334	21.102	-21.370	-6.495	1.00	26.24		C
5	ANISOU	4031	CB	SER	E	334	2660	2977	4331	-331	863	-947	C
	ATOM	4032	OG	SER	E	334	20.687	-20.972	-5.253	1.00	30.33		O
	ANISOU	4032	OG	SER	E	334	3084	3610	4830	-352	996	-1061	O
	ATOM	4033	C	SER	E	334	20.227	-22.353	-8.446	1.00	27.14		C
	ANISOU	4033	C	SER	E	334	2699	3081	4532	-363	695	-914	C
10	ATOM	4034	O	SER	E	334	21.097	-22.860	-9.148	1.00	24.82		O
	ANISOU	4034	O	SER	E	334	2565	2688	4175	-384	635	-806	O
	ATOM	4035	N	GLY	E	335	19.259	-21.545	-8.895	1.00	28.15		N
	ANISOU	4035	N	GLY	E	335	2651	3264	4780	-243	609	-1014	N
	ATOM	4036	CA	GLY	E	335	19.198	-21.137	-10.292	1.00	27.93		C
15	ANISOU	4036	CA	GLY	E	335	2635	3180	4796	-127	415	-971	C
	ATOM	4037	C	GLY	E	335	18.565	-22.157	-11.198	1.00	28.12		C
	ANISOU	4037	C	GLY	E	335	2593	3273	4817	-224	346	-983	C
	ATOM	4038	O	GLY	E	335	17.901	-23.072	-10.736	1.00	29.23		O
	ANISOU	4038	O	GLY	E	335	2627	3506	4972	-375	446	-1053	O
20	ATOM	4039	N	SER	E	336	18.775	-21.971	-12.500	1.00	28.38		N
	ANISOU	4039	N	SER	E	336	2694	3267	4823	-150	176	-918	N
	ATOM	4040	CA	SER	E	336	18.131	-22.753	-13.569	1.00	29.07		C
	ANISOU	4040	CA	SER	E	336	2710	3437	4900	-217	65	-954	C
	ATOM	4041	CB	SER	E	336	16.621	-22.473	-13.635	1.00	31.46		C
25	ANISOU	4041	CB	SER	E	336	2727	3891	5336	-168	-9	-1092	C
	ATOM	4042	OG	SER	E	336	16.347	-21.090	-13.798	1.00	31.69		O
	ANISOU	4042	OG	SER	E	336	2690	3901	5451	54	-132	-1084	O
	ATOM	4043	C	SER	E	336	18.788	-22.347	-14.882	1.00	28.45		C
	ANISOU	4043	C	SER	E	336	2781	3302	4725	-127	-102	-846	C
30	ATOM	4044	O	SER	E	336	19.493	-21.345	-14.949	1.00	28.13		O
	ANISOU	4044	O	SER	E	336	2857	3166	4665	-7	-138	-747	O
	ATOM	4045	N	SER	E	337	18.584	-23.140	-15.920	1.00	28.83		N
	ANISOU	4045	N	SER	E	337	2834	3415	4705	-205	-194	-868	N
	ATOM	4046	CA	SER	E	337	19.123	-22.804	-17.221	1.00	28.54		C
35	ANISOU	4046	CA	SER	E	337	2932	3371	4540	-140	-346	-774	C
	ATOM	4047	CB	SER	E	337	20.569	-23.278	-17.364	1.00	26.18		C
	ANISOU	4047	CB	SER	E	337	2866	2970	4113	-211	-249	-695	C
	ATOM	4048	OG	SER	E	337	20.653	-24.681	-17.263	1.00	28.38		O
	ANISOU	4048	OG	SER	E	337	3156	3248	4378	-372	-156	-782	O
40	ATOM	4049	C	SER	E	337	18.249	-23.305	-18.353	1.00	29.78		C
	ANISOU	4049	C	SER	E	337	2982	3676	4656	-176	-510	-851	C
	ATOM	4050	O	SER	E	337	17.378	-24.160	-18.157	1.00	30.45		O
	ANISOU	4050	O	SER	E	337	2905	3849	4814	-290	-483	-990	O
	ATOM	4051	N	ILE	E	338	18.476	-22.729	-19.525	1.00	30.64		N
45	ANISOU	4051	N	ILE	E	338	3181	3820	4639	-89	-681	-757	N
	ATOM	4052	CA	ILE	E	338	17.938	-23.221	-20.783	1.00	31.77		C
	ANISOU	4052	CA	ILE	E	338	3281	4120	4670	-132	-851	-814	C
	ATOM	4053	CB	ILE	E	338	17.005	-22.176	-21.446	1.00	33.98		C
	ANISOU	4053	CB	ILE	E	338	3438	4503	4968	41	-1101	-760	C
50	ATOM	4054	CG1	ILE	E	338	17.737	-20.850	-21.743	1.00	32.53		C
	ANISOU	4054	CG1	ILE	E	338	3435	4204	4721	199	-1175	-540	C
	ATOM	4055	CD1	ILE	E	338	16.899	-19.806	-22.508	1.00	34.27		C
	ANISOU	4055	CD1	ILE	E	338	3577	4492	4952	387	-1453	-443	C
	ATOM	4056	CG2	ILE	E	338	15.748	-21.966	-20.580	1.00	34.20		C
55	ANISOU	4056	CG2	ILE	E	338	3181	4582	5232	103	-1106	-883	C
	ATOM	4057	C	ILE	E	338	19.151	-23.626	-21.656	1.00	31.96		C
	ANISOU	4057	C	ILE	E	338	3543	4122	4476	-205	-826	-751	C
	ATOM	4058	O	ILE	E	338	20.274	-23.333	-21.307	1.00	29.56		O
	ANISOU	4058	O	ILE	E	338	3404	3692	4137	-193	-705	-650	O
60	ATOM	4059	N	LYS	E	339	18.931	-24.339	-22.747	1.00	35.06		N
	ANISOU	4059	N	LYS	E	339	3939	4655	4729	-290	-928	-838	N
	ATOM	4060	CA	LYS	E	339	20.029	-24.773	-23.631	1.00	36.58		C
	ANISOU	4060	CA	LYS	E	339	4335	4861	4705	-363	-892	-821	C
	ATOM	4061	CB	LYS	E	339	20.084	-26.290	-23.805	1.00	36.71		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4061	CB	LYS	E	339	4342	4894	4712	-536	-805	-1027	C
	ATOM	4062	CG	LYS	E	339	20.066	-27.164	-22.598	1.00	37.43		C
	ANISOU	4062	CG	LYS	E	339	4380	4835	5006	-627	-622	-1118	C
	ATOM	4063	CD	LYS	E	339	19.853	-28.608	-23.095	1.00	40.71		C
5	ANISOU	4063	CD	LYS	E	339	4778	5276	5414	-797	-606	-1331	C
	ATOM	4064	CE	LYS	E	339	19.579	-29.601	-21.976	1.00	42.52		C
	ANISOU	4064	CE	LYS	E	339	4945	5354	5856	-921	-452	-1418	C
	ATOM	4065	NZ	LYS	E	339	19.132	-30.907	-22.530	1.00	45.89		N
	ANISOU	4065	NZ	LYS	E	339	5332	5798	6308	-1093	-469	-1635	N
10	ATOM	4066	C	LYS	E	339	19.787	-24.253	-25.032	1.00	39.73		C
	ANISOU	4066	C	LYS	E	339	4775	5437	4882	-315	-1112	-753	C
	ATOM	4067	O	LYS	E	339	18.632	-24.092	-25.473	1.00	41.88		O
	ANISOU	4067	O	LYS	E	339	4892	5855	5167	-273	-1310	-795	O
	ATOM	4068	N	ARG	E	340	20.885	-24.049	-25.745	1.00	40.42		N
15	ANISOU	4068	N	ARG	E	340	5065	5535	4757	-334	-1077	-656	N
	ATOM	4069	CA	ARG	E	340	20.863	-23.611	-27.123	1.00	43.90		C
	ANISOU	4069	CA	ARG	E	340	5594	6160	4925	-320	-1258	-568	C
	ATOM	4070	CB	ARG	E	340	20.961	-22.081	-27.170	1.00	44.64		C
	ANISOU	4070	CB	ARG	E	340	5770	6188	5002	-170	-1365	-292	C
20	ATOM	4071	CG	ARG	E	340	20.849	-21.453	-28.545	1.00	49.08		C
	ANISOU	4071	CG	ARG	E	340	6441	6929	5279	-142	-1581	-134	C
	ATOM	4072	CD	ARG	E	340	21.496	-20.082	-28.498	1.00	51.89		C
	ANISOU	4072	CD	ARG	E	340	6964	7138	5614	-49	-1589	158	C
	ATOM	4073	NE	ARG	E	340	21.220	-19.278	-29.683	1.00	56.36		N
25	ANISOU	4073	NE	ARG	E	340	7638	7837	5940	5	-1831	373	N
	ATOM	4074	CZ	ARG	E	340	21.825	-18.121	-29.947	1.00	59.39		C
	ANISOU	4074	CZ	ARG	E	340	8212	8114	6241	48	-1858	658	C
	ATOM	4075	NH1	ARG	E	340	22.748	-17.647	-29.115	1.00	56.32		N
	ANISOU	4075	NH1	ARG	E	340	7907	7494	5997	38	-1655	729	N
30	ATOM	4076	NH2	ARG	E	340	21.514	-17.438	-31.051	1.00	63.84		N
	ANISOU	4076	NH2	ARG	E	340	8887	8799	6569	90	-2097	878	N
	ATOM	4077	C	ARG	E	340	22.067	-24.271	-27.797	1.00	44.15		C
	ANISOU	4077	C	ARG	E	340	5797	6240	4738	-444	-1118	-630	C
	ATOM	4078	O	ARG	E	340	23.203	-24.110	-27.355	1.00	42.69		O
35	ANISOU	4078	O	ARG	E	340	5728	5923	4568	-452	-937	-561	O
	ATOM	4079	N	GLU	E	341	21.819	-25.062	-28.834	1.00	46.84		N
	ANISOU	4079	N	GLU	E	341	6132	6780	4884	-542	-1197	-791	N
	ATOM	4080	CA	GLU	E	341	22.906	-25.647	-29.629	1.00	47.97		C
	ANISOU	4080	CA	GLU	E	341	6424	7010	4792	-651	-1074	-881	C
40	ATOM	4081	CB	GLU	E	341	22.392	-26.781	-30.528	1.00	50.34		C
	ANISOU	4081	CB	GLU	E	341	6666	7504	4956	-770	-1150	-1154	C
	ATOM	4082	CG	GLU	E	341	23.492	-27.439	-31.354	1.00	53.33		C
	ANISOU	4082	CG	GLU	E	341	7181	7984	5099	-876	-1010	-1297	C
	ATOM	4083	CD	GLU	E	341	23.258	-28.925	-31.594	1.00	57.92		C
45	ANISOU	4083	CD	GLU	E	341	7691	8590	5726	-998	-966	-1652	C
	ATOM	4084	OE1	GLU	E	341	22.554	-29.280	-32.578	1.00	60.51		O
	ANISOU	4084	OE1	GLU	E	341	7977	9149	5864	-1070	-1129	-1802	O
	ATOM	4085	OE2	GLU	E	341	23.805	-29.734	-30.804	1.00	56.96		O
	ANISOU	4085	OE2	GLU	E	341	7564	8249	5831	-1021	-776	-1779	O
50	ATOM	4086	C	GLU	E	341	23.631	-24.578	-30.459	1.00	48.77		C
	ANISOU	4086	C	GLU	E	341	6704	7214	4614	-626	-1112	-642	C
	ATOM	4087	O	GLU	E	341	22.992	-23.827	-31.186	1.00	51.13		O
	ANISOU	4087	O	GLU	E	341	7019	7655	4752	-576	-1330	-491	O
	ATOM	4088	N	GLU	E	342	24.961	-24.539	-30.346	1.00	47.41		N
55	ANISOU	4088	N	GLU	E	342	6657	6969	4389	-668	-901	-607	N
	ATOM	4089	CA	GLU	E	342	25.803	-23.487	-30.926	1.00	48.38		C
	ANISOU	4089	CA	GLU	E	342	6949	7146	4286	-674	-880	-363	C
	ATOM	4090	CB	GLU	E	342	26.214	-22.470	-29.845	1.00	46.46		C
	ANISOU	4090	CB	GLU	E	342	6731	6650	4270	-584	-806	-148	C
60	ATOM	4091	CG	GLU	E	342	25.137	-21.435	-29.509	1.00	48.29		C
	ANISOU	4091	CG	GLU	E	342	6913	6795	4640	-445	-1019	45	C
	ATOM	4092	CD	GLU	E	342	25.495	-20.511	-28.349	1.00	45.94		C
	ANISOU	4092	CD	GLU	E	342	6626	6233	4596	-356	-937	198	C
	ATOM	4093	OE1	GLU	E	342	24.616	-20.290	-27.494	1.00	46.26		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4093	OE1	GLU	E	342	6536	6152	4889	-245	-1012	183	O
	ATOM	4094	OE2	GLU	E	342	26.637	-19.996	-28.287	1.00	46.95		O
	ANISOU	4094	OE2	GLU	E	342	6881	6288	4671	-406	-794	315	O
	ATOM	4095	C	GLU	E	342	27.072	-24.059	-31.538	1.00	48.22		C
5	ANISOU	4095	C	GLU	E	342	7028	7239	4056	-797	-676	-486	C
	ATOM	4096	O	GLU	E	342	27.501	-25.153	-31.181	1.00	47.12		O
	ANISOU	4096	O	GLU	E	342	6828	7042	4033	-837	-521	-734	O
	ATOM	4097	N	GLU	E	343	27.682	-23.303	-32.446	1.00	49.43		N
	ANISOU	4097	N	GLU	E	343	7330	7543	3907	-857	-673	-307	N
10	ATOM	4098	CA	GLU	E	343	28.980	-23.660	-32.998	1.00	49.39		C
	ANISOU	4098	CA	GLU	E	343	7407	7663	3698	-977	-452	-405	C
	ATOM	4099	CB	GLU	E	343	28.974	-23.575	-34.524	1.00	53.28		C
	ANISOU	4099	CB	GLU	E	343	8011	8493	3737	-1090	-528	-387	C
	ATOM	4100	CG	GLU	E	343	28.356	-24.787	-35.191	1.00	55.60		C
15	ANISOU	4100	CG	GLU	E	343	8229	8984	3914	-1138	-598	-712	C
	ATOM	4101	CD	GLU	E	343	28.384	-24.690	-36.695	1.00	61.06		C
	ANISOU	4101	CD	GLU	E	343	9037	10045	4118	-1260	-671	-706	C
	ATOM	4102	OE1	GLU	E	343	29.354	-24.119	-37.237	1.00	63.45		O
	ANISOU	4102	OE1	GLU	E	343	9471	10471	4165	-1353	-536	-563	O
20	ATOM	4103	OE2	GLU	E	343	27.437	-25.188	-37.339	1.00	64.46		O
	ANISOU	4103	OE2	GLU	E	343	9423	10659	4409	-1277	-862	-848	O
	ATOM	4104	C	GLU	E	343	30.096	-22.797	-32.435	1.00	47.41		C
	ANISOU	4104	C	GLU	E	343	7226	7262	3525	-983	-284	-209	C
	ATOM	4105	O	GLU	E	343	30.107	-21.573	-32.600	1.00	47.73		O
25	ANISOU	4105	O	GLU	E	343	7377	7275	3484	-980	-360	94	O
	ATOM	4106	N	VAL	E	344	31.046	-23.454	-31.778	1.00	44.90		N
	ANISOU	4106	N	VAL	E	344	6843	6842	3375	-993	-63	-387	N
	ATOM	4107	CA	VAL	E	344	32.197	-22.761	-31.209	1.00	43.05		C
	ANISOU	4107	CA	VAL	E	344	6643	6486	3226	-1012	109	-252	C
30	ATOM	4108	CB	VAL	E	344	32.331	-23.057	-29.702	1.00	39.90		C
	ANISOU	4108	CB	VAL	E	344	6131	5809	3220	-906	177	-321	C
	ATOM	4109	CG1	VAL	E	344	31.101	-22.518	-28.950	1.00	38.32		C
	ANISOU	4109	CG1	VAL	E	344	5899	5435	3226	-792	-14	-182	C
	ATOM	4110	CG2	VAL	E	344	32.487	-24.553	-29.465	1.00	38.73		C
35	ANISOU	4110	CG2	VAL	E	344	5876	5650	3188	-889	269	-644	C
	ATOM	4111	C	VAL	E	344	33.490	-23.102	-31.963	1.00	44.32		C
	ANISOU	4111	C	VAL	E	344	6833	6849	3159	-1141	328	-377	C
	ATOM	4112	O	VAL	E	344	33.591	-24.158	-32.616	1.00	44.99		O
	ANISOU	4112	O	VAL	E	344	6878	7105	3111	-1182	386	-649	O
40	ATOM	4113	N	LEU	E	345	34.471	-22.206	-31.883	1.00	43.87		N
	ANISOU	4113	N	LEU	E	345	6834	6773	3060	-1212	457	-199	N
	ATOM	4114	CA	LEU	E	345	35.747	-22.449	-32.550	1.00	45.58		C
	ANISOU	4114	CA	LEU	E	345	7050	7199	3071	-1345	689	-320	C
	ATOM	4115	CB	LEU	E	345	36.032	-21.390	-33.626	1.00	48.71		C
45	ANISOU	4115	CB	LEU	E	345	7610	7796	3101	-1510	700	-58	C
	ATOM	4116	CG	LEU	E	345	35.431	-21.671	-35.017	1.00	53.49		C
	ANISOU	4116	CG	LEU	E	345	8310	8712	3302	-1592	600	-90	C
	ATOM	4117	CD1	LEU	E	345	35.111	-20.382	-35.775	1.00	57.03		C
	ANISOU	4117	CD1	LEU	E	345	8960	9243	3466	-1690	468	304	C
50	ATOM	4118	CD2	LEU	E	345	36.333	-22.561	-35.889	1.00	56.50		C
	ANISOU	4118	CD2	LEU	E	345	8642	9402	3424	-1714	825	-394	C
	ATOM	4119	C	LEU	E	345	36.896	-22.595	-31.559	1.00	43.09		C
	ANISOU	4119	C	LEU	E	345	6618	6736	3019	-1317	884	-414	C
	ATOM	4120	O	LEU	E	345	37.045	-21.789	-30.628	1.00	41.78		O
55	ANISOU	4120	O	LEU	E	345	6453	6357	3066	-1279	869	-231	O
	ATOM	4121	N	THR	E	346	37.683	-23.651	-31.742	1.00	42.92		N
	ANISOU	4121	N	THR	E	346	6486	6827	2994	-1323	1054	-721	N
	ATOM	4122	CA	THR	E	346	38.811	-23.942	-30.852	1.00	41.13		C
	ANISOU	4122	CA	THR	E	346	6122	6488	3017	-1274	1224	-845	C
60	ATOM	4123	CB	THR	E	346	39.287	-25.407	-30.977	1.00	40.99		C
	ANISOU	4123	CB	THR	E	346	5972	6534	3070	-1207	1337	-1229	C
	ATOM	4124	OG1	THR	E	346	39.774	-25.630	-32.308	1.00	42.56		O
	ANISOU	4124	OG1	THR	E	346	6186	7057	2929	-1338	1471	-1380	O
	ATOM	4125	CG2	THR	E	346	38.155	-26.375	-30.640	1.00	38.07		C

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	4125	CG2	THR	E	346	5595	6009	2863	-1084	1175	-1361		C
		ATOM	4126	C	THR	E	346	39.986	-23.035	-31.189	1.00	43.36			C
		ANISOU	4126	C	THR	E	346	6415	6908	3153	-1428	1402	-722		C
		ATOM	4127	O	THR	E	346	40.054	-22.483	-32.302	1.00	45.98			O
5		ANISOU	4127	O	THR	E	346	6857	7467	3144	-1588	1441	-607		O
		ATOM	4128	N	GLY	E	347	40.919	-22.907	-30.244	1.00	42.34			N
		ANISOU	4128	N	GLY	E	347	6167	6654	3267	-1393	1511	-749		N
		ATOM	4129	CA	GLY	E	347	42.178	-22.198	-30.484	1.00	44.62			C
		ANISOU	4129	CA	GLY	E	347	6414	7080	3459	-1551	1710	-693		C
10		ATOM	4130	C	GLY	E	347	42.936	-22.690	-31.716	1.00	48.49			C
		ANISOU	4130	C	GLY	E	347	6856	7916	3651	-1680	1913	-899		C
		ATOM	4131	O	GLY	E	347	43.950	-22.101	-32.104	1.00	50.47			O
		ANISOU	4131	O	GLY	E	347	7071	8338	3766	-1851	2101	-856		O
		ATOM	4132	N	ASN	E	348	42.442	-23.772	-32.316	1.00	49.38			N
15		ANISOU	4132	N	ASN	E	348	6961	8138	3665	-1611	1882	-1139		N
		ATOM	4133	CA	ASN	E	348	43.017	-24.343	-33.522	1.00	53.66			C
		ANISOU	4133	CA	ASN	E	348	7459	9021	3906	-1720	2064	-1385		C
		ATOM	4134	CB	ASN	E	348	43.303	-25.835	-33.302	1.00	53.90			C
		ANISOU	4134	CB	ASN	E	348	7316	9024	4141	-1548	2123	-1804		C
20		ATOM	4135	CG	ASN	E	348	44.284	-26.389	-34.308	1.00	57.89			C
		ANISOU	4135	CG	ASN	E	348	7705	9868	4422	-1639	2373	-2119		C
		ATOM	4136	OD1	ASN	E	348	45.044	-25.643	-34.912	1.00	61.94			O
		ANISOU	4136	OD1	ASN	E	348	8216	10630	4689	-1832	2550	-2031		O
		ATOM	4137	ND2	ASN	E	348	44.272	-27.699	-34.497	1.00	59.86			N
25		ANISOU	4137	ND2	ASN	E	348	7856	10127	4760	-1508	2399	-2498		N
		ATOM	4138	C	ASN	E	348	42.113	-24.173	-34.739	1.00	55.81			C
		ANISOU	4138	C	ASN	E	348	7918	9505	3784	-1834	1968	-1293		C
		ATOM	4139	O	ASN	E	348	42.448	-24.620	-35.833	1.00	59.14			O
		ANISOU	4139	O	ASN	E	348	8330	10245	3896	-1941	2104	-1495		O
30		ATOM	4140	N	LEU	E	349	40.962	-23.532	-34.544	1.00	54.75			N
		ANISOU	4140	N	LEU	E	349	7942	9207	3654	-1805	1726	-1000		N
		ATOM	4141	CA	LEU	E	349	39.927	-23.424	-35.585	1.00	56.68			C
		ANISOU	4141	CA	LEU	E	349	8352	9623	3560	-1871	1566	-904		C
		ATOM	4142	CB	LEU	E	349	40.470	-22.725	-36.850	1.00	60.70			C
35		ANISOU	4142	CB	LEU	E	349	8981	10485	3599	-2117	1702	-766		C
		ATOM	4143	CG	LEU	E	349	41.305	-21.440	-36.688	1.00	61.95			C
		ANISOU	4143	CG	LEU	E	349	9196	10613	3728	-2277	1827	-450		C
		ATOM	4144	CD1	LEU	E	349	42.160	-21.185	-37.940	1.00	65.27			C
		ANISOU	4144	CD1	LEU	E	349	9667	11441	3693	-2540	2062	-454		C
40		ATOM	4145	CD2	LEU	E	349	40.447	-20.215	-36.321	1.00	60.69			C
		ANISOU	4145	CD2	LEU	E	349	9223	10201	3636	-2262	1587	-7		C
		ATOM	4146	C	LEU	E	349	39.218	-24.767	-35.944	1.00	56.66			C
		ANISOU	4146	C	LEU	E	349	8297	9686	3545	-1769	1484	-1246		C
		ATOM	4147	O	LEU	E	349	38.866	-24.994	-37.106	1.00	59.07			O
45		ANISOU	4147	O	LEU	E	349	8682	10278	3484	-1869	1460	-1327		O
		ATOM	4148	N	GLN	E	350	39.005	-25.636	-34.947	1.00	53.61			N
		ANISOU	4148	N	GLN	E	350	7787	9033	3550	-1586	1436	-1439		N
		ATOM	4149	CA	GLN	E	350	38.133	-26.811	-35.108	1.00	53.10			C
		ANISOU	4149	CA	GLN	E	350	7691	8940	3543	-1494	1316	-1711		C
50		ATOM	4150	CB	GLN	E	350	38.663	-28.028	-34.332	1.00	51.62			C
		ANISOU	4150	CB	GLN	E	350	7339	8560	3716	-1348	1419	-2042		C
		ATOM	4151	CG	GLN	E	350	37.873	-29.328	-34.565	1.00	52.67			C
		ANISOU	4151	CG	GLN	E	350	7445	8647	3921	-1280	1324	-2357		C
		ATOM	4152	CD	GLN	E	350	38.338	-30.499	-33.702	1.00	50.84			C
55		ANISOU	4152	CD	GLN	E	350	7077	8154	4087	-1123	1397	-2632		C
		ATOM	4153	OE1	GLN	E	350	39.291	-30.387	-32.937	1.00	49.10			O
		ANISOU	4153	OE1	GLN	E	350	6767	7811	4078	-1049	1513	-2603		O
		ATOM	4154	NE2	GLN	E	350	37.658	-31.631	-33.831	1.00	50.04			N
		ANISOU	4154	NE2	GLN	E	350	6962	7961	4090	-1076	1317	-2896		N
60		ATOM	4155	C	GLN	E	350	36.738	-26.435	-34.620	1.00	51.00			C
		ANISOU	4155	C	GLN	E	350	7502	8477	3398	-1419	1039	-1482		C
		ATOM	4156	O	GLN	E	350	36.586	-25.851	-33.553	1.00	48.42			O
		ANISOU	4156	O	GLN	E	350	7168	7889	3341	-1337	973	-1266		O
		ATOM	4157	N	THR	E	351	35.720	-26.751	-35.413	1.00	52.50			N



ES 2 454 773 T3

		ANISOU	4157	N	THR	E	351	7754	8813	3381	-1451	877	-1545	N
		ATOM	4158	CA	THR	E	351	34.345	-26.457	-35.043	1.00	51.35		C
		ANISOU	4158	CA	THR	E	351	7647	8521	3345	-1378	610	-1367	C
		ATOM	4159	CB	THR	E	351	33.426	-26.373	-36.272	1.00	54.37		C
5		ANISOU	4159	CB	THR	E	351	8122	9185	3350	-1464	430	-1351	C
		ATOM	4160	OG1	THR	E	351	33.904	-25.359	-37.160	1.00	57.38		O
		ANISOU	4160	OG1	THR	E	351	8642	9811	3347	-1597	470	-1106	O
		ATOM	4161	CG2	THR	E	351	31.995	-26.030	-35.851	1.00	54.10		C
		ANISOU	4161	CG2	THR	E	351	8091	9006	3461	-1372	144	-1173	C
10		ATOM	4162	C	THR	E	351	33.814	-27.529	-34.107	1.00	48.97		C
		ANISOU	4162	C	THR	E	351	7225	7955	3425	-1251	560	-1586	C
		ATOM	4163	O	THR	E	351	33.904	-28.716	-34.421	1.00	49.72		O
		ANISOU	4163	O	THR	E	351	7258	8093	3539	-1254	623	-1930	O
		ATOM	4164	N	LEU	E	352	33.273	-27.098	-32.966	1.00	45.92		N
15		ANISOU	4164	N	LEU	E	352	6814	7296	3339	-1150	455	-1389	N
		ATOM	4165	CA	LEU	E	352	32.556	-27.983	-32.059	1.00	44.43		C
		ANISOU	4165	CA	LEU	E	352	6531	6865	3485	-1055	383	-1532	C
		ATOM	4166	CB	LEU	E	352	33.221	-28.020	-30.676	1.00	41.32		C
20		ANISOU	4166	CB	LEU	E	352	6073	6188	3439	-957	494	-1483	C
		ATOM	4167	CG	LEU	E	352	34.668	-28.498	-30.506	1.00	41.46		C
		ANISOU	4167	CG	LEU	E	352	6040	6188	3524	-941	718	-1642	C
		ATOM	4168	CD1	LEU	E	352	35.062	-28.343	-29.037	1.00	38.52		C
		ANISOU	4168	CD1	LEU	E	352	5612	5540	3485	-837	755	-1527	C
		ATOM	4169	CD2	LEU	E	352	34.921	-29.937	-30.990	1.00	42.58		C
25		ANISOU	4169	CD2	LEU	E	352	6127	6363	3689	-938	799	-2023	C
		ATOM	4170	C	LEU	E	352	31.099	-27.545	-31.923	1.00	44.26		C
		ANISOU	4170	C	LEU	E	352	6514	6808	3497	-1026	139	-1372	C
		ATOM	4171	O	LEU	E	352	30.819	-26.372	-31.696	1.00	43.64		O
		ANISOU	4171	O	LEU	E	352	6483	6697	3400	-997	47	-1074	O
30		ATOM	4172	N	LYS	E	353	30.182	-28.496	-32.077	1.00	45.32		N
		ANISOU	4172	N	LYS	E	353	6585	6943	3691	-1035	36	-1586	N
		ATOM	4173	CA	LYS	E	353	28.773	-28.271	-31.800	1.00	45.51		C
		ANISOU	4173	CA	LYS	E	353	6559	6921	3812	-1002	-182	-1491	C
		ATOM	4174	CB	LYS	E	353	27.921	-29.158	-32.701	1.00	47.91		C
35		ANISOU	4174	CB	LYS	E	353	6823	7400	3979	-1081	-305	-1748	C
		ATOM	4175	CG	LYS	E	353	26.524	-28.628	-33.009	1.00	50.14		C
		ANISOU	4175	CG	LYS	E	353	7063	7798	4190	-1071	-572	-1626	C
		ATOM	4176	CD	LYS	E	353	25.789	-29.583	-33.964	1.00	53.59		C
		ANISOU	4176	CD	LYS	E	353	7450	8440	4472	-1172	-688	-1924	C
40		ATOM	4177	CE	LYS	E	353	24.859	-28.824	-34.921	1.00	59.05		C
		ANISOU	4177	CE	LYS	E	353	8155	9414	4866	-1182	-955	-1782	C
		ATOM	4178	NZ	LYS	E	353	24.338	-29.667	-36.045	1.00	61.33		N
		ANISOU	4178	NZ	LYS	E	353	8416	9973	4912	-1300	-1066	-2081	N
		ATOM	4179	C	LYS	E	353	28.524	-28.604	-30.336	1.00	42.55		C
45		ANISOU	4179	C	LYS	E	353	6095	6234	3837	-922	-146	-1482	C
		ATOM	4180	O	LYS	E	353	28.662	-29.747	-29.922	1.00	42.17		O
		ANISOU	4180	O	LYS	E	353	5995	6049	3977	-931	-59	-1705	O
		ATOM	4181	N	ILE	E	354	28.186	-27.597	-29.545	1.00	41.27		N
		ANISOU	4181	N	ILE	E	354	5923	5956	3801	-845	-209	-1222	N
50		ATOM	4182	CA	ILE	E	354	27.891	-27.795	-28.136	1.00	39.35		C
		ANISOU	4182	CA	ILE	E	354	5599	5456	3897	-780	-175	-1195	C
		ATOM	4183	CB	ILE	E	354	28.992	-27.170	-27.205	1.00	37.50		C
		ANISOU	4183	CB	ILE	E	354	5404	5064	3781	-718	-28	-1037	C
		ATOM	4184	CG1	ILE	E	354	29.069	-25.650	-27.368	1.00	37.51		C
55		ANISOU	4184	CG1	ILE	E	354	5473	5114	3665	-685	-92	-761	C
		ATOM	4185	CD1	ILE	E	354	29.800	-24.918	-26.225	1.00	35.25		C
		ANISOU	4185	CD1	ILE	E	354	5197	4643	3554	-625	11	-607	C
		ATOM	4186	CG2	ILE	E	354	30.370	-27.816	-27.461	1.00	36.99		C
		ANISOU	4186	CG2	ILE	E	354	5377	5012	3665	-747	157	-1184	C
60		ATOM	4187	C	ILE	E	354	26.513	-27.229	-27.775	1.00	39.58		C
		ANISOU	4187	C	ILE	E	354	5544	5471	4023	-734	-358	-1077	C
		ATOM	4188	O	ILE	E	354	26.029	-26.280	-28.412	1.00	40.69		O
		ANISOU	4188	O	ILE	E	354	5712	5749	4001	-707	-510	-920	O
		ATOM	4189	N	ARG	E	355	25.880	-27.817	-26.764	1.00	38.29		N



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4221	CD	GLU	E	358	4604	4435	4480	170	-1200	41	C
	ATOM	4222	OE1	GLU	E	358	20.044	-19.336	-24.097	1.00	36.53		O
	ANISOU	4222	OE1	GLU	E	358	4532	4641	4708	242	-1341	-49	O
	ATOM	4223	OE2	GLU	E	358	21.915	-18.767	-25.108	1.00	40.00		O
5	ANISOU	4223	OE2	GLU	E	358	5342	5029	4827	150	-1264	206	O
	ATOM	4224	C	GLU	E	358	21.481	-19.944	-19.121	1.00	28.03		C
	ANISOU	4224	C	GLU	E	358	3350	3095	4206	136	-577	-318	C
	ATOM	4225	O	GLU	E	358	20.399	-20.505	-18.923	1.00	28.19		O
	ANISOU	4225	O	GLU	E	358	3188	3214	4310	121	-606	-448	O
10	ATOM	4226	N	GLY	E	359	22.095	-19.173	-18.223	1.00	26.47		N
	ANISOU	4226	N	GLY	E	359	3210	2755	4092	185	-480	-269	N
	ATOM	4227	CA	GLY	E	359	21.487	-18.828	-16.971	1.00	25.81		C
	ANISOU	4227	CA	GLY	E	359	2985	2630	4193	246	-409	-364	C
	ATOM	4228	C	GLY	E	359	22.386	-19.086	-15.810	1.00	23.40		C
15	ANISOU	4228	C	GLY	E	359	2743	2248	3898	169	-211	-393	C
	ATOM	4229	O	GLY	E	359	23.253	-19.970	-15.866	1.00	23.25		O
	ANISOU	4229	O	GLY	E	359	2827	2236	3772	53	-119	-381	O
	ATOM	4230	N	TYR	E	360	22.143	-18.340	-14.742	1.00	23.60		N
	ANISOU	4230	N	TYR	E	360	2697	2212	4057	243	-154	-447	N
20	ATOM	4231	CA	TYR	E	360	22.840	-18.486	-13.476	1.00	22.59		C
	ANISOU	4231	CA	TYR	E	360	2606	2041	3936	180	21	-491	C
	ATOM	4232	CB	TYR	E	360	22.563	-17.303	-12.523	1.00	24.19		C
	ANISOU	4232	CB	TYR	E	360	2742	2170	4279	292	47	-560	C
	ATOM	4233	CG	TYR	E	360	23.051	-17.586	-11.112	1.00	23.41		C
25	ANISOU	4233	CG	TYR	E	360	2647	2087	4160	212	225	-639	C
	ATOM	4234	CD1	TYR	E	360	24.414	-17.521	-10.793	1.00	22.30		C
	ANISOU	4234	CD1	TYR	E	360	2665	1873	3936	153	290	-572	C
	ATOM	4235	CE1	TYR	E	360	24.866	-17.828	-9.505	1.00	23.08		C
	ANISOU	4235	CE1	TYR	E	360	2769	2011	3991	82	427	-634	C
30	ATOM	4236	CZ	TYR	E	360	23.948	-18.220	-8.543	1.00	23.76		C
	ANISOU	4236	CZ	TYR	E	360	2717	2212	4098	51	519	-752	C
	ATOM	4237	OH	TYR	E	360	24.387	-18.506	-7.272	1.00	25.07		O
	ANISOU	4237	OH	TYR	E	360	2903	2436	4185	-28	647	-795	O
	ATOM	4238	CE2	TYR	E	360	22.593	-18.299	-8.837	1.00	23.70		C
35	ANISOU	4238	CE2	TYR	E	360	2542	2282	4181	91	483	-829	C
	ATOM	4239	CD2	TYR	E	360	22.156	-17.984	-10.118	1.00	24.20		C
	ANISOU	4239	CD2	TYR	E	360	2586	2303	4305	179	326	-777	C
	ATOM	4240	C	TYR	E	360	22.448	-19.792	-12.804	1.00	22.00		C
	ANISOU	4240	C	TYR	E	360	2446	2074	3840	52	139	-585	C
40	ATOM	4241	O	TYR	E	360	21.253	-20.113	-12.717	1.00	23.47		O
	ANISOU	4241	O	TYR	E	360	2461	2361	4097	47	124	-681	O
	ATOM	4242	N	GLU	E	361	23.457	-20.544	-12.352	1.00	20.15		N
	ANISOU	4242	N	GLU	E	361	2328	1813	3516	-52	249	-550	N
	ATOM	4243	CA	GLU	E	361	23.240	-21.781	-11.604	1.00	20.24		C
45	ANISOU	4243	CA	GLU	E	361	2302	1881	3506	-182	365	-600	C
	ATOM	4244	CB	GLU	E	361	23.280	-23.001	-12.533	1.00	20.04		C
	ANISOU	4244	CB	GLU	E	361	2319	1870	3425	-274	330	-587	C
	ATOM	4245	CG	GLU	E	361	22.084	-23.147	-13.487	1.00	20.79		C
	ANISOU	4245	CG	GLU	E	361	2284	2055	3561	-270	215	-651	C
50	ATOM	4246	CD	GLU	E	361	22.262	-24.295	-14.477	1.00	22.54		C
	ANISOU	4246	CD	GLU	E	361	2567	2285	3713	-366	176	-664	C
	ATOM	4247	OE1	GLU	E	361	23.309	-24.332	-15.160	1.00	21.63		O
	ANISOU	4247	OE1	GLU	E	361	2597	2118	3502	-350	153	-602	O
	ATOM	4248	OE2	GLU	E	361	21.336	-25.150	-14.592	1.00	25.55		O
55	ANISOU	4248	OE2	GLU	E	361	2839	2731	4140	-464	173	-754	O
	ATOM	4249	C	GLU	E	361	24.332	-21.935	-10.561	1.00	19.23		C
	ANISOU	4249	C	GLU	E	361	2283	1704	3319	-225	479	-560	C
	ATOM	4250	O	GLU	E	361	25.489	-21.586	-10.802	1.00	18.49		O
	ANISOU	4250	O	GLU	E	361	2312	1537	3174	-195	463	-490	O
60	ATOM	4251	N	GLU	E	362	23.965	-22.487	-9.413	1.00	19.76		N
	ANISOU	4251	N	GLU	E	362	2298	1827	3381	-307	593	-601	N
	ATOM	4252	CA	GLU	E	362	24.937	-22.899	-8.402	1.00	19.50		C
	ANISOU	4252	CA	GLU	E	362	2372	1771	3266	-364	684	-547	C
	ATOM	4253	CB	GLU	E	362	24.684	-22.172	-7.076	1.00	19.25		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4253	CB	GLU	E	362	2279	1811	3225	-354	772	-615	C
	ATOM	4254	CG	GLU	E	362	25.760	-22.371	-6.025	1.00	21.30		C
	ANISOU	4254	CG	GLU	E	362	2650	2069	3375	-395	835	-559	C
	ATOM	4255	CD	GLU	E	362	25.377	-21.770	-4.703	1.00	25.48		C
5	ANISOU	4255	CD	GLU	E	362	3112	2708	3863	-409	932	-651	C
	ATOM	4256	OE1	GLU	E	362	25.884	-20.702	-4.358	1.00	29.65		O
	ANISOU	4256	OE1	GLU	E	362	3651	3221	4393	-334	920	-709	O
	ATOM	4257	OE2	GLU	E	362	24.528	-22.338	-4.008	1.00	33.55		O
10	ANISOU	4257	OE2	GLU	E	362	4062	3839	4848	-507	1030	-680	O
	ATOM	4258	C	GLU	E	362	24.871	-24.422	-8.213	1.00	19.37		C
	ANISOU	4258	C	GLU	E	362	2397	1748	3215	-498	738	-502	C
	ATOM	4259	O	GLU	E	362	23.795	-24.978	-8.171	1.00	20.68		O
	ANISOU	4259	O	GLU	E	362	2465	1971	3423	-582	771	-549	O
	ATOM	4260	N	PHE	E	363	26.034	-25.068	-8.098	1.00	19.27		N
15	ANISOU	4260	N	PHE	E	363	2522	1656	3143	-514	741	-414	N
	ATOM	4261	CA	PHE	E	363	26.136	-26.509	-7.875	1.00	20.25		C
	ANISOU	4261	CA	PHE	E	363	2717	1722	3257	-621	778	-353	C
	ATOM	4262	CB	PHE	E	363	26.740	-27.207	-9.116	1.00	19.58		C
20	ANISOU	4262	CB	PHE	E	363	2705	1534	3201	-599	705	-347	C
	ATOM	4263	CG	PHE	E	363	25.919	-27.074	-10.368	1.00	19.78		C
	ANISOU	4263	CG	PHE	E	363	2651	1593	3274	-596	638	-432	C
	ATOM	4264	CD1	PHE	E	363	24.935	-28.007	-10.676	1.00	22.26		C
	ANISOU	4264	CD1	PHE	E	363	2909	1905	3645	-708	644	-486	C
	ATOM	4265	CE1	PHE	E	363	24.176	-27.899	-11.843	1.00	22.61		C
25	ANISOU	4265	CE1	PHE	E	363	2868	2006	3717	-706	560	-575	C
	ATOM	4266	CZ	PHE	E	363	24.434	-26.853	-12.731	1.00	21.83		C
	ANISOU	4266	CZ	PHE	E	363	2762	1956	3576	-585	467	-582	C
	ATOM	4267	CE2	PHE	E	363	25.409	-25.906	-12.425	1.00	21.29		C
30	ANISOU	4267	CE2	PHE	E	363	2764	1866	3461	-485	474	-512	C
	ATOM	4268	CD2	PHE	E	363	26.145	-26.028	-11.248	1.00	21.29		C
	ANISOU	4268	CD2	PHE	E	363	2826	1817	3445	-493	560	-452	C
	ATOM	4269	C	PHE	E	363	27.072	-26.809	-6.708	1.00	20.24		C
	ANISOU	4269	C	PHE	E	363	2818	1699	3172	-634	823	-258	C
35	ATOM	4270	O	PHE	E	363	28.019	-26.078	-6.466	1.00	18.19		O
	ANISOU	4270	O	PHE	E	363	2595	1448	2868	-549	797	-245	O
	ATOM	4271	N	THR	E	364	26.798	-27.908	-6.012	1.00	21.35		N
	ANISOU	4271	N	THR	E	364	3007	1811	3294	-749	880	-184	N
	ATOM	4272	CA	THR	E	364	27.846	-28.619	-5.311	1.00	21.53		C
40	ANISOU	4272	CA	THR	E	364	3165	1757	3258	-747	870	-57	C
	ATOM	4273	CB	THR	E	364	27.360	-29.262	-3.994	1.00	23.12		C
	ANISOU	4273	CB	THR	E	364	3410	2001	3374	-884	958	47	C
	ATOM	4274	OG1	THR	E	364	26.505	-30.365	-4.288	1.00	23.16		O
	ANISOU	4274	OG1	THR	E	364	3422	1920	3459	-1022	996	71	O
45	ATOM	4275	CG2	THR	E	364	26.661	-28.251	-3.101	1.00	21.80		C
	ANISOU	4275	CG2	THR	E	364	3139	2030	3113	-919	1046	-24	C
	ATOM	4276	C	THR	E	364	28.359	-29.730	-6.241	1.00	21.92		C
	ANISOU	4276	C	THR	E	364	3296	1633	3398	-732	808	-30	C
	ATOM	4277	O	THR	E	364	27.586	-30.289	-7.010	1.00	21.17		O
50	ANISOU	4277	O	THR	E	364	3168	1488	3387	-800	812	-88	O
	ATOM	4278	N	MSE	E	365	29.664	-30.009	-6.154	1.00	21.90		N
	ANISOU	4278	N	MSE	E	365	3384	1553	3386	-638	750	34	N
	ATOM	4279	CA	MSE	E	365	30.337	-31.060	-6.894	1.00	23.37		C
	ANISOU	4279	CA	MSE	E	365	3644	1570	3666	-594	695	41	C
55	ATOM	4280	CB	MSE	E	365	31.472	-30.506	-7.757	1.00	21.74		C
	ANISOU	4280	CB	MSE	E	365	3414	1378	3470	-454	639	-36	C
	ATOM	4281	CG	MSE	E	365	31.045	-29.545	-8.842	1.00	23.13		C
	ANISOU	4281	CG	MSE	E	365	3502	1647	3639	-443	640	-154	C
	ATOM	4282	SE	MSE	E	365	32.526	-28.585	-9.625	0.90	23.40		SE
60	ANISOU	4282	SE	MSE	E	365	3512	1739	3638	-313	602	-208	SE
	ATOM	4283	CE	MSE	E	365	33.771	-30.022	-9.974	1.00	18.37		C
	ANISOU	4283	CE	MSE	E	365	2937	958	3086	-233	569	-221	C
	ATOM	4284	C	MSE	E	365	30.960	-31.945	-5.849	1.00	24.00		C
	ANISOU	4284	C	MSE	E	365	3840	1550	3729	-592	674	197	C
	ATOM	4285	O	MSE	E	365	31.712	-31.448	-5.007	1.00	24.02		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4285	O	MSE	E	365	3857	1634	3635	-529	647	264	O
	ATOM	4286	N	VAL	E	366	30.647	-33.239	-5.897	1.00	24.70		N
	ANISOU	4286	N	VAL	E	366	4015	1459	3911	-665	674	257	N
	ATOM	4287	CA	VAL	E	366	31.225	-34.211	-4.985	1.00	26.44		C
5	ANISOU	4287	CA	VAL	E	366	4372	1538	4136	-656	631	436	C
	ATOM	4288	CB	VAL	E	366	30.132	-34.805	-4.045	1.00	28.13		C
	ANISOU	4288	CB	VAL	E	366	4654	1731	4302	-858	710	576	C
	ATOM	4289	CG1	VAL	E	366	30.702	-35.906	-3.156	1.00	29.65		C
	ANISOU	4289	CG1	VAL	E	366	5023	1742	4502	-858	650	802	C
10	ATOM	4290	CG2	VAL	E	366	29.493	-33.697	-3.201	1.00	27.64		C
	ANISOU	4290	CG2	VAL	E	366	4506	1933	4062	-936	796	572	C
	ATOM	4291	C	VAL	E	366	31.984	-35.333	-5.738	1.00	27.40		C
	ANISOU	4291	C	VAL	E	366	4567	1412	4432	-557	553	413	C
	ATOM	4292	O	VAL	E	366	31.382	-36.089	-6.501	1.00	27.59		O
15	ANISOU	4292	O	VAL	E	366	4608	1292	4584	-633	575	335	O
	ATOM	4293	N	GLY	E	367	33.293	-35.428	-5.493	1.00	28.19		N
	ANISOU	4293	N	GLY	E	367	4697	1473	4542	-388	461	462	N
	ATOM	4294	CA	GLY	E	367	34.123	-36.526	-5.992	1.00	30.20		C
	ANISOU	4294	CA	GLY	E	367	5014	1486	4973	-261	380	446	C
20	ATOM	4295	C	GLY	E	367	34.685	-37.405	-4.894	1.00	33.69		C
	ANISOU	4295	C	GLY	E	367	5595	1766	5439	-206	286	673	C
	ATOM	4296	O	GLY	E	367	34.376	-37.209	-3.720	1.00	34.80		O
	ANISOU	4296	O	GLY	E	367	5797	1996	5427	-292	292	858	O
	ATOM	4297	N	LYS	E	368	35.498	-38.390	-5.273	1.00	35.94		N
25	ANISOU	4297	N	LYS	E	368	5932	1812	5911	-57	196	658	N
	ATOM	4298	CA	LYS	E	368	36.162	-39.264	-4.312	1.00	38.97		C
	ANISOU	4298	CA	LYS	E	368	6451	2010	6347	42	69	884	C
	ATOM	4299	CB	LYS	E	368	36.914	-40.385	-5.031	1.00	41.21		C
	ANISOU	4299	CB	LYS	E	368	6767	1990	6901	219	-19	796	C
30	ATOM	4300	CG	LYS	E	368	36.054	-41.402	-5.755	1.00	44.82		C
	ANISOU	4300	CG	LYS	E	368	7315	2166	7548	97	41	717	C
	ATOM	4301	CD	LYS	E	368	36.966	-42.427	-6.402	1.00	52.13		C
	ANISOU	4301	CD	LYS	E	368	8260	2799	8749	311	-54	600	C
	ATOM	4302	CE	LYS	E	368	36.378	-43.018	-7.678	1.00	55.25		C
35	ANISOU	4302	CE	LYS	E	368	8645	3030	9319	233	28	339	C
	ATOM	4303	NZ	LYS	E	368	37.081	-44.304	-8.039	1.00	58.01		N
	ANISOU	4303	NZ	LYS	E	368	9071	2998	9973	415	-68	265	N
	ATOM	4304	C	LYS	E	368	37.163	-38.513	-3.429	1.00	38.51		C
	ANISOU	4304	C	LYS	E	368	6337	2165	6130	175	-25	979	C
40	ATOM	4305	O	LYS	E	368	37.330	-38.848	-2.254	1.00	40.15		O
	ANISOU	4305	O	LYS	E	368	6662	2346	6248	176	-113	1226	O
	ATOM	4306	N	ARG	E	369	37.827	-37.509	-4.010	1.00	36.39		N
	ANISOU	4306	N	ARG	E	369	5893	2111	5823	272	-10	786	N
	ATOM	4307	CA	ARG	E	369	39.003	-36.893	-3.397	1.00	36.20		C
45	ANISOU	4307	CA	ARG	E	369	5782	2263	5708	423	-115	816	C
	ATOM	4308	CB	ARG	E	369	40.271	-37.288	-4.170	1.00	37.98		C
	ANISOU	4308	CB	ARG	E	369	5899	2401	6129	655	-198	665	C
	ATOM	4309	CG	ARG	E	369	40.565	-38.794	-4.243	1.00	41.98		C
	ANISOU	4309	CG	ARG	E	369	6520	2561	6871	788	-303	738	C
50	ATOM	4310	CD	ARG	E	369	42.027	-39.098	-3.979	1.00	47.29		C
	ANISOU	4310	CD	ARG	E	369	7105	3211	7651	1057	-473	743	C
	ATOM	4311	NE	ARG	E	369	42.155	-39.943	-2.787	1.00	54.15		N
	ANISOU	4311	NE	ARG	E	369	8144	3905	8525	1121	-641	1046	N
	ATOM	4312	CZ	ARG	E	369	42.934	-39.702	-1.733	1.00	55.72		C
55	ANISOU	4312	CZ	ARG	E	369	8323	4243	8606	1231	-801	1209	C
	ATOM	4313	NH1	ARG	E	369	43.718	-38.625	-1.680	1.00	54.95		N
	ANISOU	4313	NH1	ARG	E	369	8026	4461	8393	1288	-814	1079	N
	ATOM	4314	NH2	ARG	E	369	42.930	-40.558	-0.724	1.00	58.26		N
	ANISOU	4314	NH2	ARG	E	369	8832	4383	8920	1274	-956	1510	N
60	ATOM	4315	C	ARG	E	369	38.934	-35.380	-3.308	1.00	33.75		C
	ANISOU	4315	C	ARG	E	369	5345	2273	5207	348	-39	717	C
	ATOM	4316	O	ARG	E	369	39.914	-34.725	-2.945	1.00	34.16		O
	ANISOU	4316	O	ARG	E	369	5295	2491	5191	450	-111	692	O
	ATOM	4317	N	ALA	E	370	37.792	-34.814	-3.675	1.00	31.33		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4317	N	ALA	E	370	5030	2041	4833	176	99	647	N
	ATOM	4318	CA	ALA	E	370	37.559	-33.400	-3.527	1.00	28.93		C
	ANISOU	4318	CA	ALA	E	370	4628	1995	4370	100	169	566	C
	ATOM	4319	CB	ALA	E	370	38.363	-32.620	-4.535	1.00	27.23		C
5	ANISOU	4319	CB	ALA	E	370	4264	1875	4207	190	183	368	C
	ATOM	4320	C	ALA	E	370	36.067	-33.095	-3.648	1.00	28.11		C
	ANISOU	4320	C	ALA	E	370	4547	1924	4208	-87	299	547	C
	ATOM	4321	O	ALA	E	370	35.301	-33.902	-4.202	1.00	28.06		O
10	ANISOU	4321	O	ALA	E	370	4597	1757	4307	-159	342	541	O
	ATOM	4322	N	THR	E	371	35.662	-31.950	-3.090	1.00	27.19		N
	ANISOU	4322	N	THR	E	371	4377	2016	3936	-165	354	524	N
	ATOM	4323	CA	THR	E	371	34.304	-31.425	-3.247	1.00	26.56		C
	ANISOU	4323	CA	THR	E	371	4270	2009	3814	-313	474	464	C
	ATOM	4324	CB	THR	E	371	33.385	-31.679	-2.005	1.00	28.20		C
15	ANISOU	4324	CB	THR	E	371	4554	2275	3886	-460	531	605	C
	ATOM	4325	OG1	THR	E	371	33.794	-30.847	-0.909	1.00	29.59		O
	ANISOU	4325	OG1	THR	E	371	4714	2648	3883	-451	514	632	O
	ATOM	4326	CG2	THR	E	371	33.393	-33.154	-1.572	1.00	28.40		C
20	ANISOU	4326	CG2	THR	E	371	4730	2103	3955	-493	486	799	C
	ATOM	4327	C	THR	E	371	34.395	-29.935	-3.534	1.00	25.42		C
	ANISOU	4327	C	THR	E	371	4005	2038	3615	-293	508	318	C
	ATOM	4328	O	THR	E	371	35.432	-29.303	-3.270	1.00	26.43		O
	ANISOU	4328	O	THR	E	371	4090	2253	3699	-209	452	292	O
	ATOM	4329	N	ALA	E	372	33.332	-29.363	-4.091	1.00	23.65		N
25	ANISOU	4329	N	ALA	E	372	3723	1856	3408	-370	590	222	N
	ATOM	4330	CA	ALA	E	372	33.374	-27.962	-4.454	1.00	21.68		C
	ANISOU	4330	CA	ALA	E	372	3378	1723	3137	-344	611	98	C
	ATOM	4331	CB	ALA	E	372	34.062	-27.763	-5.828	1.00	20.08		C
30	ANISOU	4331	CB	ALA	E	372	3135	1466	3029	-263	579	10	C
	ATOM	4332	C	ALA	E	372	32.005	-27.314	-4.448	1.00	20.75		C
	ANISOU	4332	C	ALA	E	372	3202	1678	3005	-430	691	32	C
	ATOM	4333	O	ALA	E	372	30.976	-28.000	-4.439	1.00	20.60		O
	ANISOU	4333	O	ALA	E	372	3192	1627	3010	-519	740	58	O
35	ATOM	4334	N	ILE	E	373	32.007	-25.988	-4.420	1.00	19.68		N
	ANISOU	4334	N	ILE	E	373	2997	1635	2845	-402	704	-60	N
	ATOM	4335	CA	ILE	E	373	30.801	-25.212	-4.699	1.00	20.41		C
	ANISOU	4335	CA	ILE	E	373	3008	1776	2971	-434	756	-152	C
	ATOM	4336	CB	ILE	E	373	30.356	-24.310	-3.515	1.00	21.75		C
40	ANISOU	4336	CB	ILE	E	373	3130	2078	3058	-463	816	-213	C
	ATOM	4337	CG1	ILE	E	373	30.315	-25.102	-2.203	1.00	22.01		C
	ANISOU	4337	CG1	ILE	E	373	3221	2184	2956	-546	858	-120	C
	ATOM	4338	CD1	ILE	E	373	29.912	-24.273	-0.985	1.00	23.87		C
	ANISOU	4338	CD1	ILE	E	373	3410	2587	3072	-587	931	-202	C
	ATOM	4339	CG2	ILE	E	373	28.992	-23.701	-3.819	1.00	22.34		C
45	ANISOU	4339	CG2	ILE	E	373	3098	2190	3199	-479	868	-317	C
	ATOM	4340	C	ILE	E	373	31.126	-24.332	-5.891	1.00	19.23		C
	ANISOU	4340	C	ILE	E	373	2823	1587	2896	-361	711	-221	C
	ATOM	4341	O	ILE	E	373	32.156	-23.665	-5.899	1.00	18.51		O
50	ANISOU	4341	O	ILE	E	373	2742	1500	2792	-313	680	-234	O
	ATOM	4342	N	LEU	E	374	30.252	-24.362	-6.898	1.00	18.79		N
	ANISOU	4342	N	LEU	E	374	2728	1502	2910	-368	705	-257	N
	ATOM	4343	CA	LEU	E	374	30.467	-23.673	-8.178	1.00	17.10		C
	ANISOU	4343	CA	LEU	E	374	2503	1253	2742	-312	653	-288	C
	ATOM	4344	CB	LEU	E	374	30.623	-24.697	-9.314	1.00	17.63		C
55	ANISOU	4344	CB	LEU	E	374	2605	1264	2828	-322	623	-275	C
	ATOM	4345	CG	LEU	E	374	30.560	-24.218	-10.764	1.00	17.47		C
	ANISOU	4345	CG	LEU	E	374	2579	1243	2816	-294	572	-302	C
	ATOM	4346	CD1	LEU	E	374	31.820	-23.383	-11.076	1.00	17.18		C
	ANISOU	4346	CD1	LEU	E	374	2575	1203	2747	-255	564	-283	C
60	ATOM	4347	CD2	LEU	E	374	30.469	-25.360	-11.696	1.00	17.08		C
	ANISOU	4347	CD2	LEU	E	374	2553	1165	2772	-323	556	-327	C
	ATOM	4348	C	LEU	E	374	29.286	-22.786	-8.498	1.00	16.92		C
	ANISOU	4348	C	LEU	E	374	2401	1258	2770	-295	642	-348	C
	ATOM	4349	O	LEU	E	374	28.126	-23.249	-8.481	1.00	15.98		O

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	4349	O	LEU	E	374	2218	1172	2681	-335	659	-377	O
		ATOM	4350	N	ARG	E	375	29.570	-21.498	-8.726	1.00	16.55		N
		ANISOU	4350	N	ARG	E	375	2349	1192	2748	-236	611	-368	N
		ATOM	4351	CA	ARG	E	375	28.615	-20.620	-9.352	1.00	17.49		C
5		ANISOU	4351	CA	ARG	E	375	2408	1298	2938	-184	562	-403	C
		ATOM	4352	CB	ARG	E	375	28.483	-19.295	-8.633	1.00	18.68		C
		ANISOU	4352	CB	ARG	E	375	2524	1428	3145	-130	572	-466	C
		ATOM	4353	CG	ARG	E	375	27.717	-19.389	-7.371	1.00	20.56		C
		ANISOU	4353	CG	ARG	E	375	2678	1751	3384	-149	650	-557	C
10		ATOM	4354	CD	ARG	E	375	27.873	-18.091	-6.582	1.00	21.88		C
		ANISOU	4354	CD	ARG	E	375	2826	1893	3596	-98	670	-652	C
		ATOM	4355	NE	ARG	E	375	27.046	-18.192	-5.379	1.00	25.86		N
		ANISOU	4355	NE	ARG	E	375	3235	2515	4078	-123	763	-765	N
		ATOM	4356	CZ	ARG	E	375	27.146	-17.421	-4.310	1.00	26.86		C
15		ANISOU	4356	CZ	ARG	E	375	3334	2677	4193	-112	819	-885	C
		ATOM	4357	NH1	ARG	E	375	28.046	-16.437	-4.266	1.00	25.55		N
		ANISOU	4357	NH1	ARG	E	375	3231	2415	4060	-78	782	-912	N
		ATOM	4358	NH2	ARG	E	375	26.320	-17.641	-3.296	1.00	29.10		N
		ANISOU	4358	NH2	ARG	E	375	3524	3103	4428	-151	921	-990	N
20		ATOM	4359	C	ARG	E	375	29.014	-20.386	-10.800	1.00	18.25		C
		ANISOU	4359	C	ARG	E	375	2561	1348	3024	-160	485	-343	C
		ATOM	4360	O	ARG	E	375	30.185	-20.109	-11.131	1.00	17.38		O
		ANISOU	4360	O	ARG	E	375	2525	1203	2875	-168	486	-298	O
		ATOM	4361	N	LYS	E	376	28.012	-20.433	-11.660	1.00	18.54		N
25		ANISOU	4361	N	LYS	E	376	2552	1405	3088	-138	418	-348	N
		ATOM	4362	CA	LYS	E	376	28.255	-20.335	-13.071	1.00	19.40		C
		ANISOU	4362	CA	LYS	E	376	2719	1506	3147	-130	341	-288	C
		ATOM	4363	CB	LYS	E	376	28.315	-21.771	-13.583	1.00	20.73		C
		ANISOU	4363	CB	LYS	E	376	2900	1723	3255	-198	357	-310	C
30		ATOM	4364	CG	LYS	E	376	28.136	-21.939	-15.015	1.00	24.60		C
		ANISOU	4364	CG	LYS	E	376	3416	2255	3675	-204	277	-295	C
		ATOM	4365	CD	LYS	E	376	27.437	-23.258	-15.295	1.00	25.85		C
		ANISOU	4365	CD	LYS	E	376	3527	2461	3833	-265	272	-374	C
		ATOM	4366	CE	LYS	E	376	27.641	-23.566	-16.743	1.00	24.77		C
35		ANISOU	4366	CE	LYS	E	376	3442	2383	3587	-287	210	-382	C
		ATOM	4367	NZ	LYS	E	376	26.874	-22.594	-17.523	1.00	26.75		N
		ANISOU	4367	NZ	LYS	E	376	3667	2688	3807	-233	84	-331	N
		ATOM	4368	C	LYS	E	376	27.119	-19.526	-13.719	1.00	19.69		C
		ANISOU	4368	C	LYS	E	376	2697	1543	3240	-55	230	-279	C
40		ATOM	4369	O	LYS	E	376	26.022	-19.438	-13.178	1.00	19.19		O
		ANISOU	4369	O	LYS	E	376	2517	1510	3263	-17	221	-351	O
		ATOM	4370	N	ALA	E	377	27.402	-18.913	-14.861	1.00	19.87		N
		ANISOU	4370	N	ALA	E	377	2797	1542	3209	-31	144	-188	N
		ATOM	4371	CA	ALA	E	377	26.369	-18.220	-15.644	1.00	21.63		C
45		ANISOU	4371	CA	ALA	E	377	2981	1768	3469	54	0	-149	C
		ATOM	4372	CB	ALA	E	377	26.452	-16.693	-15.458	1.00	21.14		C
		ANISOU	4372	CB	ALA	E	377	2959	1567	3505	144	-50	-82	C
		ATOM	4373	C	ALA	E	377	26.594	-18.616	-17.102	1.00	21.95		C
		ANISOU	4373	C	ALA	E	377	3102	1884	3355	9	-75	-74	C
50		ATOM	4374	O	ALA	E	377	27.330	-19.549	-17.351	1.00	21.69		O
		ANISOU	4374	O	ALA	E	377	3116	1904	3222	-80	1	-102	O
		ATOM	4375	N	THR	E	378	25.972	-17.923	-18.050	1.00	23.90		N
		ANISOU	4375	N	THR	E	378	3362	2140	3578	76	-228	13	N
		ATOM	4376	CA	THR	E	378	26.139	-18.227	-19.483	1.00	25.60		C
55		ANISOU	4376	CA	THR	E	378	3662	2460	3605	26	-310	87	C
		ATOM	4377	CB	THR	E	378	25.299	-17.275	-20.380	1.00	27.85		C
		ANISOU	4377	CB	THR	E	378	3960	2747	3875	127	-515	214	C
		ATOM	4378	OG1	THR	E	378	23.947	-17.261	-19.926	1.00	29.57		O
		ANISOU	4378	OG1	THR	E	378	4001	2984	4250	234	-608	120	O
60		ATOM	4379	CG2	THR	E	378	25.304	-17.743	-21.851	1.00	30.08		C
		ANISOU	4379	CG2	THR	E	378	4315	3193	3920	64	-612	270	C
		ATOM	4380	C	THR	E	378	27.615	-18.190	-19.933	1.00	25.01		C
		ANISOU	4380	C	THR	E	378	3737	2377	3386	-74	-208	164	C
		ATOM	4381	O	THR	E	378	28.215	-17.115	-20.060	1.00	25.04		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4381	O	THR	E	378	3843	2284	3387	-70	-212	297	O
	ATOM	4382	N	ARG	E	379	28.184	-19.373	-20.172	1.00	24.99		N
	ANISOU	4382	N	ARG	E	379	3740	2472	3282	-166	-114	69	N
	ATOM	4383	CA	ARG	E	379	29.589	-19.500	-20.611	1.00	25.62		C
5	ANISOU	4383	CA	ARG	E	379	3921	2580	3232	-258	-1	97	C
	ATOM	4384	CB	ARG	E	379	29.750	-19.126	-22.102	1.00	27.18		C
	ANISOU	4384	CB	ARG	E	379	4227	2889	3212	-308	-73	210	C
	ATOM	4385	CG	ARG	E	379	28.814	-19.879	-23.053	1.00	28.80		C
	ANISOU	4385	CG	ARG	E	379	4399	3250	3295	-310	-189	143	C
10	ATOM	4386	CD	ARG	E	379	29.241	-19.684	-24.521	1.00	29.35		C
	ANISOU	4386	CD	ARG	E	379	4591	3475	3087	-391	-225	235	C
	ATOM	4387	NE	ARG	E	379	30.539	-20.308	-24.733	1.00	29.26		N
	ANISOU	4387	NE	ARG	E	379	4615	3531	2972	-495	-44	147	N
	ATOM	4388	CZ	ARG	E	379	31.290	-20.180	-25.826	1.00	30.78		C
15	ANISOU	4388	CZ	ARG	E	379	4907	3869	2920	-596	5	198	C
	ATOM	4389	NH1	ARG	E	379	30.879	-19.451	-26.857	1.00	32.74		N
	ANISOU	4389	NH1	ARG	E	379	5258	4210	2972	-620	-124	368	N
	ATOM	4390	NH2	ARG	E	379	32.460	-20.789	-25.883	1.00	28.70		N
	ANISOU	4390	NH2	ARG	E	379	4634	3667	2604	-672	184	78	N
20	ATOM	4391	C	ARG	E	379	30.531	-18.661	-19.737	1.00	25.30		C
	ANISOU	4391	C	ARG	E	379	3915	2410	3286	-262	92	154	C
	ATOM	4392	O	ARG	E	379	31.356	-17.912	-20.253	1.00	26.75		O
	ANISOU	4392	O	ARG	E	379	4194	2579	3389	-319	119	264	O
	ATOM	4393	N	ARG	E	380	30.394	-18.803	-18.417	1.00	25.10		N
25	ANISOU	4393	N	ARG	E	380	3810	2304	3421	-220	143	73	N
	ATOM	4394	CA	ARG	E	380	31.158	-18.022	-17.438	1.00	25.31		C
	ANISOU	4394	CA	ARG	E	380	3851	2220	3547	-222	216	92	C
	ATOM	4395	CB	ARG	E	380	30.500	-16.655	-17.212	1.00	26.33		C
	ANISOU	4395	CB	ARG	E	380	3995	2220	3788	-147	126	171	C
30	ATOM	4396	CG	ARG	E	380	31.262	-15.682	-16.289	1.00	27.56		C
	ANISOU	4396	CG	ARG	E	380	4176	2243	4052	-160	190	176	C
	ATOM	4397	CD	ARG	E	380	30.391	-14.433	-16.058	1.00	30.89		C
	ANISOU	4397	CD	ARG	E	380	4602	2511	4622	-58	88	218	C
	ATOM	4398	NE	ARG	E	380	30.622	-13.828	-14.744	1.00	38.11		N
35	ANISOU	4398	NE	ARG	E	380	5478	3322	5681	-38	149	120	N
	ATOM	4399	CZ	ARG	E	380	29.754	-13.045	-14.114	1.00	42.71		C
	ANISOU	4399	CZ	ARG	E	380	6009	3793	6425	71	96	61	C
	ATOM	4400	NH1	ARG	E	380	28.579	-12.763	-14.675	1.00	45.06		N
	ANISOU	4400	NH1	ARG	E	380	6275	4064	6780	186	-32	102	N
40	ATOM	4401	NH2	ARG	E	380	30.059	-12.552	-12.914	1.00	44.78		N
	ANISOU	4401	NH2	ARG	E	380	6238	3985	6791	72	166	-57	N
	ATOM	4402	C	ARG	E	380	31.203	-18.783	-16.134	1.00	23.46		C
	ANISOU	4402	C	ARG	E	380	3532	1980	3404	-208	293	-29	C
	ATOM	4403	O	ARG	E	380	30.167	-19.189	-15.617	1.00	24.09		O
45	ANISOU	4403	O	ARG	E	380	3534	2067	3551	-163	264	-91	O
	ATOM	4404	N	LEU	E	381	32.405	-19.005	-15.619	1.00	22.65		N
	ANISOU	4404	N	LEU	E	381	3438	1877	3293	-254	389	-57	N
	ATOM	4405	CA	LEU	E	381	32.583	-19.406	-14.222	1.00	21.63		C
	ANISOU	4405	CA	LEU	E	381	3250	1728	3240	-238	446	-133	C
50	ATOM	4406	CB	LEU	E	381	33.941	-20.107	-14.030	1.00	21.33		C
	ANISOU	4406	CB	LEU	E	381	3212	1732	3162	-278	523	-167	C
	ATOM	4407	CG	LEU	E	381	34.244	-20.753	-12.662	1.00	19.23		C
	ANISOU	4407	CG	LEU	E	381	2900	1465	2942	-259	560	-221	C
	ATOM	4408	CD1	LEU	E	381	35.081	-21.997	-12.834	1.00	13.40		C
55	ANISOU	4408	CD1	LEU	E	381	2152	765	2174	-259	593	-258	C
	ATOM	4409	CD2	LEU	E	381	34.922	-19.699	-11.796	1.00	17.93		C
	ANISOU	4409	CD2	LEU	E	381	2726	1273	2813	-272	577	-225	C
	ATOM	4410	C	LEU	E	381	32.513	-18.135	-13.379	1.00	21.99		C
	ANISOU	4410	C	LEU	E	381	3292	1685	3378	-213	439	-126	C
60	ATOM	4411	O	LEU	E	381	33.301	-17.199	-13.572	1.00	23.59		O
	ANISOU	4411	O	LEU	E	381	3544	1833	3586	-250	450	-79	O
	ATOM	4412	N	VAL	E	382	31.546	-18.064	-12.477	1.00	21.86		N
	ANISOU	4412	N	VAL	E	382	3214	1654	3439	-161	427	-184	N
	ATOM	4413	CA	VAL	E	382	31.417	-16.882	-11.602	1.00	21.55		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4413	CA	VAL	E	382	3160	1532	3496	-127	428	-223	C
	ATOM	4414	CB	VAL	E	382	29.957	-16.691	-11.098	1.00	21.88		C
	ANISOU	4414	CB	VAL	E	382	3114	1573	3625	-48	398	-294	C
	ATOM	4415	CG1	VAL	E	382	29.859	-15.541	-10.076	1.00	22.19		C
5	ANISOU	4415	CG1	VAL	E	382	3128	1534	3770	-6	417	-382	C
	ATOM	4416	CG2	VAL	E	382	29.020	-16.449	-12.269	1.00	20.93		C
	ANISOU	4416	CG2	VAL	E	382	2990	1431	3530	11	293	-231	C
	ATOM	4417	C	VAL	E	382	32.403	-17.045	-10.441	1.00	20.98		C
	ANISOU	4417	C	VAL	E	382	3076	1491	3404	-172	502	-285	C
10	ATOM	4418	O	VAL	E	382	33.214	-16.165	-10.189	1.00	21.61		O
	ANISOU	4418	O	VAL	E	382	3184	1514	3514	-203	515	-294	O
	ATOM	4419	N	GLN	E	383	32.352	-18.188	-9.762	1.00	20.35		N
	ANISOU	4419	N	GLN	E	383	2959	1500	3272	-184	541	-319	N
	ATOM	4420	CA	GLN	E	383	33.239	-18.459	-8.653	1.00	20.51		C
15	ANISOU	4420	CA	GLN	E	383	2970	1571	3251	-214	585	-358	C
	ATOM	4421	CB	GLN	E	383	32.825	-17.601	-7.432	1.00	22.63		C
	ANISOU	4421	CB	GLN	E	383	3202	1840	3555	-201	605	-454	C
	ATOM	4422	CG	GLN	E	383	33.753	-17.779	-6.252	1.00	28.07		C
	ANISOU	4422	CG	GLN	E	383	3885	2608	4173	-239	631	-498	C
20	ATOM	4423	CD	GLN	E	383	33.698	-16.625	-5.265	1.00	36.66		C
	ANISOU	4423	CD	GLN	E	383	4948	3689	5291	-243	647	-622	C
	ATOM	4424	OE1	GLN	E	383	32.636	-15.998	-5.049	1.00	36.66		O
	ANISOU	4424	OE1	GLN	E	383	4916	3654	5358	-202	662	-698	O
	ATOM	4425	NE2	GLN	E	383	34.860	-16.332	-4.649	1.00	38.02		N
25	ANISOU	4425	NE2	GLN	E	383	5121	3901	5423	-289	640	-665	N
	ATOM	4426	C	GLN	E	383	33.243	-19.938	-8.326	1.00	19.34		C
	ANISOU	4426	C	GLN	E	383	2817	1492	3040	-225	604	-337	C
	ATOM	4427	O	GLN	E	383	32.239	-20.609	-8.509	1.00	18.92		O
	ANISOU	4427	O	GLN	E	383	2748	1449	2993	-222	605	-329	O
30	ATOM	4428	N	LEU	E	384	34.387	-20.445	-7.868	1.00	18.66		N
	ANISOU	4428	N	LEU	E	384	2739	1443	2907	-238	610	-326	N
	ATOM	4429	CA	LEU	E	384	34.544	-21.825	-7.460	1.00	18.10		C
	ANISOU	4429	CA	LEU	E	384	2681	1403	2795	-235	612	-288	C
	ATOM	4430	CB	LEU	E	384	35.331	-22.585	-8.546	1.00	18.49		C
35	ANISOU	4430	CB	LEU	E	384	2743	1425	2855	-217	599	-264	C
	ATOM	4431	CG	LEU	E	384	35.671	-24.077	-8.334	1.00	18.11		C
	ANISOU	4431	CG	LEU	E	384	2716	1358	2806	-190	586	-231	C
	ATOM	4432	CD1	LEU	E	384	34.428	-24.981	-8.395	1.00	15.62		C
	ANISOU	4432	CD1	LEU	E	384	2432	995	2509	-217	597	-207	C
40	ATOM	4433	CD2	LEU	E	384	36.728	-24.517	-9.342	1.00	17.92		C
	ANISOU	4433	CD2	LEU	E	384	2677	1325	2807	-156	583	-260	C
	ATOM	4434	C	LEU	E	384	35.349	-21.856	-6.147	1.00	19.39		C
	ANISOU	4434	C	LEU	E	384	2837	1632	2899	-236	602	-293	C
	ATOM	4435	O	LEU	E	384	36.373	-21.166	-6.044	1.00	19.75		O
45	ANISOU	4435	O	LEU	E	384	2857	1702	2944	-238	586	-328	O
	ATOM	4436	N	ILE	E	385	34.898	-22.664	-5.175	1.00	19.03		N
	ANISOU	4436	N	ILE	E	385	2812	1624	2793	-249	609	-252	N
	ATOM	4437	CA	ILE	E	385	35.659	-22.991	-3.966	1.00	19.96		C
	ANISOU	4437	CA	ILE	E	385	2941	1820	2821	-245	576	-221	C
50	ATOM	4438	CB	ILE	E	385	34.993	-22.480	-2.627	1.00	21.28		C
	ANISOU	4438	CB	ILE	E	385	3107	2094	2884	-296	612	-260	C
	ATOM	4439	CG1	ILE	E	385	34.558	-21.029	-2.788	1.00	21.71		C
	ANISOU	4439	CG1	ILE	E	385	3111	2146	2993	-305	650	-390	C
	ATOM	4440	CD1	ILE	E	385	33.762	-20.478	-1.643	1.00	22.98		C
55	ANISOU	4440	CD1	ILE	E	385	3249	2408	3075	-344	707	-479	C
	ATOM	4441	CG2	ILE	E	385	36.012	-22.510	-1.462	1.00	21.32		C
	ANISOU	4441	CG2	ILE	E	385	3118	2212	2770	-293	553	-247	C
	ATOM	4442	C	ILE	E	385	35.839	-24.504	-3.882	1.00	20.24		C
	ANISOU	4442	C	ILE	E	385	3032	1811	2849	-222	542	-109	C
60	ATOM	4443	O	ILE	E	385	34.856	-25.249	-3.881	1.00	19.69		O
	ANISOU	4443	O	ILE	E	385	3003	1695	2782	-261	578	-57	O
	ATOM	4444	N	VAL	E	386	37.097	-24.943	-3.810	1.00	19.46		N
	ANISOU	4444	N	VAL	E	386	2924	1714	2754	-158	472	-79	N
	ATOM	4445	CA	VAL	E	386	37.410	-26.350	-3.752	1.00	20.14		C

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	4445	CA	VAL	E	386	3063	1721	2866	-106	420	23	C
		ATOM	4446	CB	VAL	E	386	38.383	-26.761	-4.859	1.00	20.24		C
		ANISOU	4446	CB	VAL	E	386	3030	1666	2993	-20	390	-23	C
		ATOM	4447	CG1	VAL	E	386	38.441	-28.280	-4.958	1.00	19.96		C
5		ANISOU	4447	CG1	VAL	E	386	3061	1495	3030	41	346	60	C
		ATOM	4448	CG2	VAL	E	386	37.960	-26.147	-6.192	1.00	19.11		C
		ANISOU	4448	CG2	VAL	E	386	2855	1498	2906	-57	463	-116	C
		ATOM	4449	C	VAL	E	386	37.999	-26.803	-2.420	1.00	21.41		C
10		ANISOU	4449	C	VAL	E	386	3261	1950	2925	-78	336	123	C
		ATOM	4450	O	VAL	E	386	38.857	-26.159	-1.871	1.00	19.90		O
		ANISOU	4450	O	VAL	E	386	3012	1873	2674	-54	282	81	O
		ATOM	4451	N	SER	E	387	37.500	-27.932	-1.919	1.00	23.78		N
		ANISOU	4451	N	SER	E	387	3661	2176	3199	-93	320	261	N
		ATOM	4452	CA	SER	E	387	38.069	-28.605	-0.755	1.00	26.40		C
15		ANISOU	4452	CA	SER	E	387	4058	2542	3430	-55	216	407	C
		ATOM	4453	CB	SER	E	387	36.995	-28.748	0.300	1.00	26.98		C
		ANISOU	4453	CB	SER	E	387	4226	2682	3345	-183	274	511	C
		ATOM	4454	OG	SER	E	387	37.539	-29.206	1.517	1.00	32.13		O
20		ANISOU	4454	OG	SER	E	387	4952	3411	3846	-163	169	663	O
		ATOM	4455	C	SER	E	387	38.555	-29.968	-1.228	1.00	27.98		C
		ANISOU	4455	C	SER	E	387	4311	2549	3769	49	138	502	C
		ATOM	4456	O	SER	E	387	37.824	-30.693	-1.905	1.00	28.28		O
		ANISOU	4456	O	SER	E	387	4407	2428	3912	14	195	518	O
		ATOM	4457	N	GLY	E	388	39.787	-30.324	-0.904	1.00	30.49		N
25		ANISOU	4457	N	GLY	E	388	4601	2877	4108	182	2	545	N
		ATOM	4458	CA	GLY	E	388	40.414	-31.510	-1.506	1.00	31.87		C
		ANISOU	4458	CA	GLY	E	388	4792	2855	4464	322	-77	582	C
		ATOM	4459	C	GLY	E	388	41.481	-32.119	-0.645	1.00	35.20		C
30		ANISOU	4459	C	GLY	E	388	5224	3281	4870	465	-259	711	C
		ATOM	4460	O	GLY	E	388	42.053	-31.431	0.193	1.00	35.40		O
		ANISOU	4460	O	GLY	E	388	5192	3507	4752	473	-333	715	O
		ATOM	4461	N	LYS	E	389	41.744	-33.416	-0.854	1.00	37.79		N
		ANISOU	4461	N	LYS	E	389	5625	3381	5354	584	-343	808	N
35		ATOM	4462	CA	LYS	E	389	42.695	-34.177	-0.038	1.00	41.58		C
		ANISOU	4462	CA	LYS	E	389	6134	3817	5846	751	-547	967	C
		ATOM	4463	CB	LYS	E	389	42.453	-35.683	-0.179	1.00	43.32		C
		ANISOU	4463	CB	LYS	E	389	6511	3710	6238	824	-607	1121	C
		ATOM	4464	CG	LYS	E	389	41.149	-36.173	0.475	1.00	45.67		C
40		ANISOU	4464	CG	LYS	E	389	7029	3907	6418	632	-541	1336	C
		ATOM	4465	CD	LYS	E	389	40.990	-37.698	0.334	1.00	48.65		C
		ANISOU	4465	CD	LYS	E	389	7573	3918	6995	695	-610	1495	C
		ATOM	4466	CE	LYS	E	389	39.920	-38.253	1.282	1.00	53.15		C
		ANISOU	4466	CE	LYS	E	389	8371	4404	7418	499	-579	1774	C
45		ATOM	4467	NZ	LYS	E	389	39.307	-39.499	0.737	1.00	55.21		N
		ANISOU	4467	NZ	LYS	E	389	8779	4293	7904	458	-545	1839	N
		ATOM	4468	C	LYS	E	389	44.154	-33.830	-0.362	1.00	41.93		C
		ANISOU	4468	C	LYS	E	389	5968	3976	5988	934	-650	813	C
		ATOM	4469	O	LYS	E	389	45.009	-33.920	0.510	1.00	43.82		O
50		ANISOU	4469	O	LYS	E	389	6171	4312	6166	1049	-828	906	O
		ATOM	4470	N	ASP	E	390	44.426	-33.440	-1.615	1.00	40.64		N
		ANISOU	4470	N	ASP	E	390	5659	3817	5965	951	-538	578	N
		ATOM	4471	CA	ASP	E	390	45.777	-33.057	-2.081	1.00	40.81		C
		ANISOU	4471	CA	ASP	E	390	5452	3968	6088	1091	-589	396	C
55		ATOM	4472	CB	ASP	E	390	46.690	-34.296	-2.287	1.00	43.89		C
		ANISOU	4472	CB	ASP	E	390	5794	4180	6703	1343	-735	406	C
		ATOM	4473	CG	ASP	E	390	46.218	-35.219	-3.405	1.00	44.30		C
		ANISOU	4473	CG	ASP	E	390	5913	3965	6955	1376	-637	329	C
		ATOM	4474	OD1	ASP	E	390	45.353	-34.826	-4.203	1.00	44.98		O
60		ANISOU	4474	OD1	ASP	E	390	6038	4044	7009	1213	-458	233	O
		ATOM	4475	OD2	ASP	E	390	46.724	-36.355	-3.504	1.00	48.47		O
		ANISOU	4475	OD2	ASP	E	390	6450	4282	7682	1574	-751	352	O
		ATOM	4476	C	ASP	E	390	45.746	-32.154	-3.336	1.00	38.51		C
		ANISOU	4476	C	ASP	E	390	5031	3767	5836	995	-404	157	C
		ATOM	4477	O	ASP	E	390	44.671	-31.829	-3.839	1.00	36.33		O

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU 4477	O	ASP E 390	4845	3447	5510	841	-259	138	O
		ATOM 4478	N	GLU E 391	46.925	-31.763	-3.828	1.00	38.93		N
		ANISOU 4478	N	GLU E 391	4869	3952	5972	1081	-414	-16	N
		ATOM 4479	CA	GLU E 391	47.081	-30.789	-4.922	1.00	37.97		C
5		ANISOU 4479	CA	GLU E 391	4618	3953	5855	972	-246	-219	C
		ATOM 4480	CB	GLU E 391	48.560	-30.441	-5.133	1.00	38.98		C
		ANISOU 4480	CB	GLU E 391	4490	4258	6064	1066	-286	-380	C
		ATOM 4481	CG	GLU E 391	48.856	-28.960	-4.994	1.00	40.24		C
		ANISOU 4481	CG	GLU E 391	4543	4643	6104	900	-222	-461	C
10		ATOM 4482	CD	GLU E 391	50.336	-28.644	-4.975	1.00	43.40		C
		ANISOU 4482	CD	GLU E 391	4675	5236	6579	973	-281	-608	C
		ATOM 4483	OE1	GLU E 391	50.699	-27.575	-4.425	1.00	48.91		O
		ANISOU 4483	OE1	GLU E 391	5289	6112	7182	857	-298	-644	O
		ATOM 4484	OE2	GLU E 391	51.139	-29.445	-5.512	1.00	49.31		O
15		ANISOU 4484	OE2	GLU E 391	5283	5963	7491	1142	-308	-707	O
		ATOM 4485	C	GLU E 391	46.489	-31.257	-6.243	1.00	36.17		C
		ANISOU 4485	C	GLU E 391	4442	3579	5722	947	-104	-312	C
		ATOM 4486	O	GLU E 391	45.845	-30.480	-6.927	1.00	34.25		O
		ANISOU 4486	O	GLU E 391	4226	3383	5403	790	37	-371	O
20		ATOM 4487	N	GLN E 392	46.733	-32.515	-6.596	1.00	36.79		N
		ANISOU 4487	N	GLN E 392	4532	3478	5968	1108	-154	-333	N
		ATOM 4488	CA	GLN E 392	46.180	-33.135	-7.801	1.00	36.36		C
		ANISOU 4488	CA	GLN E 392	4533	3272	6008	1095	-38	-442	C
		ATOM 4489	CB	GLN E 392	46.833	-34.495	-8.032	1.00	39.07		C
25		ANISOU 4489	CB	GLN E 392	4841	3428	6575	1320	-124	-506	C
		ATOM 4490	CG	GLN E 392	46.093	-35.431	-8.959	1.00	42.17		C
		ANISOU 4490	CG	GLN E 392	5347	3596	7078	1314	-46	-586	C
		ATOM 4491	CD	GLN E 392	46.480	-36.877	-8.682	1.00	51.76		C
		ANISOU 4491	CD	GLN E 392	6607	4534	8524	1534	-183	-558	C
30		ATOM 4492	OE1	GLN E 392	46.212	-37.410	-7.595	1.00	55.83		O
		ANISOU 4492	OE1	GLN E 392	7265	4895	9053	1576	-325	-322	O
		ATOM 4493	NE2	GLN E 392	47.145	-37.513	-9.647	1.00	54.63		N
		ANISOU 4493	NE2	GLN E 392	6850	4836	9072	1680	-143	-798	N
		ATOM 4494	C	GLN E 392	44.645	-33.273	-7.800	1.00	33.83		C
35		ANISOU 4494	C	GLN E 392	4427	2818	5610	940	22	-326	C
		ATOM 4495	O	GLN E 392	44.020	-33.044	-8.836	1.00	31.93		O
		ANISOU 4495	O	GLN E 392	4205	2580	5345	834	152	-432	O
		ATOM 4496	N	SER E 393	44.058	-33.650	-6.657	1.00	32.93		N
		ANISOU 4496	N	SER E 393	4460	2605	5446	923	-72	-113	N
40		ATOM 4497	CA	SER E 393	42.611	-33.725	-6.519	1.00	31.18		C
		ANISOU 4497	CA	SER E 393	4411	2291	5146	759	-8	-5	C
		ATOM 4498	CB	SER E 393	42.242	-34.366	-5.185	1.00	33.05		C
		ANISOU 4498	CB	SER E 393	4797	2419	5340	763	-120	238	C
		ATOM 4499	OG	SER E 393	42.910	-35.606	-5.020	1.00	36.61		O
45		ANISOU 4499	OG	SER E 393	5282	2665	5964	946	-249	295	O
		ATOM 4500	C	SER E 393	41.941	-32.337	-6.624	1.00	28.79		C
		ANISOU 4500	C	SER E 393	4086	2181	4671	581	102	-36	C
		ATOM 4501	O	SER E 393	40.854	-32.192	-7.202	1.00	27.10		O
		ANISOU 4501	O	SER E 393	3935	1933	4428	456	198	-62	O
50		ATOM 4502	N	ILE E 394	42.586	-31.323	-6.062	1.00	27.47		N
		ANISOU 4502	N	ILE E 394	3824	2208	4405	574	76	-41	N
		ATOM 4503	CA	ILE E 394	42.091	-29.953	-6.192	1.00	26.15		C
		ANISOU 4503	CA	ILE E 394	3629	2193	4112	427	170	-88	C
		ATOM 4504	CB	ILE E 394	42.826	-28.959	-5.223	1.00	26.34		C
55		ANISOU 4504	CB	ILE E 394	3570	2404	4034	417	111	-78	C
		ATOM 4505	CG1	ILE E 394	42.490	-29.298	-3.766	1.00	28.07		C
		ANISOU 4505	CG1	ILE E 394	3891	2627	4148	416	14	91	C
		ATOM 4506	CD1	ILE E 394	43.465	-28.723	-2.752	1.00	28.88		C
		ANISOU 4506	CD1	ILE E 394	3905	2906	4162	452	-94	95	C
60		ATOM 4507	CG2	ILE E 394	42.405	-27.519	-5.487	1.00	24.76		C
		ANISOU 4507	CG2	ILE E 394	3340	2317	3749	276	210	-152	C
		ATOM 4508	C	ILE E 394	42.142	-29.511	-7.661	1.00	24.62		C
		ANISOU 4508	C	ILE E 394	3365	2030	3959	387	283	-247	C
		ATOM 4509	O	ILE E 394	41.175	-28.957	-8.182	1.00	22.84		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4509	O	ILE	E	394	3189	1810	3678	272	366	-261	O
	ATOM	4510	N	ALA	E	395	43.257	-29.804	-8.328	1.00	25.55		N
	ANISOU	4510	N	ALA	E	395	3364	2176	4169	487	282	-366	N
	ATOM	4511	CA	ALA	E	395	43.459	-29.462	-9.732	1.00	25.07		C
5	ANISOU	4511	CA	ALA	E	395	3232	2174	4119	445	397	-519	C
	ATOM	4512	CB	ALA	E	395	44.872	-29.811	-10.162	1.00	27.09		C
	ANISOU	4512	CB	ALA	E	395	3321	2497	4473	567	394	-657	C
	ATOM	4513	C	ALA	E	395	42.439	-30.156	-10.642	1.00	25.59		C
10	ANISOU	4513	C	ALA	E	395	3403	2112	4209	408	454	-551	C
	ATOM	4514	O	ALA	E	395	41.894	-29.517	-11.549	1.00	23.95		O
	ANISOU	4514	O	ALA	E	395	3210	1966	3923	300	540	-600	O
	ATOM	4515	N	GLU	E	396	42.193	-31.454	-10.389	1.00	27.00		N
	ANISOU	4515	N	GLU	E	396	3657	2108	4496	495	393	-519	N
	ATOM	4516	CA	GLU	E	396	41.166	-32.229	-11.086	1.00	27.69		C
15	ANISOU	4516	CA	GLU	E	396	3848	2051	4623	447	430	-554	C
	ATOM	4517	CB	GLU	E	396	41.104	-33.664	-10.542	1.00	29.27		C
	ANISOU	4517	CB	GLU	E	396	4134	2013	4973	547	344	-494	C
	ATOM	4518	CG	GLU	E	396	42.271	-34.530	-10.972	1.00	32.63		C
20	ANISOU	4518	CG	GLU	E	396	4474	2363	5563	729	311	-631	C
	ATOM	4519	CD	GLU	E	396	42.372	-35.851	-10.218	1.00	36.07		C
	ANISOU	4519	CD	GLU	E	396	5002	2534	6168	858	191	-529	C
	ATOM	4520	OE1	GLU	E	396	41.525	-36.109	-9.323	1.00	38.71		O
	ANISOU	4520	OE1	GLU	E	396	5482	2756	6470	779	143	-330	O
	ATOM	4521	OE2	GLU	E	396	43.304	-36.647	-10.530	1.00	42.02		O
25	ANISOU	4521	OE2	GLU	E	396	5684	3188	7095	1039	148	-649	O
	ATOM	4522	C	GLU	E	396	39.785	-31.557	-11.059	1.00	25.08		C
	ANISOU	4522	C	GLU	E	396	3601	1751	4176	284	471	-475	C
	ATOM	4523	O	GLU	E	396	39.134	-31.458	-12.082	1.00	25.02		O
30	ANISOU	4523	O	GLU	E	396	3608	1763	4135	209	531	-560	O
	ATOM	4524	N	ALA	E	397	39.382	-31.055	-9.898	1.00	24.77		N
	ANISOU	4524	N	ALA	E	397	3603	1741	4069	238	435	-329	N
	ATOM	4525	CA	ALA	E	397	38.105	-30.350	-9.702	1.00	22.83		C
	ANISOU	4525	CA	ALA	E	397	3407	1538	3729	104	473	-267	C
35	ATOM	4526	CB	ALA	E	397	37.845	-30.182	-8.227	1.00	22.80		C
	ANISOU	4526	CB	ALA	E	397	3447	1548	3667	81	431	-123	C
	ATOM	4527	C	ALA	E	397	38.054	-29.011	-10.421	1.00	21.75		C
	ANISOU	4527	C	ALA	E	397	3209	1549	3504	43	529	-331	C
	ATOM	4528	O	ALA	E	397	37.043	-28.663	-11.030	1.00	22.91		O
40	ANISOU	4528	O	ALA	E	397	3380	1710	3614	-37	562	-349	O
	ATOM	4529	N	ILE	E	398	39.136	-28.247	-10.344	1.00	20.67		N
	ANISOU	4529	N	ILE	E	398	2993	1518	3341	75	531	-358	N
	ATOM	4530	CA	ILE	E	398	39.245	-27.004	-11.079	1.00	19.58		C
	ANISOU	4530	CA	ILE	E	398	2812	1492	3134	8	585	-403	C
45	ATOM	4531	CB	ILE	E	398	40.575	-26.213	-10.741	1.00	19.57		C
	ANISOU	4531	CB	ILE	E	398	2713	1599	3124	24	586	-429	C
	ATOM	4532	CG1	ILE	E	398	40.619	-25.880	-9.246	1.00	18.51		C
	ANISOU	4532	CG1	ILE	E	398	2582	1481	2970	32	523	-352	C
	ATOM	4533	CD1	ILE	E	398	41.963	-25.363	-8.757	1.00	20.95		C
50	ANISOU	4533	CD1	ILE	E	398	2779	1896	3284	56	495	-393	C
	ATOM	4534	CG2	ILE	E	398	40.655	-24.936	-11.565	1.00	17.52		C
	ANISOU	4534	CG2	ILE	E	398	2432	1422	2802	-73	651	-453	C
	ATOM	4535	C	ILE	E	398	39.063	-27.223	-12.597	1.00	19.20		C
	ANISOU	4535	C	ILE	E	398	2768	1457	3070	-19	639	-494	C
55	ATOM	4536	O	ILE	E	398	38.259	-26.545	-13.226	1.00	17.87		O
	ANISOU	4536	O	ILE	E	398	2634	1320	2835	-95	659	-479	O
	ATOM	4537	N	ILE	E	399	39.791	-28.190	-13.148	1.00	20.46		N
	ANISOU	4537	N	ILE	E	399	2890	1594	3288	52	653	-593	N
	ATOM	4538	CA	ILE	E	399	39.703	-28.555	-14.570	1.00	20.68		C
	ANISOU	4538	CA	ILE	E	399	2920	1655	3284	28	710	-714	C
60	ATOM	4539	CB	ILE	E	399	40.619	-29.774	-14.904	1.00	22.08		C
	ANISOU	4539	CB	ILE	E	399	3039	1784	3565	141	723	-855	C
	ATOM	4540	CG1	ILE	E	399	42.093	-29.371	-14.774	1.00	21.85		C
	ANISOU	4540	CG1	ILE	E	399	2876	1872	3554	198	754	-907	C
	ATOM	4541	CD1	ILE	E	399	43.088	-30.515	-14.781	1.00	23.92		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4541	CD1	ILE	E	399	3050	2078	3961	353	742	-1039	C
	ATOM	4542	CG2	ILE	E	399	40.306	-30.345	-16.312	1.00	21.12		C
	ANISOU	4542	CG2	ILE	E	399	2936	1684	3405	110	780	-1011	C
	ATOM	4543	C	ILE	E	399	38.254	-28.856	-14.984	1.00	21.30		C
5	ANISOU	4543	C	ILE	E	399	3087	1671	3335	-37	690	-699	C
	ATOM	4544	O	ILE	E	399	37.753	-28.319	-15.969	1.00	21.55		O
	ANISOU	4544	O	ILE	E	399	3137	1788	3263	-112	713	-722	O
	ATOM	4545	N	VAL	E	400	37.593	-29.728	-14.229	1.00	21.79		N
10	ANISOU	4545	N	VAL	E	400	3203	1590	3488	-18	641	-655	N
	ATOM	4546	CA	VAL	E	400	36.210	-30.104	-14.507	1.00	21.47		C
	ANISOU	4546	CA	VAL	E	400	3221	1492	3445	-94	623	-654	C
	ATOM	4547	CB	VAL	E	400	35.728	-31.255	-13.542	1.00	21.73		C
	ANISOU	4547	CB	VAL	E	400	3313	1344	3600	-85	586	-598	C
	ATOM	4548	CG1	VAL	E	400	34.263	-31.478	-13.660	1.00	19.99		C
15	ANISOU	4548	CG1	VAL	E	400	3126	1090	3380	-194	578	-590	C
	ATOM	4549	CG2	VAL	E	400	36.493	-32.517	-13.815	1.00	21.84		C
	ANISOU	4549	CG2	VAL	E	400	3339	1224	3736	3	579	-696	C
	ATOM	4550	C	VAL	E	400	35.249	-28.902	-14.461	1.00	20.50		C
20	ANISOU	4550	C	VAL	E	400	3099	1460	3229	-173	613	-571	C
	ATOM	4551	O	VAL	E	400	34.363	-28.774	-15.302	1.00	20.28		O
	ANISOU	4551	O	VAL	E	400	3080	1476	3150	-232	600	-610	O
	ATOM	4552	N	ALA	E	401	35.406	-28.048	-13.458	1.00	19.91		N
	ANISOU	4552	N	ALA	E	401	3010	1412	3141	-166	607	-470	N
	ATOM	4553	CA	ALA	E	401	34.606	-26.819	-13.352	1.00	19.36		C
25	ANISOU	4553	CA	ALA	E	401	2933	1408	3014	-214	597	-410	C
	ATOM	4554	CB	ALA	E	401	34.872	-26.101	-12.008	1.00	17.52		C
	ANISOU	4554	CB	ALA	E	401	2687	1183	2788	-199	596	-333	C
	ATOM	4555	C	ALA	E	401	34.832	-25.862	-14.533	1.00	19.87		C
30	ANISOU	4555	C	ALA	E	401	2992	1566	2990	-237	605	-427	C
	ATOM	4556	O	ALA	E	401	33.877	-25.259	-15.044	1.00	19.29		O
	ANISOU	4556	O	ALA	E	401	2928	1525	2877	-270	570	-403	O
	ATOM	4557	N	MSE	E	402	36.089	-25.714	-14.954	1.00	20.42		N
	ANISOU	4557	N	MSE	E	402	3042	1687	3029	-222	647	-461	N
	ATOM	4558	CA	MSE	E	402	36.416	-24.804	-16.059	1.00	21.29		C
35	ANISOU	4558	CA	MSE	E	402	3161	1895	3034	-271	672	-454	C
	ATOM	4559	CB	MSE	E	402	37.926	-24.599	-16.154	1.00	21.70		C
	ANISOU	4559	CB	MSE	E	402	3161	2012	3074	-271	741	-491	C
	ATOM	4560	CG	MSE	E	402	38.500	-23.683	-15.106	1.00	22.22		C
40	ANISOU	4560	CG	MSE	E	402	3194	2063	3185	-274	741	-428	C
	ATOM	4561	SE	MSE	E	402	40.412	-23.696	-15.293	0.90	27.13		SE
	ANISOU	4561	SE	MSE	E	402	3703	2793	3811	-278	825	-514	SE
	ATOM	4562	CE	MSE	E	402	40.877	-22.320	-13.992	1.00	24.57		C
	ANISOU	4562	CE	MSE	E	402	3347	2452	3536	-321	801	-441	C
	ATOM	4563	C	MSE	E	402	35.859	-25.299	-17.400	1.00	20.61		C
45	ANISOU	4563	C	MSE	E	402	3105	1865	2859	-305	663	-518	C
	ATOM	4564	O	MSE	E	402	35.362	-24.495	-18.187	1.00	19.44		O
	ANISOU	4564	O	MSE	E	402	2995	1781	2610	-352	634	-461	O
	ATOM	4565	N	VAL	E	403	35.951	-26.621	-17.650	1.00	20.69		N
50	ANISOU	4565	N	VAL	E	403	3106	1848	2909	-277	678	-639	N
	ATOM	4566	CA	VAL	E	403	35.357	-27.238	-18.838	1.00	21.22		C
	ANISOU	4566	CA	VAL	E	403	3197	1968	2897	-315	663	-740	C
	ATOM	4567	CB	VAL	E	403	35.749	-28.745	-19.039	1.00	22.85		C
	ANISOU	4567	CB	VAL	E	403	3389	2108	3184	-275	696	-911	C
	ATOM	4568	CG1	VAL	E	403	34.962	-29.365	-20.219	1.00	22.24		C
55	ANISOU	4568	CG1	VAL	E	403	3339	2087	3026	-332	670	-1042	C
	ATOM	4569	CG2	VAL	E	403	37.257	-28.917	-19.283	1.00	22.02		C
	ANISOU	4569	CG2	VAL	E	403	3230	2058	3078	-225	785	-1003	C
	ATOM	4570	C	VAL	E	403	33.831	-27.076	-18.810	1.00	21.70		C
	ANISOU	4570	C	VAL	E	403	3278	2007	2959	-349	573	-688	C
60	ATOM	4571	O	VAL	E	403	33.223	-26.611	-19.775	1.00	22.35		O
	ANISOU	4571	O	VAL	E	403	3382	2190	2919	-393	524	-677	O
	ATOM	4572	N	PHE	E	404	33.229	-27.437	-17.677	1.00	21.32		N
	ANISOU	4572	N	PHE	E	404	3216	1843	3042	-331	550	-651	N
	ATOM	4573	CA	PHE	E	404	31.791	-27.400	-17.481	1.00	21.21		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4573	CA	PHE	E	404	3184	1815	3059	-366	483	-626	C
	ATOM	4574	CB	PHE	E	404	31.482	-27.898	-16.078	1.00	20.30		C
	ANISOU	4574	CB	PHE	E	404	3054	1582	3076	-361	502	-585	C
	ATOM	4575	CG	PHE	E	404	30.035	-27.900	-15.746	1.00	19.75		C
5	ANISOU	4575	CG	PHE	E	404	2939	1514	3051	-412	461	-575	C
	ATOM	4576	CD1	PHE	E	404	29.247	-29.023	-16.055	1.00	19.38		C
	ANISOU	4576	CD1	PHE	E	404	2879	1427	3057	-483	446	-667	C
	ATOM	4577	CE1	PHE	E	404	27.907	-29.040	-15.754	1.00	19.00		C
10	ANISOU	4577	CE1	PHE	E	404	2759	1402	3058	-547	417	-672	C
	ATOM	4578	CZ	PHE	E	404	27.319	-27.946	-15.109	1.00	19.40		C
	ANISOU	4578	CZ	PHE	E	404	2745	1515	3110	-518	407	-596	C
	ATOM	4579	CE2	PHE	E	404	28.097	-26.822	-14.789	1.00	17.30		C
	ANISOU	4579	CE2	PHE	E	404	2507	1267	2799	-435	418	-512	C
	ATOM	4580	CD2	PHE	E	404	29.458	-26.815	-15.107	1.00	15.18		C
15	ANISOU	4580	CD2	PHE	E	404	2315	974	2477	-394	445	-496	C
	ATOM	4581	C	PHE	E	404	31.176	-26.003	-17.703	1.00	21.45		C
	ANISOU	4581	C	PHE	E	404	3204	1924	3023	-364	423	-525	C
	ATOM	4582	O	PHE	E	404	30.026	-25.880	-18.163	1.00	22.44		O
	ANISOU	4582	O	PHE	E	404	3300	2097	3129	-384	344	-535	O
20	ATOM	4583	N	SER	E	405	31.953	-24.969	-17.400	1.00	21.06		N
	ANISOU	4583	N	SER	E	405	3173	1878	2951	-336	451	-437	N
	ATOM	4584	CA	SER	E	405	31.531	-23.571	-17.521	1.00	21.22		C
	ANISOU	4584	CA	SER	E	405	3201	1919	2941	-322	396	-331	C
	ATOM	4585	CB	SER	E	405	32.564	-22.651	-16.867	1.00	20.19		C
25	ANISOU	4585	CB	SER	E	405	3090	1748	2835	-309	450	-261	C
	ATOM	4586	OG	SER	E	405	33.724	-22.537	-17.685	1.00	22.95		O
	ANISOU	4586	OG	SER	E	405	3477	2159	3084	-349	505	-260	O
	ATOM	4587	C	SER	E	405	31.306	-23.154	-18.975	1.00	22.42		C
	ANISOU	4587	C	SER	E	405	3398	2173	2949	-348	331	-301	C
30	ATOM	4588	O	SER	E	405	30.560	-22.202	-19.254	1.00	23.42		O
	ANISOU	4588	O	SER	E	405	3532	2307	3060	-324	239	-211	O
	ATOM	4589	N	GLN	E	406	31.952	-23.865	-19.900	1.00	23.01		N
	ANISOU	4589	N	GLN	E	406	3502	2329	2912	-392	374	-379	N
	ATOM	4590	CA	GLN	E	406	31.820	-23.613	-21.329	1.00	23.93		C
35	ANISOU	4590	CA	GLN	E	406	3671	2581	2840	-437	323	-363	C
	ATOM	4591	CB	GLN	E	406	30.363	-23.731	-21.769	1.00	23.93		C
	ANISOU	4591	CB	GLN	E	406	3642	2627	2824	-428	184	-375	C
	ATOM	4592	CG	GLN	E	406	29.800	-25.108	-21.530	1.00	25.61		C
	ANISOU	4592	CG	GLN	E	406	3790	2817	3125	-445	190	-542	C
40	ATOM	4593	CD	GLN	E	406	28.374	-25.265	-22.015	1.00	26.20		C
	ANISOU	4593	CD	GLN	E	406	3807	2964	3185	-456	52	-581	C
	ATOM	4594	OE1	GLN	E	406	27.534	-24.417	-21.751	1.00	27.21		O
	ANISOU	4594	OE1	GLN	E	406	3891	3085	3361	-406	-42	-484	O
	ATOM	4595	NE2	GLN	E	406	28.100	-26.358	-22.741	1.00	26.20		N
45	ANISOU	4595	NE2	GLN	E	406	3793	3035	3128	-519	35	-744	N
	ATOM	4596	C	GLN	E	406	32.420	-22.265	-21.765	1.00	24.66		C
	ANISOU	4596	C	GLN	E	406	3837	2702	2830	-463	327	-203	C
	ATOM	4597	O	GLN	E	406	32.100	-21.780	-22.848	1.00	26.26		O
	ANISOU	4597	O	GLN	E	406	4104	3005	2869	-497	254	-125	O
50	ATOM	4598	N	GLU	E	407	33.294	-21.675	-20.941	1.00	23.80		N
	ANISOU	4598	N	GLU	E	407	3726	2506	2810	-459	407	-149	N
	ATOM	4599	CA	GLU	E	407	33.961	-20.391	-21.287	1.00	25.17		C
	ANISOU	4599	CA	GLU	E	407	3974	2678	2913	-513	429	1	C
	ATOM	4600	CB	GLU	E	407	34.926	-19.945	-20.188	1.00	24.30		C
55	ANISOU	4600	CB	GLU	E	407	3829	2469	2934	-515	519	5	C
	ATOM	4601	CG	GLU	E	407	34.281	-19.528	-18.878	1.00	24.55		C
	ANISOU	4601	CG	GLU	E	407	3821	2356	3150	-436	467	19	C
	ATOM	4602	CD	GLU	E	407	34.947	-18.299	-18.237	1.00	25.54		C
	ANISOU	4602	CD	GLU	E	407	3969	2380	3355	-464	499	96	C
60	ATOM	4603	OE1	GLU	E	407	35.873	-17.724	-18.827	1.00	30.35		O
	ANISOU	4603	OE1	GLU	E	407	4626	3019	3887	-559	558	160	O
	ATOM	4604	OE2	GLU	E	407	34.530	-17.876	-17.153	1.00	23.13		O
	ANISOU	4604	OE2	GLU	E	407	3631	1969	3188	-407	470	83	O
	ATOM	4605	C	GLU	E	407	34.732	-20.428	-22.598	1.00	27.34		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4637	CB	ILE	E	411	5019	4490	3001	-847	769	-462	C
	ATOM	4638	CG1	ILE	E	411	35.373	-24.172	-25.895	1.00	33.37		C
	ANISOU	4638	CG1	ILE	E	411	5025	4439	3216	-745	664	-594	C
	ATOM	4639	CD1	ILE	E	411	33.977	-23.673	-25.783	1.00	34.15		C
5	ANISOU	4639	CD1	ILE	E	411	5163	4473	3339	-708	481	-458	C
	ATOM	4640	CG2	ILE	E	411	36.431	-23.283	-27.907	1.00	35.77		C
	ANISOU	4640	CG2	ILE	E	411	5446	5105	3040	-954	792	-507	C
	ATOM	4641	C	ILE	E	411	38.973	-22.985	-26.599	1.00	34.59		C
	ANISOU	4641	C	ILE	E	411	5130	4868	3144	-972	1100	-571	C
10	ATOM	4642	O	ILE	E	411	39.547	-23.735	-27.392	1.00	36.40		O
	ANISOU	4642	O	ILE	E	411	5312	5278	3240	-1009	1214	-766	O
	ATOM	4643	N	LYS	E	412	39.383	-21.744	-26.380	1.00	34.85		N
	ANISOU	4643	N	LYS	E	412	5209	4862	3172	-1052	1123	-363	N
	ATOM	4644	CA	LYS	E	412	40.525	-21.193	-27.085	1.00	36.94		C
15	ANISOU	4644	CA	LYS	E	412	5471	5303	3261	-1213	1291	-333	C
	ATOM	4645	CB	LYS	E	412	40.472	-19.660	-27.055	1.00	37.70		C
	ANISOU	4645	CB	LYS	E	412	5690	5312	3323	-1323	1253	-33	C
	ATOM	4646	CG	LYS	E	412	39.344	-19.044	-27.912	1.00	38.14		C
	ANISOU	4646	CG	LYS	E	412	5929	5383	3179	-1358	1097	184	C
20	ATOM	4647	CD	LYS	E	412	39.476	-19.441	-29.388	1.00	42.37		C
	ANISOU	4647	CD	LYS	E	412	6522	6218	3360	-1478	1167	132	C
	ATOM	4648	CE	LYS	E	412	38.440	-18.757	-30.263	1.00	43.95		C
	ANISOU	4648	CE	LYS	E	412	6909	6454	3335	-1517	992	376	C
	ATOM	4649	NZ	LYS	E	412	37.050	-19.198	-29.938	1.00	43.30		N
25	ANISOU	4649	NZ	LYS	E	412	6823	6258	3371	-1341	770	345	N
	ATOM	4650	C	LYS	E	412	41.870	-21.724	-26.575	1.00	37.07		C
	ANISOU	4650	C	LYS	E	412	5308	5363	3414	-1197	1460	-534	C
	ATOM	4651	O	LYS	E	412	42.886	-21.588	-27.252	1.00	39.36		O
	ANISOU	4651	O	LYS	E	412	5545	5853	3557	-1327	1633	-594	O
30	ATOM	4652	N	ALA	E	413	41.872	-22.336	-25.390	1.00	35.02		N
	ANISOU	4652	N	ALA	E	413	4949	4932	3426	-1041	1408	-635	N
	ATOM	4653	CA	ALA	E	413	43.087	-22.942	-24.833	1.00	34.68		C
	ANISOU	4653	CA	ALA	E	413	4723	4918	3536	-985	1526	-827	C
	ATOM	4654	CB	ALA	E	413	43.016	-22.990	-23.309	1.00	31.70		C
35	ANISOU	4654	CB	ALA	E	413	4291	4318	3437	-852	1426	-795	C
	ATOM	4655	C	ALA	E	413	43.387	-24.329	-25.422	1.00	35.53		C
	ANISOU	4655	C	ALA	E	413	4738	5144	3617	-907	1600	-1111	C
	ATOM	4656	O	ALA	E	413	44.438	-24.908	-25.156	1.00	36.10		O
	ANISOU	4656	O	ALA	E	413	4646	5265	3807	-844	1701	-1297	O
40	ATOM	4657	N	VAL	E	414	42.471	-24.854	-26.229	1.00	36.17		N
	ANISOU	4657	N	VAL	E	414	4917	5270	3556	-905	1543	-1161	N
	ATOM	4658	CA	VAL	E	414	42.703	-26.137	-26.896	1.00	37.60		C
	ANISOU	4658	CA	VAL	E	414	5026	5559	3703	-846	1616	-1457	C
	ATOM	4659	CB	VAL	E	414	41.425	-26.689	-27.557	1.00	37.84		C
45	ANISOU	4659	CB	VAL	E	414	5176	5586	3615	-840	1499	-1498	C
	ATOM	4660	CG1	VAL	E	414	41.758	-27.878	-28.499	1.00	39.24		C
	ANISOU	4660	CG1	VAL	E	414	5290	5919	3703	-822	1602	-1834	C
	ATOM	4661	CG2	VAL	E	414	40.407	-27.088	-26.498	1.00	33.57		C
	ANISOU	4661	CG2	VAL	E	414	4671	4769	3316	-713	1324	-1430	C
50	ATOM	4662	C	VAL	E	414	43.829	-26.037	-27.933	1.00	41.28		C
	ANISOU	4662	C	VAL	E	414	5406	6318	3960	-969	1828	-1600	C
	ATOM	4663	O	VAL	E	414	43.854	-25.126	-28.772	1.00	41.91		O
	ANISOU	4663	O	VAL	E	414	5575	6580	3769	-1151	1889	-1455	O
	ATOM	4664	N	ARG	E	415	44.752	-26.995	-27.862	1.00	43.28		N
55	ANISOU	4664	N	ARG	E	415	5485	6615	4345	-866	1940	-1885	N
	ATOM	4665	CA	ARG	E	415	45.838	-27.092	-28.822	1.00	47.04		C
	ANISOU	4665	CA	ARG	E	415	5837	7389	4648	-962	2163	-2091	C
	ATOM	4666	CB	ARG	E	415	47.205	-27.002	-28.123	1.00	47.50		C
	ANISOU	4666	CB	ARG	E	415	5672	7467	4909	-912	2278	-2175	C
60	ATOM	4667	CG	ARG	E	415	47.450	-25.686	-27.389	1.00	46.34		C
	ANISOU	4667	CG	ARG	E	415	5545	7256	4804	-1020	2250	-1881	C
	ATOM	4668	CD	ARG	E	415	47.536	-24.502	-28.344	1.00	49.52		C
	ANISOU	4668	CD	ARG	E	415	6053	7875	4887	-1292	2366	-1695	C
	ATOM	4669	NE	ARG	E	415	47.747	-23.254	-27.607	1.00	48.95		N



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4669	NE	ARG	E	415	6011	7694	4895	-1396	2332	-1427	N
	ATOM	4670	CZ	ARG	E	415	46.795	-22.365	-27.330	1.00	46.89		C
	ANISOU	4670	CZ	ARG	E	415	5952	7256	4608	-1446	2181	-1130	C
	ATOM	4671	NH1	ARG	E	415	45.553	-22.573	-27.751	1.00	46.50		N
5	ANISOU	4671	NH1	ARG	E	415	6082	7142	4444	-1404	2044	-1050	N
	ATOM	4672	NH2	ARG	E	415	47.094	-21.257	-26.644	1.00	44.45		N
	ANISOU	4672	NH2	ARG	E	415	5654	6838	4397	-1538	2164	-932	N
	ATOM	4673	C	ARG	E	415	45.722	-28.376	-29.633	1.00	49.40		C
	ANISOU	4673	C	ARG	E	415	6100	7778	4892	-885	2213	-2430	C
10	ATOM	4674	O	ARG	E	415	45.571	-29.466	-29.075	1.00	49.22		O
	ANISOU	4674	O	ARG	E	415	6023	7550	5130	-691	2135	-2605	O
	ATOM	4675	N	GLY	E	416	45.791	-28.237	-30.952	1.00	52.08		N
	ANISOU	4675	N	GLY	E	416	6480	8422	4887	-1048	2344	-2521	N
	ATOM	4676	CA	GLY	E	416	45.624	-29.371	-31.844	1.00	54.89		C
15	ANISOU	4676	CA	GLY	E	416	6816	8897	5143	-1004	2397	-2865	C
	ATOM	4677	C	GLY	E	416	44.169	-29.796	-31.969	1.00	53.94		C
	ANISOU	4677	C	GLY	E	416	6874	8627	4993	-972	2190	-2820	C
	ATOM	4678	O	GLY	E	416	43.287	-29.229	-31.316	1.00	51.70		O
	ANISOU	4678	O	GLY	E	416	6715	8147	4783	-967	2007	-2522	O
20	ATOM	4679	N	ASP	E	417	43.932	-30.798	-32.812	1.00	56.14		N
	ANISOU	4679	N	ASP	E	417	7149	9009	5171	-954	2224	-3142	N
	ATOM	4680	CA	ASP	E	417	42.594	-31.308	-33.083	1.00	55.99		C
	ANISOU	4680	CA	ASP	E	417	7273	8893	5107	-947	2041	-3164	C
	ATOM	4681	CB	ASP	E	417	42.535	-31.971	-34.471	1.00	59.31		C
25	ANISOU	4681	CB	ASP	E	417	7703	9606	5227	-1034	2138	-3503	C
	ATOM	4682	CG	ASP	E	417	42.443	-30.958	-35.618	1.00	61.53		C
	ANISOU	4682	CG	ASP	E	417	8097	10274	5009	-1270	2196	-3338	C
	ATOM	4683	OD1	ASP	E	417	42.191	-29.761	-35.352	1.00	58.40		O
	ANISOU	4683	OD1	ASP	E	417	7803	9867	4522	-1359	2119	-2936	O
30	ATOM	4684	OD2	ASP	E	417	42.607	-31.366	-36.801	1.00	64.87		O
	ANISOU	4684	OD2	ASP	E	417	8516	11011	5120	-1369	2315	-3613	O
	ATOM	4685	C	ASP	E	417	42.153	-32.295	-32.013	1.00	54.22		C
	ANISOU	4685	C	ASP	E	417	7020	8277	5303	-748	1903	-3244	C
	ATOM	4686	O	ASP	E	417	42.985	-32.986	-31.415	1.00	54.68		O
35	ANISOU	4686	O	ASP	E	417	6940	8187	5651	-592	1974	-3422	O
	ATOM	4687	N	LEU	E	418	40.845	-32.359	-31.782	1.00	52.57		N
	ANISOU	4687	N	LEU	E	418	6940	7908	5127	-756	1703	-3107	N
	ATOM	4688	CA	LEU	E	418	40.294	-33.303	-30.826	1.00	51.40		C
	ANISOU	4688	CA	LEU	E	418	6787	7397	5344	-610	1576	-3164	C
40	ATOM	4689	CB	LEU	E	418	39.353	-32.585	-29.850	1.00	48.14		C
	ANISOU	4689	CB	LEU	E	418	6464	6792	5037	-613	1398	-2795	C
	ATOM	4690	CG	LEU	E	418	39.926	-31.400	-29.056	1.00	45.99		C
	ANISOU	4690	CG	LEU	E	418	6170	6504	4798	-611	1421	-2486	C
	ATOM	4691	CD1	LEU	E	418	38.849	-30.744	-28.220	1.00	44.92		C
45	ANISOU	4691	CD1	LEU	E	418	6125	6198	4746	-616	1247	-2179	C
	ATOM	4692	CD2	LEU	E	418	41.082	-31.819	-28.178	1.00	46.73		C
	ANISOU	4692	CD2	LEU	E	418	6131	6455	5169	-468	1509	-2568	C
	ATOM	4693	C	LEU	E	418	39.612	-34.486	-31.533	1.00	53.69		C
	ANISOU	4693	C	LEU	E	418	7109	7665	5627	-615	1533	-3488	C
50	ATOM	4694	O	LEU	E	418	38.647	-34.299	-32.289	1.00	54.45		O
	ANISOU	4694	O	LEU	E	418	7301	7912	5477	-742	1440	-3471	O
	ATOM	4695	N	ASN	E	419	40.129	-35.693	-31.277	1.00	55.13		N
	ANISOU	4695	N	ASN	E	419	7208	7649	6090	-474	1588	-3786	N
	ATOM	4696	CA	ASN	E	419	39.644	-36.931	-31.904	1.00	57.91		C
55	ANISOU	4696	CA	ASN	E	419	7578	7933	6493	-469	1567	-4150	C
	ATOM	4697	CB	ASN	E	419	40.546	-37.300	-33.088	1.00	61.18		C
	ANISOU	4697	CB	ASN	E	419	7904	8639	6703	-488	1763	-4536	C
	ATOM	4698	CG	ASN	E	419	40.444	-36.311	-34.223	1.00	62.11		C
	ANISOU	4698	CG	ASN	E	419	8073	9206	6320	-687	1822	-4458	C
60	ATOM	4699	OD1	ASN	E	419	39.366	-36.093	-34.773	1.00	61.35		O
	ANISOU	4699	OD1	ASN	E	419	8092	9224	5995	-820	1694	-4388	O
	ATOM	4700	ND2	ASN	E	419	41.572	-35.692	-34.576	1.00	64.20		N
	ANISOU	4700	ND2	ASN	E	419	8248	9736	6409	-717	2012	-4458	N
	ATOM	4701	C	ASN	E	419	39.519	-38.140	-30.958	1.00	58.48		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4701	C	ASN	E	419	7640	7561	7019	-310	1493	-4262	C
	ATOM	4702	O	ASN	E	419	39.706	-39.289	-31.387	1.00	60.83		O
	ANISOU	4702	O	ASN	E	419	7906	7757	7451	-247	1539	-4636	O
	ATOM	4703	N	PHE	E	420	39.191	-37.883	-29.687	1.00	56.70		N
5	ANISOU	4703	N	PHE	E	420	7451	7072	7023	-252	1380	-3940	N
	ATOM	4704	CA	PHE	E	420	39.084	-38.931	-28.651	1.00	57.43		C
	ANISOU	4704	CA	PHE	E	420	7556	6734	7531	-114	1302	-3962	C
	ATOM	4705	CB	PHE	E	420	38.919	-38.322	-27.244	1.00	54.05		C
	ANISOU	4705	CB	PHE	E	420	7156	6122	7256	-69	1207	-3556	C
10	ATOM	4706	CG	PHE	E	420	40.157	-37.660	-26.718	1.00	53.02		C
	ANISOU	4706	CG	PHE	E	420	6924	6072	7150	40	1288	-3429	C
	ATOM	4707	CD1	PHE	E	420	40.232	-36.271	-26.623	1.00	49.71		C
	ANISOU	4707	CD1	PHE	E	420	6500	5880	6506	-48	1302	-3156	C
	ATOM	4708	CE1	PHE	E	420	41.378	-35.643	-26.140	1.00	48.97		C
15	ANISOU	4708	CE1	PHE	E	420	6301	5865	6440	27	1377	-3055	C
	ATOM	4709	CZ	PHE	E	420	42.477	-36.409	-25.744	1.00	51.30		C
	ANISOU	4709	CZ	PHE	E	420	6475	6032	6983	212	1429	-3226	C
	ATOM	4710	CE2	PHE	E	420	42.419	-37.803	-25.839	1.00	54.45		C
	ANISOU	4710	CE2	PHE	E	420	6879	6193	7615	329	1405	-3490	C
20	ATOM	4711	CD2	PHE	E	420	41.259	-38.425	-26.323	1.00	54.30		C
	ANISOU	4711	CD2	PHE	E	420	6985	6074	7573	234	1341	-3591	C
	ATOM	4712	C	PHE	E	420	37.958	-39.927	-28.902	1.00	59.71		C
	ANISOU	4712	C	PHE	E	420	7933	6829	7924	-188	1203	-4135	C
	ATOM	4713	O	PHE	E	420	36.885	-39.562	-29.385	1.00	59.38		O
25	ANISOU	4713	O	PHE	E	420	7955	6933	7674	-352	1122	-4078	O
	ATOM	4714	N	VAL	E	421	38.221	-41.179	-28.526	1.00	62.76		N
	ANISOU	4714	N	VAL	E	421	8318	6873	8656	-62	1198	-4339	N
	ATOM	4715	CA	VAL	E	421	37.341	-42.318	-28.779	1.00	66.10		C
	ANISOU	4715	CA	VAL	E	421	8817	7058	9241	-128	1126	-4568	C
30	ATOM	4716	CB	VAL	E	421	37.809	-43.068	-30.056	1.00	69.65		C
	ANISOU	4716	CB	VAL	E	421	9215	7633	9617	-116	1235	-5067	C
	ATOM	4717	CG1	VAL	E	421	37.690	-44.582	-29.918	1.00	73.52		C
	ANISOU	4717	CG1	VAL	E	421	9747	7695	10491	-41	1203	-5363	C
	ATOM	4718	CG2	VAL	E	421	37.063	-42.546	-31.282	1.00	70.73		C
35	ANISOU	4718	CG2	VAL	E	421	9372	8169	9332	-327	1231	-5178	C
	ATOM	4719	C	VAL	E	421	37.312	-43.237	-27.547	1.00	66.76		C
	ANISOU	4719	C	VAL	E	421	8958	6647	9763	-10	1048	-4463	C
	ATOM	4720	O	VAL	E	421	38.339	-43.406	-26.881	1.00	67.09		O
	ANISOU	4720	O	VAL	E	421	8949	6536	10006	185	1081	-4409	O
40	ATOM	4721	N	ASN	E	422	36.145	-43.820	-27.243	1.00	67.53		N
	ANISOU	4721	N	ASN	E	422	9155	6503	9999	-136	942	-4424	N
	ATOM	4722	CA	ASN	E	422	35.987	-44.671	-26.041	1.00	68.08		C
	ANISOU	4722	CA	ASN	E	422	9309	6098	10459	-68	865	-4271	C
	ATOM	4723	CB	ASN	E	422	34.522	-44.727	-25.572	1.00	67.27		C
45	ANISOU	4723	CB	ASN	E	422	9296	5877	10386	-278	760	-4080	C
	ATOM	4724	CG	ASN	E	422	33.535	-44.977	-26.713	1.00	69.70		C
	ANISOU	4724	CG	ASN	E	422	9604	6341	10538	-481	739	-4363	C
	ATOM	4725	OD1	ASN	E	422	32.448	-44.388	-26.738	1.00	68.72		O
	ANISOU	4725	OD1	ASN	E	422	9477	6388	10245	-657	670	-4214	O
50	ATOM	4726	ND2	ASN	E	422	33.905	-45.848	-27.657	1.00	72.67		N
	ANISOU	4726	ND2	ASN	E	422	9970	6669	10973	-451	789	-4791	N
	ATOM	4727	C	ASN	E	422	36.580	-46.085	-26.139	1.00	71.50		C
	ANISOU	4727	C	ASN	E	422	9766	6157	11244	78	884	-4587	C
	ATOM	4728	O	ASN	E	422	36.751	-46.632	-27.227	1.00	74.15		O
55	ANISOU	4728	O	ASN	E	422	10065	6559	11547	73	946	-5000	O
	ATOM	4729	N	ARG	E	427	33.161	-42.328	-30.481	1.00	65.32		N
	ANISOU	4729	N	ARG	E	427	8875	7278	8664	-761	800	-4699	N
	ATOM	4730	CA	ARG	E	427	33.763	-40.998	-30.490	1.00	62.98		C
	ANISOU	4730	CA	ARG	E	427	8546	7283	8101	-712	849	-4431	C
60	ATOM	4731	CB	ARG	E	427	33.673	-40.369	-31.883	1.00	65.03		C
	ANISOU	4731	CB	ARG	E	427	8792	8005	7911	-823	864	-4564	C
	ATOM	4732	CG	ARG	E	427	34.458	-39.089	-31.984	1.00	64.47		C
	ANISOU	4732	CG	ARG	E	427	8699	8216	7579	-784	943	-4317	C
	ATOM	4733	CD	ARG	E	427	33.754	-38.015	-32.796	1.00	67.22		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4733	CD	ARG	E	427	9082	8944	7515	-926	854	-4158	C
	ATOM	4734	NE	ARG	E	427	34.445	-36.739	-32.601	1.00	67.49		N
	ANISOU	4734	NE	ARG	E	427	9116	9147	7382	-892	917	-3843	N
	ATOM	4735	CZ	ARG	E	427	35.598	-36.405	-33.186	1.00	69.71		C
5	ANISOU	4735	CZ	ARG	E	427	9366	9652	7467	-875	1082	-3922	C
	ATOM	4736	NH1	ARG	E	427	36.196	-37.243	-34.034	1.00	71.76		N
	ANISOU	4736	NH1	ARG	E	427	9587	10022	7658	-875	1208	-4324	N
	ATOM	4737	NH2	ARG	E	427	36.152	-35.226	-32.920	1.00	67.88		N
10	ANISOU	4737	NH2	ARG	E	427	9137	9538	7117	-868	1131	-3614	N
	ATOM	4738	C	ARG	E	427	33.075	-40.091	-29.485	1.00	58.80		C
	ANISOU	4738	C	ARG	E	427	8035	6711	7596	-740	749	-3994	C
	ATOM	4739	O	ARG	E	427	31.865	-39.867	-29.575	1.00	58.91		O
	ANISOU	4739	O	ARG	E	427	8061	6791	7533	-873	626	-3912	O
15	ATOM	4740	N	LEU	E	428	33.848	-39.555	-28.545	1.00	55.36		N
	ANISOU	4740	N	LEU	E	428	7586	6185	7263	-612	800	-3735	N
	ATOM	4741	CA	LEU	E	428	33.293	-38.797	-27.419	1.00	50.88		C
	ANISOU	4741	CA	LEU	E	428	7034	5531	6765	-619	721	-3349	C
	ATOM	4742	CB	LEU	E	428	34.399	-38.397	-26.432	1.00	48.72		C
20	ANISOU	4742	CB	LEU	E	428	6740	5151	6618	-464	792	-3144	C
	ATOM	4743	CG	LEU	E	428	35.420	-39.432	-25.919	1.00	49.33		C
	ANISOU	4743	CG	LEU	E	428	6806	4945	6991	-304	858	-3284	C
	ATOM	4744	CD1	LEU	E	428	36.268	-38.834	-24.795	1.00	44.63		C
	ANISOU	4744	CD1	LEU	E	428	6182	4285	6491	-173	879	-3013	C
	ATOM	4745	CD2	LEU	E	428	34.776	-40.760	-25.451	1.00	49.60		C
25	ANISOU	4745	CD2	LEU	E	428	6906	4603	7335	-323	795	-3387	C
	ATOM	4746	C	LEU	E	428	32.532	-37.565	-27.894	1.00	49.08		C
	ANISOU	4746	C	LEU	E	428	6802	5617	6229	-725	643	-3163	C
	ATOM	4747	O	LEU	E	428	32.874	-36.983	-28.932	1.00	49.55		O
30	ANISOU	4747	O	LEU	E	428	6855	5985	5989	-757	677	-3230	O
	ATOM	4748	N	ASN	E	429	31.494	-37.179	-27.148	1.00	46.94		N
	ANISOU	4748	N	ASN	E	429	6534	5270	6032	-780	538	-2933	N
	ATOM	4749	CA	ASN	E	429	30.814	-35.909	-27.424	1.00	45.15		C
	ANISOU	4749	CA	ASN	E	429	6294	5299	5563	-837	448	-2718	C
35	ATOM	4750	CB	ASN	E	429	29.427	-35.795	-26.731	1.00	44.53		C
	ANISOU	4750	CB	ASN	E	429	6183	5130	5604	-909	324	-2571	C
	ATOM	4751	CG	ASN	E	429	29.505	-35.650	-25.216	1.00	43.04		C
	ANISOU	4751	CG	ASN	E	429	5995	4702	5656	-844	356	-2335	C
	ATOM	4752	OD1	ASN	E	429	30.552	-35.375	-24.647	1.00	44.36		O
	ANISOU	4752	OD1	ASN	E	429	6185	4799	5871	-736	441	-2227	O
40	ATOM	4753	ND2	ASN	E	429	28.369	-35.826	-24.559	1.00	44.32		N
	ANISOU	4753	ND2	ASN	E	429	6122	4763	5956	-921	286	-2262	N
	ATOM	4754	C	ASN	E	429	31.770	-34.724	-27.176	1.00	42.35		C
	ANISOU	4754	C	ASN	E	429	5946	5058	5088	-750	517	-2486	C
	ATOM	4755	O	ASN	E	429	32.811	-34.903	-26.528	1.00	41.08		O
45	ANISOU	4755	O	ASN	E	429	5779	4756	5072	-648	619	-2464	O
	ATOM	4756	N	PRO	E	430	31.476	-33.549	-27.774	1.00	41.73		N
	ANISOU	4756	N	PRO	E	430	5879	5236	4742	-793	458	-2330	N
	ATOM	4757	CA	PRO	E	430	32.316	-32.355	-27.629	1.00	39.46		C
	ANISOU	4757	CA	PRO	E	430	5608	5050	4333	-744	520	-2107	C
50	ATOM	4758	CB	PRO	E	430	31.423	-31.252	-28.194	1.00	40.25		C
	ANISOU	4758	CB	PRO	E	430	5736	5353	4205	-805	385	-1924	C
	ATOM	4759	CG	PRO	E	430	30.653	-31.948	-29.274	1.00	42.76		C
	ANISOU	4759	CG	PRO	E	430	6052	5820	4376	-896	299	-2151	C
55	ATOM	4760	CD	PRO	E	430	30.346	-33.303	-28.705	1.00	43.03		C
	ANISOU	4760	CD	PRO	E	430	6044	5611	4695	-894	315	-2363	C
	ATOM	4761	C	PRO	E	430	32.774	-32.033	-26.201	1.00	36.38		C
	ANISOU	4761	C	PRO	E	430	5201	4442	4180	-650	563	-1910	C
	ATOM	4762	O	PRO	E	430	33.960	-31.739	-25.993	1.00	35.32		O
	ANISOU	4762	O	PRO	E	430	5056	4315	4049	-592	673	-1876	O
60	ATOM	4763	N	MSE	E	431	31.873	-32.122	-25.223	1.00	34.13		N
	ANISOU	4763	N	MSE	E	431	4901	3985	4083	-644	482	-1799	N
	ATOM	4764	CA	MSE	E	431	32.236	-31.766	-23.826	1.00	31.35		C
	ANISOU	4764	CA	MSE	E	431	4538	3456	3919	-566	515	-1608	C
	ATOM	4765	CB	MSE	E	431	30.985	-31.620	-22.945	1.00	30.30		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4765	CB	MSE	E	431	4383	3219	3912	-594	423	-1477	C
	ATOM	4766	CG	MSE	E	431	30.087	-30.421	-23.323	1.00	29.63		C
	ANISOU	4766	CG	MSE	E	431	4282	3300	3676	-624	317	-1334	C
	ATOM	4767	SE	MSE	E	431	30.966	-28.722	-22.996	0.90	32.22		SE
5	ANISOU	4767	SE	MSE	E	431	4642	3693	3906	-556	353	-1079	SE
	ATOM	4768	CE	MSE	E	431	31.056	-28.819	-21.067	1.00	26.36		C
	ANISOU	4768	CE	MSE	E	431	3867	2715	3434	-492	401	-968	C
	ATOM	4769	C	MSE	E	431	33.244	-32.741	-23.208	1.00	30.85		C
	ANISOU	4769	C	MSE	E	431	4469	3203	4050	-485	609	-1710	C
10	ATOM	4770	O	MSE	E	431	34.119	-32.348	-22.445	1.00	29.27		O
	ANISOU	4770	O	MSE	E	431	4255	2950	3916	-408	662	-1595	O
	ATOM	4771	N	HIS	E	432	33.128	-34.014	-23.562	1.00	32.32		N
	ANISOU	4771	N	HIS	E	432	4662	3283	4336	-499	617	-1934	N
	ATOM	4772	CA	HIS	E	432	34.063	-35.044	-23.091	1.00	34.03		C
15	ANISOU	4772	CA	HIS	E	432	4877	3292	4760	-399	685	-2050	C
	ATOM	4773	CB	HIS	E	432	33.392	-36.424	-23.076	1.00	36.39		C
	ANISOU	4773	CB	HIS	E	432	5209	3369	5248	-441	649	-2222	C
	ATOM	4774	CG	HIS	E	432	32.433	-36.595	-21.940	1.00	38.68		C
	ANISOU	4774	CG	HIS	E	432	5527	3471	5699	-494	584	-2041	C
20	ATOM	4775	ND1	HIS	E	432	31.189	-35.998	-21.920	1.00	39.39		N
	ANISOU	4775	ND1	HIS	E	432	5597	3668	5702	-607	513	-1936	N
	ATOM	4776	CE1	HIS	E	432	30.584	-36.288	-20.782	1.00	39.89		C
	ANISOU	4776	CE1	HIS	E	432	5675	3550	5932	-643	494	-1795	C
	ATOM	4777	NE2	HIS	E	432	31.391	-37.043	-20.058	1.00	41.36		N
25	ANISOU	4777	NE2	HIS	E	432	5911	3505	6297	-559	536	-1776	N
	ATOM	4778	CD2	HIS	E	432	32.561	-37.241	-20.754	1.00	40.10		C
	ANISOU	4778	CD2	HIS	E	432	5748	3382	6107	-450	584	-1933	C
	ATOM	4779	C	HIS	E	432	35.358	-35.061	-23.901	1.00	35.10		C
	ANISOU	4779	C	HIS	E	432	4973	3565	4797	-332	791	-2220	C
30	ATOM	4780	O	HIS	E	432	36.402	-35.469	-23.410	1.00	35.53		O
	ANISOU	4780	O	HIS	E	432	4993	3505	5002	-212	850	-2259	O
	ATOM	4781	N	GLN	E	433	35.258	-34.625	-25.152	1.00	35.90		N
	ANISOU	4781	N	GLN	E	433	5072	3931	4639	-414	811	-2323	N
	ATOM	4782	CA	GLN	E	433	36.394	-34.264	-25.999	1.00	36.69		C
35	ANISOU	4782	CA	GLN	E	433	5128	4254	4558	-397	931	-2434	C
	ATOM	4783	CB	GLN	E	433	35.808	-33.686	-27.294	1.00	38.40		C
	ANISOU	4783	CB	GLN	E	433	5382	4764	4444	-531	907	-2469	C
	ATOM	4784	CG	GLN	E	433	36.487	-33.958	-28.567	1.00	42.26		C
	ANISOU	4784	CG	GLN	E	433	5849	5489	4720	-569	1019	-2729	C
40	ATOM	4785	CD	GLN	E	433	36.743	-35.422	-28.835	1.00	46.49		C
	ANISOU	4785	CD	GLN	E	433	6351	5891	5423	-510	1069	-3088	C
	ATOM	4786	OE1	GLN	E	433	37.885	-35.864	-28.762	1.00	46.73		O
	ANISOU	4786	OE1	GLN	E	433	6307	5883	5565	-406	1191	-3246	O
	ATOM	4787	NE2	GLN	E	433	35.701	-36.170	-29.196	1.00	49.59		N
45	ANISOU	4787	NE2	GLN	E	433	6786	6216	5839	-577	974	-3240	N
	ATOM	4788	C	GLN	E	433	37.266	-33.209	-25.278	1.00	33.83		C
	ANISOU	4788	C	GLN	E	433	4728	3932	4195	-345	981	-2204	C
	ATOM	4789	O	GLN	E	433	38.456	-33.403	-25.081	1.00	34.24		O
	ANISOU	4789	O	GLN	E	433	4705	3974	4330	-254	1077	-2284	O
50	ATOM	4790	N	LEU	E	434	36.650	-32.110	-24.866	1.00	31.07		N
	ANISOU	4790	N	LEU	E	434	4418	3619	3768	-399	908	-1937	N
	ATOM	4791	CA	LEU	E	434	37.329	-31.034	-24.128	1.00	28.78		C
	ANISOU	4791	CA	LEU	E	434	4102	3346	3486	-372	939	-1719	C
	ATOM	4792	CB	LEU	E	434	36.367	-29.855	-23.924	1.00	26.01		C
55	ANISOU	4792	CB	LEU	E	434	3811	3033	3038	-442	841	-1468	C
	ATOM	4793	CG	LEU	E	434	35.966	-29.145	-25.222	1.00	25.54		C
	ANISOU	4793	CG	LEU	E	434	3805	3209	2689	-551	822	-1442	C
	ATOM	4794	CD1	LEU	E	434	34.729	-28.299	-25.018	1.00	24.35		C
	ANISOU	4794	CD1	LEU	E	434	3706	3042	2504	-583	681	-1235	C
60	ATOM	4795	CD2	LEU	E	434	37.121	-28.319	-25.799	1.00	22.38		C
	ANISOU	4795	CD2	LEU	E	434	3397	2995	2113	-602	943	-1400	C
	ATOM	4796	C	LEU	E	434	37.900	-31.483	-22.783	1.00	27.76		C
	ANISOU	4796	C	LEU	E	434	3927	2997	3622	-250	939	-1675	C
	ATOM	4797	O	LEU	E	434	39.014	-31.136	-22.430	1.00	27.07		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4797	O	LEU	E	434	3771	2946	3569	-196	1008	-1653	O
	ATOM	4798	N	LEU	E	435	37.110	-32.250	-22.042	1.00	27.99		N
	ANISOU	4798	N	LEU	E	435	3994	2811	3829	-220	856	-1657	N
	ATOM	4799	CA	LEU	E	435	37.487	-32.722	-20.719	1.00	27.82		C
5	ANISOU	4799	CA	LEU	E	435	3960	2577	4035	-116	832	-1578	C
	ATOM	4800	CB	LEU	E	435	36.316	-33.464	-20.074	1.00	27.22		C
	ANISOU	4800	CB	LEU	E	435	3951	2294	4097	-145	746	-1530	C
	ATOM	4801	CG	LEU	E	435	36.445	-33.810	-18.591	1.00	28.04		C
10	ANISOU	4801	CG	LEU	E	435	4075	2192	4388	-72	705	-1378	C
	ATOM	4802	CD1	LEU	E	435	36.646	-32.562	-17.667	1.00	24.26		C
	ANISOU	4802	CD1	LEU	E	435	3574	1799	3846	-69	694	-1159	C
	ATOM	4803	CD2	LEU	E	435	35.226	-34.633	-18.191	1.00	25.93		C
	ANISOU	4803	CD2	LEU	E	435	3877	1742	4232	-145	648	-1354	C
	ATOM	4804	C	LEU	E	435	38.771	-33.577	-20.768	1.00	29.75		C
15	ANISOU	4804	C	LEU	E	435	4131	2762	4410	14	896	-1756	C
	ATOM	4805	O	LEU	E	435	39.778	-33.201	-20.144	1.00	28.71		O
	ANISOU	4805	O	LEU	E	435	3929	2650	4330	95	921	-1690	O
	ATOM	4806	N	ARG	E	436	38.741	-34.676	-21.534	1.00	32.34		N
20	ANISOU	4806	N	ARG	E	436	4465	3030	4795	35	920	-1999	N
	ATOM	4807	CA	ARG	E	436	39.909	-35.546	-21.722	1.00	35.45		C
	ANISOU	4807	CA	ARG	E	436	4775	3363	5331	178	982	-2217	C
	ATOM	4808	CB	ARG	E	436	39.663	-36.647	-22.752	1.00	39.05		C
	ANISOU	4808	CB	ARG	E	436	5249	3770	5817	172	1014	-2522	C
	ATOM	4809	CG	ARG	E	436	38.505	-37.569	-22.494	1.00	44.53		C
25	ANISOU	4809	CG	ARG	E	436	6055	4209	6656	124	920	-2530	C
	ATOM	4810	CD	ARG	E	436	38.611	-38.440	-21.233	1.00	52.12		C
	ANISOU	4810	CD	ARG	E	436	7061	4819	7923	242	842	-2421	C
	ATOM	4811	NE	ARG	E	436	37.245	-38.756	-20.802	1.00	57.30		N
30	ANISOU	4811	NE	ARG	E	436	7831	5312	8631	112	760	-2299	N
	ATOM	4812	CZ	ARG	E	436	36.618	-38.200	-19.764	1.00	57.95		C
	ANISOU	4812	CZ	ARG	E	436	7958	5361	8701	53	702	-2012	C
	ATOM	4813	NH1	ARG	E	436	37.239	-37.329	-18.967	1.00	55.93		N
	ANISOU	4813	NH1	ARG	E	436	7660	5194	8395	119	701	-1810	N
	ATOM	4814	NH2	ARG	E	436	35.361	-38.551	-19.498	1.00	60.15		N
35	ANISOU	4814	NH2	ARG	E	436	8312	5518	9024	-81	651	-1946	N
	ATOM	4815	C	ARG	E	436	41.160	-34.801	-22.148	1.00	35.22		C
	ANISOU	4815	C	ARG	E	436	4619	3580	5182	206	1094	-2273	C
	ATOM	4816	O	ARG	E	436	42.231	-35.071	-21.622	1.00	35.85		O
40	ANISOU	4816	O	ARG	E	436	4598	3608	5416	348	1111	-2313	O
	ATOM	4817	N	HIS	E	437	41.028	-33.904	-23.128	1.00	34.80		N
	ANISOU	4817	N	HIS	E	437	4568	3798	4857	67	1165	-2278	N
	ATOM	4818	CA	HIS	E	437	42.118	-33.014	-23.525	1.00	34.74		C
	ANISOU	4818	CA	HIS	E	437	4454	4042	4705	38	1285	-2284	C
	ATOM	4819	CB	HIS	E	437	41.679	-32.053	-24.633	1.00	34.55		C
45	ANISOU	4819	CB	HIS	E	437	4489	4283	4357	-146	1338	-2235	C
	ATOM	4820	CG	HIS	E	437	42.748	-31.068	-25.013	1.00	35.10		C
	ANISOU	4820	CG	HIS	E	437	4468	4599	4270	-217	1471	-2204	C
	ATOM	4821	ND1	HIS	E	437	43.851	-31.420	-25.764	1.00	37.41		N
50	ANISOU	4821	ND1	HIS	E	437	4626	5075	4513	-200	1631	-2455	N
	ATOM	4822	CE1	HIS	E	437	44.631	-30.366	-25.924	1.00	38.18		C
	ANISOU	4822	CE1	HIS	E	437	4658	5375	4475	-302	1736	-2358	C
	ATOM	4823	NE2	HIS	E	437	44.081	-29.345	-25.292	1.00	35.48		N
	ANISOU	4823	NE2	HIS	E	437	4413	4960	4108	-374	1640	-2054	N
	ATOM	4824	CD2	HIS	E	437	42.906	-29.759	-24.711	1.00	32.73		C
55	ANISOU	4824	CD2	HIS	E	437	4181	4382	3872	-313	1477	-1962	C
	ATOM	4825	C	HIS	E	437	42.749	-32.194	-22.375	1.00	33.02		C
	ANISOU	4825	C	HIS	E	437	4176	3799	4570	79	1259	-2066	C
	ATOM	4826	O	HIS	E	437	43.972	-32.101	-22.278	1.00	33.79		O
60	ANISOU	4826	O	HIS	E	437	4129	3988	4720	145	1337	-2148	O
	ATOM	4827	N	PHE	E	438	41.926	-31.574	-21.532	1.00	31.16		N
	ANISOU	4827	N	PHE	E	438	4035	3462	4342	33	1153	-1812	N
	ATOM	4828	CA	PHE	E	438	42.449	-30.736	-20.445	1.00	29.88		C
	ANISOU	4828	CA	PHE	E	438	3826	3289	4236	53	1124	-1624	C
	ATOM	4829	CB	PHE	E	438	41.489	-29.603	-20.094	1.00	26.95		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4829	CB	PHE	E	438	3561	2923	3757	-63	1061	-1384	C
	ATOM	4830	CG	PHE	E	438	41.464	-28.502	-21.121	1.00	27.09		C
	ANISOU	4830	CG	PHE	E	438	3604	3149	3541	-212	1134	-1338	C
	ATOM	4831	CD1	PHE	E	438	42.603	-27.741	-21.370	1.00	25.13		C
5	ANISOU	4831	CD1	PHE	E	438	3262	3064	3221	-267	1241	-1344	C
	ATOM	4832	CE1	PHE	E	438	42.595	-26.732	-22.328	1.00	25.50		C
	ANISOU	4832	CE1	PHE	E	438	3355	3289	3044	-424	1312	-1272	C
	ATOM	4833	CZ	PHE	E	438	41.445	-26.464	-23.056	1.00	25.46		C
	ANISOU	4833	CZ	PHE	E	438	3487	3307	2880	-504	1254	-1191	C
10	ATOM	4834	CE2	PHE	E	438	40.295	-27.218	-22.825	1.00	25.44		C
	ANISOU	4834	CE2	PHE	E	438	3552	3162	2953	-438	1138	-1209	C
	ATOM	4835	CD2	PHE	E	438	40.308	-28.232	-21.858	1.00	26.06		C
	ANISOU	4835	CD2	PHE	E	438	3586	3055	3260	-305	1090	-1283	C
	ATOM	4836	C	PHE	E	438	42.892	-31.546	-19.216	1.00	30.99		C
15	ANISOU	4836	C	PHE	E	438	3923	3228	4624	221	1042	-1610	C
	ATOM	4837	O	PHE	E	438	43.758	-31.116	-18.459	1.00	30.57		O
	ANISOU	4837	O	PHE	E	438	3776	3208	4631	274	1032	-1547	O
	ATOM	4838	N	GLN	E	439	42.333	-32.746	-19.058	1.00	32.94		N
	ANISOU	4838	N	GLN	E	439	4237	3267	5012	299	977	-1674	N
20	ATOM	4839	CA	GLN	E	439	42.793	-33.691	-18.041	1.00	34.33		C
	ANISOU	4839	CA	GLN	E	439	4390	3229	5424	468	892	-1664	C
	ATOM	4840	CB	GLN	E	439	41.809	-34.835	-17.889	1.00	34.98		C
	ANISOU	4840	CB	GLN	E	439	4604	3055	5634	485	819	-1673	C
	ATOM	4841	CG	GLN	E	439	40.528	-34.421	-17.151	1.00	33.80		C
25	ANISOU	4841	CG	GLN	E	439	4583	2832	5428	365	747	-1440	C
	ATOM	4842	CD	GLN	E	439	39.593	-35.607	-16.908	1.00	35.82		C
	ANISOU	4842	CD	GLN	E	439	4957	2826	5828	357	684	-1441	C
	ATOM	4843	OE1	GLN	E	439	39.605	-36.585	-17.663	1.00	36.28		O
	ANISOU	4843	OE1	GLN	E	439	5025	2780	5979	391	705	-1646	O
30	ATOM	4844	NE2	GLN	E	439	38.782	-35.521	-15.849	1.00	34.67		N
	ANISOU	4844	NE2	GLN	E	439	4899	2575	5700	299	617	-1224	N
	ATOM	4845	C	GLN	E	439	44.181	-34.224	-18.355	1.00	36.88		C
	ANISOU	4845	C	GLN	E	439	4548	3601	5863	621	947	-1875	C
	ATOM	4846	O	GLN	E	439	44.947	-34.537	-17.454	1.00	38.31		O
35	ANISOU	4846	O	GLN	E	439	4655	3695	6205	771	873	-1834	O
	ATOM	4847	N	LYS	E	440	44.506	-34.307	-19.639	1.00	38.67		N
	ANISOU	4847	N	LYS	E	440	4708	3989	5997	585	1074	-2109	N
	ATOM	4848	CA	LYS	E	440	45.830	-34.701	-20.085	1.00	41.00		C
	ANISOU	4848	CA	LYS	E	440	4811	4387	6378	713	1162	-2352	C
40	ATOM	4849	CB	LYS	E	440	45.760	-35.237	-21.517	1.00	43.24		C
	ANISOU	4849	CB	LYS	E	440	5080	4772	6575	674	1289	-2647	C
	ATOM	4850	CG	LYS	E	440	44.974	-36.564	-21.628	1.00	44.39		C
	ANISOU	4850	CG	LYS	E	440	5348	4632	6884	748	1215	-2766	C
	ATOM	4851	CD	LYS	E	440	45.302	-37.362	-22.891	1.00	47.55		C
45	ANISOU	4851	CD	LYS	E	440	5680	5105	7282	784	1335	-3147	C
	ATOM	4852	CE	LYS	E	440	44.512	-38.715	-22.929	1.00	50.57		C
	ANISOU	4852	CE	LYS	E	440	6192	5155	7866	848	1250	-3276	C
	ATOM	4853	NZ	LYS	E	440	45.145	-39.840	-23.728	1.00	54.88		N
	ANISOU	4853	NZ	LYS	E	440	6641	5641	8568	993	1329	-3685	N
50	ATOM	4854	C	LYS	E	440	46.860	-33.566	-19.953	1.00	41.06		C
	ANISOU	4854	C	LYS	E	440	4658	4652	6290	666	1236	-2303	C
	ATOM	4855	O	LYS	E	440	48.025	-33.808	-19.611	1.00	42.57		O
	ANISOU	4855	O	LYS	E	440	4664	4881	6629	813	1240	-2407	O
	ATOM	4856	N	ASP	E	441	46.435	-32.336	-20.226	1.00	39.79		N
55	ANISOU	4856	N	ASP	E	441	4560	4659	5898	463	1287	-2149	N
	ATOM	4857	CA	ASP	E	441	47.317	-31.180	-20.142	1.00	40.18		C
	ANISOU	4857	CA	ASP	E	441	4482	4932	5855	373	1365	-2091	C
	ATOM	4858	CB	ASP	E	441	48.154	-31.013	-21.419	1.00	43.33		C
	ANISOU	4858	CB	ASP	E	441	4737	5607	6118	295	1564	-2319	C
60	ATOM	4859	CG	ASP	E	441	49.325	-30.041	-21.231	1.00	46.39		C
	ANISOU	4859	CG	ASP	E	441	4939	6211	6477	220	1653	-2302	C
	ATOM	4860	OD1	ASP	E	441	49.448	-29.440	-20.140	1.00	48.49		O
	ANISOU	4860	OD1	ASP	E	441	5197	6410	6818	225	1551	-2118	O
	ATOM	4861	OD2	ASP	E	441	50.129	-29.879	-22.174	1.00	51.62		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4861	OD2	ASP	E	441	5456	7122	7035	143	1834	-2486	O
	ATOM	4862	C	ASP	E	441	46.537	-29.904	-19.828	1.00	37.74		C
	ANISOU	4862	C	ASP	E	441	4310	4644	5386	194	1329	-1822	C
	ATOM	4863	O	ASP	E	441	45.864	-29.332	-20.693	1.00	37.25		O
5	ANISOU	4863	O	ASP	E	441	4355	4675	5122	36	1387	-1775	O
	ATOM	4864	N	ALA	E	442	46.636	-29.476	-18.570	1.00	35.71		N
	ANISOU	4864	N	ALA	E	442	4047	4299	5223	231	1222	-1652	N
	ATOM	4865	CA	ALA	E	442	45.931	-28.299	-18.098	1.00	33.38		C
	ANISOU	4865	CA	ALA	E	442	3868	3993	4822	92	1177	-1423	C
10	ATOM	4866	CB	ALA	E	442	45.419	-28.529	-16.675	1.00	31.22		C
	ANISOU	4866	CB	ALA	E	442	3665	3526	4672	185	1020	-1271	C
	ATOM	4867	C	ALA	E	442	46.776	-27.016	-18.181	1.00	33.32		C
	ANISOU	4867	C	ALA	E	442	3761	4170	4728	-46	1265	-1384	C
	ATOM	4868	O	ALA	E	442	46.260	-25.945	-17.903	1.00	32.99		O
15	ANISOU	4868	O	ALA	E	442	3816	4112	4608	-168	1240	-1212	O
	ATOM	4869	N	LYS	E	443	48.043	-27.134	-18.584	1.00	34.87		N
	ANISOU	4869	N	LYS	E	443	3760	4535	4953	-31	1371	-1554	N
	ATOM	4870	CA	LYS	E	443	49.006	-26.014	-18.612	1.00	35.36		C
	ANISOU	4870	CA	LYS	E	443	3692	4779	4964	-175	1466	-1542	C
20	ATOM	4871	CB	LYS	E	443	50.372	-26.455	-19.164	1.00	38.05		C
	ANISOU	4871	CB	LYS	E	443	3778	5324	5355	-134	1599	-1786	C
	ATOM	4872	CG	LYS	E	443	51.263	-27.243	-18.219	1.00	40.17		C
	ANISOU	4872	CG	LYS	E	443	3849	5559	5857	88	1500	-1903	C
	ATOM	4873	CD	LYS	E	443	52.487	-27.764	-18.987	1.00	43.53		C
25	ANISOU	4873	CD	LYS	E	443	4010	6196	6334	144	1649	-2186	C
	ATOM	4874	CE	LYS	E	443	53.103	-28.956	-18.285	1.00	48.78		C
	ANISOU	4874	CE	LYS	E	443	4515	6765	7255	440	1522	-2328	C
	ATOM	4875	NZ	LYS	E	443	54.154	-29.631	-19.120	1.00	53.55		N
	ANISOU	4875	NZ	LYS	E	443	4860	7551	7935	536	1667	-2646	N
30	ATOM	4876	C	LYS	E	443	48.554	-24.806	-19.413	1.00	33.77		C
	ANISOU	4876	C	LYS	E	443	3618	4659	4554	-414	1561	-1408	C
	ATOM	4877	O	LYS	E	443	48.684	-23.694	-18.948	1.00	33.32		O
	ANISOU	4877	O	LYS	E	443	3574	4600	4484	-537	1551	-1276	O
	ATOM	4878	N	VAL	E	444	48.057	-25.015	-20.627	1.00	33.39		N
35	ANISOU	4878	N	VAL	E	444	3664	4680	4342	-482	1645	-1446	N
	ATOM	4879	CA	VAL	E	444	47.578	-23.901	-21.443	1.00	32.51		C
	ANISOU	4879	CA	VAL	E	444	3697	4640	4016	-699	1710	-1287	C
	ATOM	4880	CB	VAL	E	444	47.325	-24.320	-22.913	1.00	33.98		C
	ANISOU	4880	CB	VAL	E	444	3940	4981	3988	-767	1820	-1385	C
40	ATOM	4881	CG1	VAL	E	444	46.849	-23.117	-23.727	1.00	33.93		C
	ANISOU	4881	CG1	VAL	E	444	4100	5048	3745	-989	1863	-1177	C
	ATOM	4882	CG2	VAL	E	444	48.595	-24.935	-23.530	1.00	35.29		C
	ANISOU	4882	CG2	VAL	E	444	3886	5374	4147	-757	1997	-1653	C
	ATOM	4883	C	VAL	E	444	46.325	-23.248	-20.824	1.00	30.69		C
45	ANISOU	4883	C	VAL	E	444	3666	4204	3792	-710	1557	-1054	C
	ATOM	4884	O	VAL	E	444	46.204	-22.012	-20.791	1.00	30.76		O
	ANISOU	4884	O	VAL	E	444	3753	4195	3741	-856	1561	-883	O
	ATOM	4885	N	LEU	E	445	45.419	-24.090	-20.332	1.00	28.79		N
	ANISOU	4885	N	LEU	E	445	3497	3803	3639	-557	1429	-1058	N
50	ATOM	4886	CA	LEU	E	445	44.175	-23.667	-19.699	1.00	27.40		C
	ANISOU	4886	CA	LEU	E	445	3476	3448	3487	-543	1291	-880	C
	ATOM	4887	CB	LEU	E	445	43.334	-24.905	-19.324	1.00	26.06		C
	ANISOU	4887	CB	LEU	E	445	3348	3141	3410	-390	1191	-938	C
	ATOM	4888	CG	LEU	E	445	42.005	-24.714	-18.603	1.00	24.67		C
55	ANISOU	4888	CG	LEU	E	445	3297	2800	3277	-363	1061	-794	C
	ATOM	4889	CD1	LEU	E	445	41.045	-23.943	-19.450	1.00	23.86		C
	ANISOU	4889	CD1	LEU	E	445	3319	2724	3024	-467	1044	-683	C
	ATOM	4890	CD2	LEU	E	445	41.388	-26.048	-18.167	1.00	23.79		C
	ANISOU	4890	CD2	LEU	E	445	3204	2560	3276	-238	987	-863	C
60	ATOM	4891	C	LEU	E	445	44.416	-22.841	-18.438	1.00	26.46		C
	ANISOU	4891	C	LEU	E	445	3330	3240	3486	-548	1230	-777	C
	ATOM	4892	O	LEU	E	445	43.801	-21.786	-18.261	1.00	26.04		O
	ANISOU	4892	O	LEU	E	445	3381	3112	3400	-630	1188	-624	O
	ATOM	4893	N	PHE	E	446	45.272	-23.353	-17.551	1.00	26.46		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4893	N	PHE	E	446	3188	3241	3625	-447	1211	-870	N
	ATOM	4894	CA	PHE	E	446	45.576	-22.697	-16.274	1.00	25.67		C
	ANISOU	4894	CA	PHE	E	446	3046	3084	3625	-444	1141	-806	C
	ATOM	4895	CB	PHE	E	446	46.347	-23.663	-15.363	1.00	26.39		C
5	ANISOU	4895	CB	PHE	E	446	2995	3178	3856	-282	1079	-912	C
	ATOM	4896	CG	PHE	E	446	45.490	-24.679	-14.652	1.00	24.94		C
	ANISOU	4896	CG	PHE	E	446	2898	2839	3740	-131	959	-875	C
	ATOM	4897	CD1	PHE	E	446	44.152	-24.830	-14.944	1.00	24.46		C
10	ANISOU	4897	CD1	PHE	E	446	2999	2671	3625	-146	932	-796	C
	ATOM	4898	CE1	PHE	E	446	43.370	-25.769	-14.271	1.00	25.96		C
	ANISOU	4898	CE1	PHE	E	446	3262	2721	3881	-40	838	-760	C
	ATOM	4899	CZ	PHE	E	446	43.927	-26.577	-13.306	1.00	26.29		C
	ANISOU	4899	CZ	PHE	E	446	3242	2714	4034	92	761	-778	C
	ATOM	4900	CE2	PHE	E	446	45.274	-26.429	-12.996	1.00	28.95		C
15	ANISOU	4900	CE2	PHE	E	446	3418	3158	4423	134	764	-850	C
	ATOM	4901	CD2	PHE	E	446	46.045	-25.494	-13.676	1.00	27.06		C
	ANISOU	4901	CD2	PHE	E	446	3080	3073	4128	20	868	-912	C
	ATOM	4902	C	PHE	E	446	46.389	-21.403	-16.496	1.00	26.52		C
	ANISOU	4902	C	PHE	E	446	3097	3289	3693	-623	1230	-777	C
20	ATOM	4903	O	PHE	E	446	46.081	-20.387	-15.902	1.00	26.04		O
	ANISOU	4903	O	PHE	E	446	3101	3142	3650	-697	1185	-672	O
	ATOM	4904	N	GLN	E	447	47.407	-21.441	-17.364	1.00	28.42		N
	ANISOU	4904	N	GLN	E	447	3213	3703	3882	-703	1367	-882	N
	ATOM	4905	CA	GLN	E	447	48.255	-20.272	-17.631	1.00	30.21		C
25	ANISOU	4905	CA	GLN	E	447	3374	4031	4073	-906	1474	-858	C
	ATOM	4906	CB	GLN	E	447	49.558	-20.665	-18.370	1.00	32.70		C
	ANISOU	4906	CB	GLN	E	447	3479	4581	4365	-956	1632	-1034	C
	ATOM	4907	CG	GLN	E	447	50.469	-21.664	-17.619	1.00	33.25		C
	ANISOU	4907	CG	GLN	E	447	3317	4717	4599	-768	1585	-1223	C
30	ATOM	4908	CD	GLN	E	447	51.134	-21.082	-16.361	1.00	34.07		C
	ANISOU	4908	CD	GLN	E	447	3297	4813	4836	-777	1499	-1223	C
	ATOM	4909	OE1	GLN	E	447	50.681	-20.084	-15.801	1.00	33.58		O
	ANISOU	4909	OE1	GLN	E	447	3351	4637	4770	-881	1442	-1088	O
	ATOM	4910	NE2	GLN	E	447	52.215	-21.716	-15.914	1.00	33.89		N
35	ANISOU	4910	NE2	GLN	E	447	3028	4913	4937	-660	1480	-1391	N
	ATOM	4911	C	GLN	E	447	47.535	-19.110	-18.348	1.00	30.32		C
	ANISOU	4911	C	GLN	E	447	3585	3978	3959	-1087	1508	-671	C
	ATOM	4912	O	GLN	E	447	47.924	-17.962	-18.215	1.00	31.49		O
	ANISOU	4912	O	GLN	E	447	3740	4105	4121	-1252	1546	-595	O
40	ATOM	4913	N	ASN	E	448	46.468	-19.409	-19.073	1.00	30.31		N
	ANISOU	4913	N	ASN	E	448	3744	3928	3845	-1051	1477	-595	N
	ATOM	4914	CA	ASN	E	448	45.761	-18.409	-19.873	1.00	30.88		C
	ANISOU	4914	CA	ASN	E	448	4004	3947	3783	-1195	1485	-407	C
	ATOM	4915	CB	ASN	E	448	45.584	-18.920	-21.309	1.00	32.53		C
45	ANISOU	4915	CB	ASN	E	448	4268	4311	3782	-1240	1569	-424	C
	ATOM	4916	CG	ASN	E	448	46.858	-18.826	-22.104	1.00	35.40		C
	ANISOU	4916	CG	ASN	E	448	4506	4905	4040	-1401	1764	-514	C
	ATOM	4917	OD1	ASN	E	448	47.280	-17.741	-22.458	1.00	39.32		O
	ANISOU	4917	OD1	ASN	E	448	5044	5427	4468	-1605	1846	-389	O
50	ATOM	4918	ND2	ASN	E	448	47.482	-19.960	-22.378	1.00	37.31		N
	ANISOU	4918	ND2	ASN	E	448	4588	5308	4280	-1312	1845	-737	N
	ATOM	4919	C	ASN	E	448	44.419	-17.982	-19.291	1.00	29.13		C
	ANISOU	4919	C	ASN	E	448	3941	3507	3618	-1115	1326	-267	C
	ATOM	4920	O	ASN	E	448	43.766	-17.081	-19.821	1.00	29.93		O
55	ANISOU	4920	O	ASN	E	448	4198	3528	3646	-1201	1297	-98	O
	ATOM	4921	N	TRP	E	449	44.039	-18.593	-18.176	1.00	27.59		N
	ANISOU	4921	N	TRP	E	449	3703	3222	3558	-952	1225	-333	N
	ATOM	4922	CA	TRP	E	449	42.729	-18.370	-17.542	1.00	26.76		C
	ANISOU	4922	CA	TRP	E	449	3713	2942	3513	-861	1090	-243	C
60	ATOM	4923	CB	TRP	E	449	42.475	-19.424	-16.454	1.00	24.28		C
	ANISOU	4923	CB	TRP	E	449	3331	2590	3304	-695	1016	-340	C
	ATOM	4924	CG	TRP	E	449	41.137	-19.316	-15.787	1.00	23.02		C
	ANISOU	4924	CG	TRP	E	449	3262	2290	3195	-614	905	-273	C
	ATOM	4925	CD1	TRP	E	449	40.863	-18.715	-14.596	1.00	21.45		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4925	CD1	TRP	E	449	3066	1994	3092	-591	847	-256	C
	ATOM	4926	NE1	TRP	E	449	39.515	-18.822	-14.298	1.00	20.39		N
	ANISOU	4926	NE1	TRP	E	449	3000	1770	2976	-516	770	-215	N
	ATOM	4927	CE2	TRP	E	449	38.885	-19.504	-15.306	1.00	21.49		C
5	ANISOU	4927	CE2	TRP	E	449	3183	1943	3039	-494	763	-200	C
	ATOM	4928	CD2	TRP	E	449	39.876	-19.846	-16.270	1.00	24.86		C
	ANISOU	4928	CD2	TRP	E	449	3576	2486	3383	-553	846	-240	C
	ATOM	4929	CE3	TRP	E	449	39.491	-20.568	-17.422	1.00	23.76		C
	ANISOU	4929	CE3	TRP	E	449	3472	2418	3138	-550	858	-261	C
10	ATOM	4930	CZ3	TRP	E	449	38.128	-20.936	-17.561	1.00	23.43		C
	ANISOU	4930	CZ3	TRP	E	449	3491	2323	3088	-492	771	-235	C
	ATOM	4931	CH2	TRP	E	449	37.172	-20.568	-16.574	1.00	21.37		C
	ANISOU	4931	CH2	TRP	E	449	3244	1947	2927	-437	692	-188	C
	ATOM	4932	CZ2	TRP	E	449	37.535	-19.864	-15.450	1.00	20.61		C
15	ANISOU	4932	CZ2	TRP	E	449	3121	1786	2923	-435	694	-175	C
	ATOM	4933	C	TRP	E	449	42.490	-16.955	-16.983	1.00	27.51		C
	ANISOU	4933	C	TRP	E	449	3882	2888	3683	-936	1047	-131	C
	ATOM	4934	O	TRP	E	449	41.353	-16.459	-16.959	1.00	28.76		O
	ANISOU	4934	O	TRP	E	449	4157	2914	3855	-897	959	-29	O
20	ATOM	4935	N	GLY	E	450	43.527	-16.296	-16.504	1.00	28.21		N
	ANISOU	4935	N	GLY	E	450	3890	2989	3838	-1037	1102	-166	N
	ATOM	4936	CA	GLY	E	450	43.293	-14.993	-15.886	1.00	27.79		C
	ANISOU	4936	CA	GLY	E	450	3907	2766	3884	-1103	1057	-93	C
	ATOM	4937	C	GLY	E	450	43.612	-15.062	-14.403	1.00	26.81		C
25	ANISOU	4937	C	GLY	E	450	3678	2623	3885	-1038	1007	-216	C
	ATOM	4938	O	GLY	E	450	43.219	-16.005	-13.720	1.00	25.75		O
	ANISOU	4938	O	GLY	E	450	3501	2518	3763	-889	946	-282	O
	ATOM	4939	N	ILE	E	451	44.331	-14.049	-13.925	1.00	27.46		N
	ANISOU	4939	N	ILE	E	451	3725	2659	4049	-1166	1031	-243	N
30	ATOM	4940	CA	ILE	E	451	44.805	-13.944	-12.563	1.00	26.27		C
	ANISOU	4940	CA	ILE	E	451	3467	2521	3994	-1141	984	-372	C
	ATOM	4941	CB	ILE	E	451	46.380	-13.916	-12.516	1.00	27.56		C
	ANISOU	4941	CB	ILE	E	451	3449	2845	4177	-1267	1061	-479	C
	ATOM	4942	CG1	ILE	E	451	46.919	-14.436	-11.178	1.00	27.57		C
35	ANISOU	4942	CG1	ILE	E	451	3300	2949	4228	-1173	981	-627	C
	ATOM	4943	CD1	ILE	E	451	47.068	-15.951	-11.141	1.00	22.34		C
	ANISOU	4943	CD1	ILE	E	451	2547	2426	3515	-998	952	-669	C
	ATOM	4944	CG2	ILE	E	451	46.958	-12.547	-12.840	1.00	28.46		C
	ANISOU	4944	CG2	ILE	E	451	3590	2876	4349	-1500	1134	-445	C
40	ATOM	4945	C	ILE	E	451	44.170	-12.690	-11.957	1.00	26.81		C
	ANISOU	4945	C	ILE	E	451	3641	2382	4162	-1182	931	-349	C
	ATOM	4946	O	ILE	E	451	43.942	-11.712	-12.669	1.00	27.27		O
	ANISOU	4946	O	ILE	E	451	3818	2296	4248	-1289	957	-238	O
	ATOM	4947	N	GLU	E	452	43.846	-12.740	-10.657	1.00	26.34		N
45	ANISOU	4947	N	GLU	E	452	3548	2306	4155	-1090	853	-453	N
	ATOM	4948	CA	GLU	E	452	43.223	-11.616	-9.949	1.00	27.25		C
	ANISOU	4948	CA	GLU	E	452	3743	2237	4375	-1105	806	-486	C
	ATOM	4949	CB	GLU	E	452	41.711	-11.797	-9.805	1.00	26.07		C
	ANISOU	4949	CB	GLU	E	452	3691	1990	4224	-947	745	-441	C
50	ATOM	4950	CG	GLU	E	452	41.266	-12.939	-8.853	1.00	25.31		C
	ANISOU	4950	CG	GLU	E	452	3530	2030	4058	-801	701	-515	C
	ATOM	4951	CD	GLU	E	452	39.756	-13.124	-8.803	1.00	24.53		C
	ANISOU	4951	CD	GLU	E	452	3504	1856	3961	-674	661	-476	C
	ATOM	4952	OE1	GLU	E	452	39.068	-12.217	-9.314	1.00	25.81		O
55	ANISOU	4952	OE1	GLU	E	452	3753	1850	4202	-676	647	-420	O
	ATOM	4953	OE2	GLU	E	452	39.251	-14.177	-8.283	1.00	23.51		O
	ANISOU	4953	OE2	GLU	E	452	3341	1829	3761	-574	642	-494	O
	ATOM	4954	C	GLU	E	452	43.848	-11.432	-8.580	1.00	28.43		C
	ANISOU	4954	C	GLU	E	452	3783	2458	4563	-1127	771	-662	C
60	ATOM	4955	O	GLU	E	452	44.286	-12.399	-7.949	1.00	27.98		O
	ANISOU	4955	O	GLU	E	452	3614	2584	4434	-1053	740	-731	O
	ATOM	4956	N	HIS	E	453	43.923	-10.180	-8.146	1.00	30.69		N
	ANISOU	4956	N	HIS	E	453	4104	2592	4964	-1232	766	-734	N
	ATOM	4957	CA	HIS	E	453	44.200	-9.865	-6.747	1.00	32.45		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4957	CA	HIS	E	453	4251	2864	5216	-1241	715	-926	C
	ATOM	4958	CB	HIS	E	453	44.444	-8.372	-6.528	1.00	34.20		C
	ANISOU	4958	CB	HIS	E	453	4517	2885	5593	-1398	727	-1017	C
	ATOM	4959	CG	HIS	E	453	45.250	-8.092	-5.296	1.00	39.68		C
5	ANISOU	4959	CG	HIS	E	453	5086	3695	6296	-1476	688	-1238	C
	ATOM	4960	ND1	HIS	E	453	44.724	-7.482	-4.169	1.00	43.34		N
	ANISOU	4960	ND1	HIS	E	453	5574	4092	6801	-1445	640	-1415	N
	ATOM	4961	CE1	HIS	E	453	45.664	-7.391	-3.246	1.00	44.55		C
10	ANISOU	4961	CE1	HIS	E	453	5596	4407	6924	-1535	601	-1598	C
	ATOM	4962	NE2	HIS	E	453	46.769	-7.945	-3.718	1.00	42.51		N
	ANISOU	4962	NE2	HIS	E	453	5213	4316	6621	-1609	617	-1544	N
	ATOM	4963	CD2	HIS	E	453	46.540	-8.383	-4.997	1.00	40.32		C
	ANISOU	4963	CD2	HIS	E	453	5000	3982	6338	-1576	682	-1329	C
	ATOM	4964	C	HIS	E	453	43.055	-10.310	-5.860	1.00	31.39		C
15	ANISOU	4964	C	HIS	E	453	4153	2749	5027	-1069	658	-973	C
	ATOM	4965	O	HIS	E	453	41.890	-10.357	-6.286	1.00	30.46		O
	ANISOU	4965	O	HIS	E	453	4134	2517	4921	-967	656	-882	O
	ATOM	4966	N	ILE	E	454	43.380	-10.638	-4.618	1.00	31.87		N
20	ANISOU	4966	N	ILE	E	454	4122	2971	5015	-1043	609	-1116	N
	ATOM	4967	CA	ILE	E	454	42.346	-11.093	-3.700	1.00	31.42		C
	ANISOU	4967	CA	ILE	E	454	4094	2967	4875	-909	573	-1161	C
	ATOM	4968	CB	ILE	E	454	42.380	-12.627	-3.506	1.00	30.33		C
	ANISOU	4968	CB	ILE	E	454	3911	3030	4585	-798	542	-1074	C
	ATOM	4969	CG1	ILE	E	454	43.610	-13.057	-2.681	1.00	31.20		C
25	ANISOU	4969	CG1	ILE	E	454	3893	3350	4610	-830	478	-1157	C
	ATOM	4970	CD1	ILE	E	454	43.581	-14.534	-2.282	1.00	29.25		C
	ANISOU	4970	CD1	ILE	E	454	3622	3268	4225	-703	423	-1067	C
	ATOM	4971	CG2	ILE	E	454	42.334	-13.309	-4.878	1.00	29.40		C
30	ANISOU	4971	CG2	ILE	E	454	3820	2871	4478	-764	580	-902	C
	ATOM	4972	C	ILE	E	454	42.322	-10.396	-2.359	1.00	32.96		C
	ANISOU	4972	C	ILE	E	454	4262	3196	5064	-942	541	-1372	C
	ATOM	4973	O	ILE	E	454	43.289	-9.765	-1.929	1.00	34.56		O
	ANISOU	4973	O	ILE	E	454	4398	3432	5303	-1065	521	-1505	O
35	ATOM	4974	N	ASP	E	455	41.171	-10.489	-1.720	1.00	33.18		N
	ANISOU	4974	N	ASP	E	455	4337	3225	5046	-841	545	-1419	N
	ATOM	4975	CA	ASP	E	455	41.040	-10.071	-0.349	1.00	34.92		C
	ANISOU	4975	CA	ASP	E	455	4527	3541	5200	-856	525	-1632	C
	ATOM	4976	CB	ASP	E	455	39.607	-9.614	-0.072	1.00	35.97		C
40	ANISOU	4976	CB	ASP	E	455	4721	3562	5384	-767	570	-1709	C
	ATOM	4977	CG	ASP	E	455	39.150	-8.513	-1.016	1.00	38.40		C
	ANISOU	4977	CG	ASP	E	455	5103	3558	5931	-768	596	-1692	C
	ATOM	4978	OD1	ASP	E	455	39.930	-7.575	-1.295	1.00	43.88		O
	ANISOU	4978	OD1	ASP	E	455	5809	4103	6759	-885	588	-1746	O
45	ATOM	4979	OD2	ASP	E	455	38.012	-8.581	-1.493	1.00	39.86		O
	ANISOU	4979	OD2	ASP	E	455	5332	3641	6173	-656	616	-1617	O
	ATOM	4980	C	ASP	E	455	41.428	-11.210	0.583	1.00	34.38		C
	ANISOU	4980	C	ASP	E	455	4395	3761	4905	-821	470	-1620	C
	ATOM	4981	O	ASP	E	455	41.239	-12.372	0.267	1.00	33.22		O
50	ANISOU	4981	O	ASP	E	455	4259	3693	4672	-739	463	-1447	O
	ATOM	4982	N	ASN	E	456	42.001	-10.857	1.727	1.00	36.29		N
	ANISOU	4982	N	ASN	E	456	4579	4155	5054	-888	421	-1805	N
	ATOM	4983	CA	ASN	E	456	42.242	-11.804	2.805	1.00	36.41		C
	ANISOU	4983	CA	ASN	E	456	4556	4451	4827	-852	350	-1799	C
	ATOM	4984	CB	ASN	E	456	43.157	-11.172	3.870	1.00	38.96		C
55	ANISOU	4984	CB	ASN	E	456	4797	4935	5071	-959	274	-2023	C
	ATOM	4985	CG	ASN	E	456	44.549	-10.827	3.334	1.00	40.45		C
	ANISOU	4985	CG	ASN	E	456	4881	5107	5382	-1060	220	-2046	C
	ATOM	4986	OD1	ASN	E	456	45.178	-11.638	2.635	1.00	41.16		O
	ANISOU	4986	OD1	ASN	E	456	4920	5233	5486	-1020	191	-1874	O
60	ATOM	4987	ND2	ASN	E	456	45.040	-9.624	3.669	1.00	39.97		N
	ANISOU	4987	ND2	ASN	E	456	4777	4994	5418	-1199	215	-2279	N
	ATOM	4988	C	ASN	E	456	40.922	-12.229	3.444	1.00	35.91		C
	ANISOU	4988	C	ASN	E	456	4561	4451	4631	-773	404	-1790	C
	ATOM	4989	O	ASN	E	456	40.246	-11.425	4.099	1.00	37.52		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	4989	O	ASN	E	456	4782	4643	4833	-794	455	-1984	O
	ATOM	4990	N	VAL	E	457	40.543	-13.483	3.230	1.00	33.98		N
	ANISOU	4990	N	VAL	E	457	4351	4269	4291	-689	402	-1578	N
	ATOM	4991	CA	VAL	E	457	39.365	-14.080	3.867	1.00	33.82		C
5	ANISOU	4991	CA	VAL	E	457	4385	4343	4122	-641	458	-1541	C
	ATOM	4992	CB	VAL	E	457	38.259	-14.476	2.836	1.00	32.61		C
	ANISOU	4992	CB	VAL	E	457	4279	4018	4093	-568	540	-1399	C
	ATOM	4993	CG1	VAL	E	457	37.029	-15.057	3.553	1.00	32.25		C
	ANISOU	4993	CG1	VAL	E	457	4264	4088	3900	-547	614	-1383	C
10	ATOM	4994	CG2	VAL	E	457	37.839	-13.264	1.956	1.00	34.28		C
	ANISOU	4994	CG2	VAL	E	457	4492	3983	4548	-564	592	-1495	C
	ATOM	4995	C	VAL	E	457	39.833	-15.326	4.626	1.00	33.51		C
	ANISOU	4995	C	VAL	E	457	4356	4530	3847	-623	373	-1398	C
	ATOM	4996	O	VAL	E	457	40.368	-16.254	4.027	1.00	32.47		O
15	ANISOU	4996	O	VAL	E	457	4224	4372	3741	-570	314	-1210	O
	ATOM	4997	N	MSE	E	458	39.663	-15.333	5.946	1.00	34.54		N
	ANISOU	4997	N	MSE	E	458	4498	4881	3746	-664	361	-1491	N
	ATOM	4998	CA	MSE	E	458	40.077	-16.485	6.758	1.00	34.73		C
	ANISOU	4998	CA	MSE	E	458	4554	5121	3522	-649	262	-1328	C
20	ATOM	4999	CB	MSE	E	458	39.930	-16.198	8.270	1.00	36.83		C
	ANISOU	4999	CB	MSE	E	458	4834	5661	3500	-725	252	-1475	C
	ATOM	5000	CG	MSE	E	458	40.556	-17.267	9.149	1.00	36.65		C
	ANISOU	5000	CG	MSE	E	458	4852	5870	3203	-714	109	-1293	C
	ATOM	5001	SE	MSE	E	458	40.273	-16.954	11.015	0.90	41.76		SE
25	ANISOU	5001	SE	MSE	E	458	5537	6903	3425	-827	106	-1458	SE
	ATOM	5002	CE	MSE	E	458	41.315	-18.332	11.797	1.00	45.02		C
	ANISOU	5002	CE	MSE	E	458	6009	7547	3550	-781	-137	-1152	C
	ATOM	5003	C	MSE	E	458	39.307	-17.753	6.367	1.00	33.55		C
	ANISOU	5003	C	MSE	E	458	4487	4909	3352	-591	305	-1072	C
30	ATOM	5004	O	MSE	E	458	38.099	-17.701	6.110	1.00	32.64		O
	ANISOU	5004	O	MSE	E	458	4404	4712	3286	-596	437	-1080	O
	ATOM	5005	N	GLY	E	459	40.010	-18.883	6.316	1.00	33.52		N
	ANISOU	5005	N	GLY	E	459	4507	4934	3293	-532	189	-859	N
	ATOM	5006	CA	GLY	E	459	39.389	-20.156	5.923	1.00	33.09		C
35	ANISOU	5006	CA	GLY	E	459	4540	4788	3245	-484	216	-617	C
	ATOM	5007	C	GLY	E	459	39.465	-20.494	4.445	1.00	31.02		C
	ANISOU	5007	C	GLY	E	459	4259	4286	3242	-413	236	-537	C
	ATOM	5008	O	GLY	E	459	38.878	-21.472	4.003	1.00	29.76		O
	ANISOU	5008	O	GLY	E	459	4166	4024	3119	-382	269	-374	O
40	ATOM	5009	N	MSE	E	460	40.234	-19.707	3.697	1.00	31.09		N
	ANISOU	5009	N	MSE	E	460	4178	4216	3419	-401	216	-654	N
	ATOM	5010	CA	MSE	E	460	40.276	-19.773	2.235	1.00	31.27		C
	ANISOU	5010	CA	MSE	E	460	4178	4037	3665	-358	258	-615	C
	ATOM	5011	CB	MSE	E	460	39.161	-18.884	1.732	1.00	30.55		C
45	ANISOU	5011	CB	MSE	E	460	4104	3830	3674	-400	385	-715	C
	ATOM	5012	CG	MSE	E	460	38.666	-19.120	0.368	1.00	31.73		C
	ANISOU	5012	CG	MSE	E	460	4270	3798	3987	-364	442	-641	C
	ATOM	5013	SE	MSE	E	460	37.264	-17.775	0.139	0.90	36.29		SE
	ANISOU	5013	SE	MSE	E	460	4850	4272	4665	-398	558	-792	SE
50	ATOM	5014	CE	MSE	E	460	35.900	-18.531	1.319	1.00	33.17		C
	ANISOU	5014	CE	MSE	E	460	4495	4021	4089	-418	629	-764	C
	ATOM	5015	C	MSE	E	460	41.595	-19.181	1.740	1.00	29.41		C
	ANISOU	5015	C	MSE	E	460	3836	3797	3541	-360	197	-704	C
	ATOM	5016	O	MSE	E	460	42.123	-18.243	2.345	1.00	30.18		O
55	ANISOU	5016	O	MSE	E	460	3874	3990	3604	-424	166	-859	O
	ATOM	5017	N	VAL	E	461	42.129	-19.739	0.654	1.00	27.19		N
	ANISOU	5017	N	VAL	E	461	3522	3418	3392	-302	187	-625	N
	ATOM	5018	CA	VAL	E	461	43.328	-19.186	0.002	1.00	26.63		C
	ANISOU	5018	CA	VAL	E	461	3332	3346	3439	-324	164	-711	C
60	ATOM	5019	CB	VAL	E	461	44.678	-19.981	0.317	1.00	27.57		C
	ANISOU	5019	CB	VAL	E	461	3343	3596	3535	-245	26	-678	C
	ATOM	5020	CG1	VAL	E	461	45.146	-19.726	1.712	1.00	30.38		C
	ANISOU	5020	CG1	VAL	E	461	3661	4147	3734	-267	-90	-741	C
	ATOM	5021	CG2	VAL	E	461	44.544	-21.476	0.054	1.00	27.15		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5021	CG2	VAL	E	461	3343	3486	3488	-113	-15	-505	C
	ATOM	5022	C	VAL	E	461	43.155	-19.117	-1.507	1.00	24.12		C
	ANISOU	5022	C	VAL	E	461	3020	2866	3278	-326	258	-681	C
	ATOM	5023	O	VAL	E	461	42.324	-19.841	-2.080	1.00	22.67		O
5	ANISOU	5023	O	VAL	E	461	2916	2584	3112	-275	303	-577	O
	ATOM	5024	N	GLY	E	462	43.947	-18.249	-2.140	1.00	23.16		N
	ANISOU	5024	N	GLY	E	462	2816	2728	3258	-401	288	-772	N
	ATOM	5025	CA	GLY	E	462	44.112	-18.282	-3.598	1.00	21.82		C
	ANISOU	5025	CA	GLY	E	462	2635	2456	3200	-412	367	-733	C
10	ATOM	5026	C	GLY	E	462	44.981	-19.456	-4.067	1.00	21.42		C
	ANISOU	5026	C	GLY	E	462	2500	2467	3173	-317	329	-687	C
	ATOM	5027	O	GLY	E	462	45.717	-20.046	-3.299	1.00	20.90		O
	ANISOU	5027	O	GLY	E	462	2354	2517	3068	-248	226	-695	O
	ATOM	5028	N	VAL	E	463	44.888	-19.781	-5.350	1.00	21.09		N
15	ANISOU	5028	N	VAL	E	463	2471	2348	3194	-308	408	-648	N
	ATOM	5029	CA	VAL	E	463	45.725	-20.807	-5.947	1.00	20.88		C
	ANISOU	5029	CA	VAL	E	463	2351	2370	3213	-218	396	-648	C
	ATOM	5030	CB	VAL	E	463	44.939	-22.151	-6.066	1.00	21.07		C
	ANISOU	5030	CB	VAL	E	463	2475	2306	3226	-91	372	-548	C
20	ATOM	5031	CG1	VAL	E	463	43.726	-22.012	-7.015	1.00	18.51		C
	ANISOU	5031	CG1	VAL	E	463	2276	1857	2899	-139	466	-501	C
	ATOM	5032	CG2	VAL	E	463	45.863	-23.303	-6.490	1.00	19.87		C
	ANISOU	5032	CG2	VAL	E	463	2221	2184	3145	35	338	-572	C
	ATOM	5033	C	VAL	E	463	46.254	-20.270	-7.294	1.00	20.93		C
25	ANISOU	5033	C	VAL	E	463	2297	2378	3279	-312	513	-699	C
	ATOM	5034	O	VAL	E	463	45.503	-19.667	-8.067	1.00	20.04		O
	ANISOU	5034	O	VAL	E	463	2287	2170	3159	-394	595	-659	O
	ATOM	5035	N	LEU	E	464	47.555	-20.432	-7.522	1.00	21.97		N
	ANISOU	5035	N	LEU	E	464	2253	2633	3461	-308	516	-787	N
30	ATOM	5036	CA	LEU	E	464	48.217	-20.037	-8.768	1.00	22.38		C
	ANISOU	5036	CA	LEU	E	464	2222	2733	3549	-412	644	-844	C
	ATOM	5037	CB	LEU	E	464	49.692	-19.686	-8.481	1.00	23.67		C
	ANISOU	5037	CB	LEU	E	464	2157	3066	3770	-468	634	-973	C
	ATOM	5038	CG	LEU	E	464	50.020	-18.579	-7.451	1.00	24.00		C
35	ANISOU	5038	CG	LEU	E	464	2156	3149	3816	-587	574	-1026	C
	ATOM	5039	CD1	LEU	E	464	51.527	-18.280	-7.395	1.00	23.87		C
	ANISOU	5039	CD1	LEU	E	464	1881	3320	3868	-665	578	-1172	C
	ATOM	5040	CD2	LEU	E	464	49.204	-17.298	-7.711	1.00	19.83		C
	ANISOU	5040	CD2	LEU	E	464	1791	2471	3272	-757	652	-975	C
40	ATOM	5041	C	LEU	E	464	48.096	-21.191	-9.796	1.00	23.25		C
	ANISOU	5041	C	LEU	E	464	2340	2827	3666	-306	696	-838	C
	ATOM	5042	O	LEU	E	464	47.759	-22.317	-9.404	1.00	23.03		O
	ANISOU	5042	O	LEU	E	464	2348	2749	3651	-145	614	-807	O
	ATOM	5043	N	PRO	E	465	48.325	-20.915	-11.110	1.00	24.19		N
45	ANISOU	5043	N	PRO	E	465	2442	2983	3768	-407	835	-868	N
	ATOM	5044	CA	PRO	E	465	48.340	-21.987	-12.127	1.00	25.02		C
	ANISOU	5044	CA	PRO	E	465	2532	3105	3868	-317	897	-912	C
	ATOM	5045	CB	PRO	E	465	48.816	-21.267	-13.393	1.00	25.21		C
	ANISOU	5045	CB	PRO	E	465	2515	3230	3834	-493	1061	-949	C
50	ATOM	5046	CG	PRO	E	465	48.349	-19.856	-13.215	1.00	25.13		C
	ANISOU	5046	CG	PRO	E	465	2621	3143	3785	-666	1072	-842	C
	ATOM	5047	CD	PRO	E	465	48.511	-19.577	-11.724	1.00	25.08		C
	ANISOU	5047	CD	PRO	E	465	2570	3111	3849	-623	944	-853	C
	ATOM	5048	C	PRO	E	465	49.235	-23.225	-11.820	1.00	27.35		C
55	ANISOU	5048	C	PRO	E	465	2659	3471	4261	-129	835	-1023	C
	ATOM	5049	O	PRO	E	465	48.830	-24.361	-12.130	1.00	26.54		O
	ANISOU	5049	O	PRO	E	465	2609	3290	4185	9	814	-1032	O
	ATOM	5050	N	ASP	E	466	50.418	-23.018	-11.230	1.00	29.43		N
	ANISOU	5050	N	ASP	E	466	2720	3869	4592	-119	795	-1113	N
60	ATOM	5051	CA	ASP	E	466	51.243	-24.148	-10.769	1.00	32.32		C
	ANISOU	5051	CA	ASP	E	466	2921	4288	5071	93	692	-1202	C
	ATOM	5052	CB	ASP	E	466	52.739	-23.769	-10.621	1.00	34.50		C
	ANISOU	5052	CB	ASP	E	466	2906	4779	5422	65	702	-1353	C
	ATOM	5053	CG	ASP	E	466	53.011	-22.725	-9.515	1.00	36.86		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5053	CG	ASP	E	466	3166	5140	5698	-48	612	-1323	C
	ATOM	5054	OD1	ASP	E	466	52.104	-22.374	-8.726	1.00	36.45		O
	ANISOU	5054	OD1	ASP	E	466	3303	4971	5575	-73	529	-1195	O
	ATOM	5055	OD2	ASP	E	466	54.164	-22.236	-9.438	1.00	40.79		O
5	ANISOU	5055	OD2	ASP	E	466	3426	5820	6251	-123	630	-1452	O
	ATOM	5056	C	ASP	E	466	50.683	-24.859	-9.498	1.00	32.48		C
	ANISOU	5056	C	ASP	E	466	3053	4182	5108	257	499	-1082	C
	ATOM	5057	O	ASP	E	466	51.316	-25.787	-8.955	1.00	34.03		O
	ANISOU	5057	O	ASP	E	466	3140	4392	5398	449	373	-1114	O
10	ATOM	5058	N	MSE	E	467	49.498	-24.434	-9.038	1.00	30.80		N
	ANISOU	5058	N	MSE	E	467	3052	3848	4801	183	475	-942	N
	ATOM	5059	CA	MSE	E	467	48.846	-25.020	-7.854	1.00	30.56		C
	ANISOU	5059	CA	MSE	E	467	3147	3717	4746	291	324	-814	C
	ATOM	5060	CB	MSE	E	467	48.762	-26.561	-7.943	1.00	31.92		C
15	ANISOU	5060	CB	MSE	E	467	3352	3770	5007	491	255	-788	C
	ATOM	5061	CG	MSE	E	467	47.737	-27.121	-8.964	1.00	31.71		C
	ANISOU	5061	CG	MSE	E	467	3477	3592	4981	477	356	-771	C
	ATOM	5062	SE	MSE	E	467	45.883	-26.433	-8.795	0.90	34.47		SE
	ANISOU	5062	SE	MSE	E	467	4082	3825	5191	312	402	-618	SE
20	ATOM	5063	CE	MSE	E	467	45.524	-26.906	-6.992	1.00	31.60		C
	ANISOU	5063	CE	MSE	E	467	3808	3411	4787	390	232	-460	C
	ATOM	5064	C	MSE	E	467	49.441	-24.599	-6.507	1.00	31.54		C
	ANISOU	5064	C	MSE	E	467	3189	3953	4840	301	184	-803	C
	ATOM	5065	O	MSE	E	467	49.044	-25.120	-5.466	1.00	31.93		O
25	ANISOU	5065	O	MSE	E	467	3332	3957	4844	388	53	-692	O
	ATOM	5066	N	THR	E	468	50.376	-23.644	-6.523	1.00	32.10		N
	ANISOU	5066	N	THR	E	468	3090	4182	4925	193	214	-918	N
	ATOM	5067	CA	THR	E	468	50.923	-23.058	-5.298	1.00	32.25		C
	ANISOU	5067	CA	THR	E	468	3023	4330	4900	163	86	-940	C
30	ATOM	5068	CB	THR	E	468	52.209	-22.245	-5.586	1.00	33.45		C
	ANISOU	5068	CB	THR	E	468	2925	4665	5118	52	132	-1109	C
	ATOM	5069	OG1	THR	E	468	53.248	-23.146	-5.974	1.00	36.74		O
	ANISOU	5069	OG1	THR	E	468	3131	5176	5652	209	99	-1199	O
	ATOM	5070	CG2	THR	E	468	52.708	-21.493	-4.365	1.00	35.62		C
35	ANISOU	5070	CG2	THR	E	468	3114	5077	5342	-16	5	-1160	C
	ATOM	5071	C	THR	E	468	49.829	-22.192	-4.665	1.00	30.54		C
	ANISOU	5071	C	THR	E	468	2997	4041	4564	33	99	-864	C
	ATOM	5072	O	THR	E	468	49.160	-21.413	-5.371	1.00	28.58		O
	ANISOU	5072	O	THR	E	468	2848	3706	4305	-106	236	-861	O
40	ATOM	5073	N	PRO	E	469	49.621	-22.346	-3.345	1.00	30.70		N
	ANISOU	5073	N	PRO	E	469	3072	4103	4490	85	-46	-802	N
	ATOM	5074	CA	PRO	E	469	48.656	-21.488	-2.669	1.00	30.08		C
	ANISOU	5074	CA	PRO	E	469	3144	3989	4298	-36	-24	-774	C
	ATOM	5075	CB	PRO	E	469	48.508	-22.138	-1.284	1.00	31.30		C
45	ANISOU	5075	CB	PRO	E	469	3355	4213	4324	65	-191	-683	C
	ATOM	5076	CG	PRO	E	469	49.779	-22.851	-1.077	1.00	33.03		C
	ANISOU	5076	CG	PRO	E	469	3396	4554	4601	203	-334	-705	C
	ATOM	5077	CD	PRO	E	469	50.246	-23.308	-2.421	1.00	32.56		C
	ANISOU	5077	CD	PRO	E	469	3238	4425	4708	260	-238	-754	C
50	ATOM	5078	C	PRO	E	469	49.205	-20.071	-2.547	1.00	30.36		C
	ANISOU	5078	C	PRO	E	469	3079	4112	4345	-212	15	-921	C
	ATOM	5079	O	PRO	E	469	50.414	-19.874	-2.451	1.00	32.17		O
	ANISOU	5079	O	PRO	E	469	3111	4488	4626	-230	-38	-1031	O
	ATOM	5080	N	SER	E	470	48.312	-19.099	-2.559	1.00	28.84		N
55	ANISOU	5080	N	SER	E	470	3014	3820	4123	-340	103	-932	N
	ATOM	5081	CA	SER	E	470	48.702	-17.729	-2.427	1.00	29.49		C
	ANISOU	5081	CA	SER	E	470	3037	3929	4238	-515	142	-1067	C
	ATOM	5082	CB	SER	E	470	48.867	-17.093	-3.809	1.00	28.97		C
	ANISOU	5082	CB	SER	E	470	2956	3760	4289	-635	295	-1082	C
60	ATOM	5083	OG	SER	E	470	49.175	-15.713	-3.679	1.00	29.55		O
	ANISOU	5083	OG	SER	E	470	3000	3813	4414	-824	336	-1197	O
	ATOM	5084	C	SER	E	470	47.631	-16.997	-1.653	1.00	28.74		C
	ANISOU	5084	C	SER	E	470	3092	3763	4065	-573	150	-1083	C
	ATOM	5085	O	SER	E	470	46.443	-17.255	-1.843	1.00	26.47		O

# ES 2 454 773 T3

		ANISOU	5085	O	SER	E	470	2958	3353	3748	-526	203	-985	O
		ATOM	5086	N	THR	E	471	48.069	-16.067	-0.807	1.00	30.16		N
		ANISOU	5086	N	THR	E	471	3210	4030	4222	-681	102	-1231	N
		ATOM	5087	CA	THR	E	471	47.155	-15.195	-0.063	1.00	30.86		C
5		ANISOU	5087	CA	THR	E	471	3415	4056	4254	-749	123	-1307	C
		ATOM	5088	CB	THR	E	471	47.566	-15.088	1.420	1.00	32.72		C
		ANISOU	5088	CB	THR	E	471	3592	4500	4342	-760	-10	-1427	C
		ATOM	5089	OG1	THR	E	471	48.951	-14.718	1.504	1.00	37.22		O
		ANISOU	5089	OG1	THR	E	471	3970	5205	4968	-843	-80	-1556	O
10		ATOM	5090	CG2	THR	E	471	47.380	-16.453	2.138	1.00	32.82		C
		ANISOU	5090	CG2	THR	E	471	3640	4649	4181	-599	-122	-1281	C
		ATOM	5091	C	THR	E	471	47.026	-13.797	-0.691	1.00	30.99		C
		ANISOU	5091	C	THR	E	471	3462	3895	4418	-908	233	-1402	C
		ATOM	5092	O	THR	E	471	46.403	-12.895	-0.095	1.00	32.41		O
15		ANISOU	5092	O	THR	E	471	3716	4003	4595	-969	251	-1512	O
		ATOM	5093	N	GLU	E	472	47.585	-13.628	-1.893	1.00	30.24		N
		ANISOU	5093	N	GLU	E	472	3317	3723	4448	-974	310	-1358	N
		ATOM	5094	CA	GLU	E	472	47.662	-12.324	-2.573	1.00	30.68		C
		ANISOU	5094	CA	GLU	E	472	3405	3604	4648	-1148	408	-1413	C
20		ATOM	5095	CB	GLU	E	472	49.108	-11.861	-2.654	1.00	32.44		C
		ANISOU	5095	CB	GLU	E	472	3444	3937	4945	-1303	403	-1532	C
		ATOM	5096	CG	GLU	E	472	49.779	-11.668	-1.290	1.00	37.76		C
		ANISOU	5096	CG	GLU	E	472	3990	4801	5555	-1337	276	-1720	C
		ATOM	5097	CD	GLU	E	472	51.175	-12.305	-1.215	1.00	43.37		C
25		ANISOU	5097	CD	GLU	E	472	4460	5762	6256	-1331	199	-1771	C
		ATOM	5098	OE1	GLU	E	472	52.173	-11.548	-1.139	1.00	44.91		O
		ANISOU	5098	OE1	GLU	E	472	4502	6025	6538	-1509	199	-1925	O
		ATOM	5099	OE2	GLU	E	472	51.270	-13.569	-1.236	1.00	42.62		O
		ANISOU	5099	OE2	GLU	E	472	4322	5787	6083	-1147	136	-1663	O
30		ATOM	5100	C	GLU	E	472	47.062	-12.382	-3.974	1.00	28.59		C
		ANISOU	5100	C	GLU	E	472	3251	3164	4447	-1137	517	-1248	C
		ATOM	5101	O	GLU	E	472	46.385	-11.449	-4.397	1.00	28.12		O
		ANISOU	5101	O	GLU	E	472	3316	2897	4471	-1205	576	-1225	O
		ATOM	5102	N	MSE	E	473	47.284	-13.494	-4.682	1.00	27.02		N
35		ANISOU	5102	N	MSE	E	473	3012	3048	4206	-1042	532	-1137	N
		ATOM	5103	CA	MSE	E	473	46.791	-13.651	-6.073	1.00	25.54		C
		ANISOU	5103	CA	MSE	E	473	2919	2739	4045	-1038	629	-993	C
		ATOM	5104	CB	MSE	E	473	47.927	-13.574	-7.115	1.00	25.96		C
		ANISOU	5104	CB	MSE	E	473	2858	2862	4144	-1159	717	-991	C
40		ATOM	5105	CG	MSE	E	473	48.808	-12.339	-7.049	1.00	27.29		C
		ANISOU	5105	CG	MSE	E	473	2952	3011	4406	-1379	758	-1091	C
		ATOM	5106	SE	MSE	E	473	47.910	-10.662	-7.515	0.90	31.81		SE
		ANISOU	5106	SE	MSE	E	473	3749	3250	5087	-1541	823	-1021	SE
		ATOM	5107	CE	MSE	E	473	47.552	-10.998	-9.390	1.00	22.17		C
45		ANISOU	5107	CE	MSE	E	473	2643	1969	3812	-1555	942	-793	C
		ATOM	5108	C	MSE	E	473	46.107	-14.980	-6.236	1.00	23.39		C
		ANISOU	5108	C	MSE	E	473	2695	2501	3691	-856	603	-890	C
		ATOM	5109	O	MSE	E	473	46.393	-15.922	-5.503	1.00	22.98		O
		ANISOU	5109	O	MSE	E	473	2572	2580	3579	-744	522	-910	O
50		ATOM	5110	N	SER	E	474	45.225	-15.055	-7.218	1.00	21.86		N
		ANISOU	5110	N	SER	E	474	2624	2183	3498	-833	662	-776	N
		ATOM	5111	CA	SER	E	474	44.566	-16.309	-7.532	1.00	21.14		C
		ANISOU	5111	CA	SER	E	474	2578	2108	3346	-687	648	-690	C
		ATOM	5112	CB	SER	E	474	43.337	-16.499	-6.641	1.00	19.96		C
55		ANISOU	5112	CB	SER	E	474	2523	1903	3156	-597	594	-671	C
		ATOM	5113	OG	SER	E	474	42.904	-17.839	-6.691	1.00	17.66		O
		ANISOU	5113	OG	SER	E	474	2253	1645	2812	-475	569	-603	O
		ATOM	5114	C	SER	E	474	44.153	-16.398	-9.009	1.00	21.27		C
		ANISOU	5114	C	SER	E	474	2672	2053	3359	-708	727	-592	C
60		ATOM	5115	O	SER	E	474	43.946	-15.384	-9.652	1.00	20.89		O
		ANISOU	5115	O	SER	E	474	2694	1900	3342	-814	775	-549	O
		ATOM	5116	N	MSE	E	475	44.041	-17.620	-9.536	1.00	21.43		N
		ANISOU	5116	N	MSE	E	475	2683	2123	3336	-608	732	-558	N
		ATOM	5117	CA	MSE	E	475	43.337	-17.808	-10.790	1.00	22.35		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5117	CA	MSE	E	475	2894	2181	3417	-609	783	-475	C
	ATOM	5118	CB	MSE	E	475	43.262	-19.297	-11.154	1.00	21.85		C
	ANISOU	5118	CB	MSE	E	475	2809	2173	3321	-490	776	-482	C
	ATOM	5119	CG	MSE	E	475	44.593	-19.830	-11.643	1.00	24.48		C
5	ANISOU	5119	CG	MSE	E	475	3003	2637	3663	-493	828	-563	C
	ATOM	5120	SE	MSE	E	475	44.487	-21.578	-12.470	0.90	25.13		SE
	ANISOU	5120	SE	MSE	E	475	3073	2746	3730	-353	842	-603	SE
	ATOM	5121	CE	MSE	E	475	44.118	-22.622	-10.880	1.00	14.68		C
10	ANISOU	5121	CE	MSE	E	475	1759	1354	2463	-188	701	-580	C
	ATOM	5122	C	MSE	E	475	41.951	-17.191	-10.626	1.00	21.56		C
	ANISOU	5122	C	MSE	E	475	2925	1942	3326	-596	747	-409	C
	ATOM	5123	O	MSE	E	475	41.300	-17.398	-9.596	1.00	20.22		O
	ANISOU	5123	O	MSE	E	475	2769	1750	3164	-523	691	-430	O
	ATOM	5124	N	ARG	E	476	41.543	-16.382	-11.605	1.00	22.84		N
15	ANISOU	5124	N	ARG	E	476	3174	2018	3486	-669	779	-331	N
	ATOM	5125	CA	ARG	E	476	40.252	-15.645	-11.593	1.00	23.43		C
	ANISOU	5125	CA	ARG	E	476	3359	1948	3596	-642	734	-269	C
	ATOM	5126	CB	ARG	E	476	40.013	-14.999	-12.975	1.00	24.07		C
20	ANISOU	5126	CB	ARG	E	476	3538	1961	3647	-714	755	-147	C
	ATOM	5127	CG	ARG	E	476	38.593	-14.426	-13.168	1.00	27.79		C
	ANISOU	5127	CG	ARG	E	476	4110	2292	4159	-646	680	-70	C
	ATOM	5128	CD	ARG	E	476	38.209	-14.075	-14.619	1.00	28.50		C
	ANISOU	5128	CD	ARG	E	476	4305	2345	4177	-684	665	79	C
	ATOM	5129	NE	ARG	E	476	38.636	-14.995	-15.699	1.00	32.45		N
25	ANISOU	5129	NE	ARG	E	476	4797	3003	4528	-722	716	104	N
	ATOM	5130	CZ	ARG	E	476	37.899	-15.993	-16.202	1.00	31.12		C
	ANISOU	5130	CZ	ARG	E	476	4629	2913	4282	-642	682	96	C
	ATOM	5131	NH1	ARG	E	476	36.693	-16.294	-15.685	1.00	30.33		N
30	ANISOU	5131	NH1	ARG	E	476	4521	2762	4240	-526	601	71	N
	ATOM	5132	NH2	ARG	E	476	38.385	-16.718	-17.191	1.00	25.61		N
	ANISOU	5132	NH2	ARG	E	476	3925	2354	3452	-687	739	89	N
	ATOM	5133	C	ARG	E	476	39.015	-16.489	-11.142	1.00	21.83		C
	ANISOU	5133	C	ARG	E	476	3173	1741	3380	-513	681	-273	C
35	ATOM	5134	O	ARG	E	476	38.679	-17.503	-11.745	1.00	21.04		O
	ANISOU	5134	O	ARG	E	476	3079	1693	3224	-465	681	-247	O
	ATOM	5135	N	GLY	E	477	38.372	-16.052	-10.058	1.00	21.70		N
	ANISOU	5135	N	GLY	E	477	3157	1672	3416	-473	646	-324	N
	ATOM	5136	CA	GLY	E	477	37.207	-16.716	-9.484	1.00	20.09		C
40	ANISOU	5136	CA	GLY	E	477	2953	1479	3200	-382	617	-338	C
	ATOM	5137	C	GLY	E	477	37.443	-18.027	-8.755	1.00	19.41		C
	ANISOU	5137	C	GLY	E	477	2821	1499	3053	-341	617	-363	C
	ATOM	5138	O	GLY	E	477	36.471	-18.609	-8.296	1.00	19.64		O
	ANISOU	5138	O	GLY	E	477	2856	1537	3067	-294	607	-361	O
45	ATOM	5139	N	ILE	E	478	38.696	-18.502	-8.647	1.00	18.91		N
	ANISOU	5139	N	ILE	E	478	2708	1514	2965	-357	623	-381	N
	ATOM	5140	CA	ILE	E	478	39.017	-19.810	-8.023	1.00	17.77		C
	ANISOU	5140	CA	ILE	E	478	2530	1443	2777	-297	599	-380	C
	ATOM	5141	CB	ILE	E	478	40.039	-20.648	-8.855	1.00	18.55		C
50	ANISOU	5141	CB	ILE	E	478	2584	1586	2878	-277	612	-379	C
	ATOM	5142	CG1	ILE	E	478	39.751	-20.616	-10.374	1.00	17.27		C
	ANISOU	5142	CG1	ILE	E	478	2459	1391	2711	-306	659	-354	C
	ATOM	5143	CD1	ILE	E	478	38.418	-21.271	-10.824	1.00	13.13		C
	ANISOU	5143	CD1	ILE	E	478	2003	811	2174	-270	646	-315	C
55	ATOM	5144	CG2	ILE	E	478	40.182	-22.098	-8.267	1.00	18.35		C
	ANISOU	5144	CG2	ILE	E	478	2547	1581	2843	-186	567	-361	C
	ATOM	5145	C	ILE	E	478	39.616	-19.651	-6.599	1.00	18.69		C
	ANISOU	5145	C	ILE	E	478	2602	1637	2863	-298	561	-430	C
	ATOM	5146	O	ILE	E	478	40.569	-18.901	-6.395	1.00	18.45		O
60	ANISOU	5146	O	ILE	E	478	2515	1647	2850	-348	556	-490	O
	ATOM	5147	N	ARG	E	479	39.035	-20.351	-5.617	1.00	18.39		N
	ANISOU	5147	N	ARG	E	479	2589	1632	2767	-257	533	-405	N
	ATOM	5148	CA	ARG	E	479	39.554	-20.346	-4.253	1.00	19.06		C
	ANISOU	5148	CA	ARG	E	479	2644	1820	2777	-256	483	-435	C
	ATOM	5149	CB	ARG	E	479	38.638	-19.533	-3.312	1.00	19.09		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5149	CB	ARG	E	479	2674	1845	2733	-297	507	-498	C
	ATOM	5150	CG	ARG	E	479	38.471	-18.073	-3.712	1.00	20.34		C
	ANISOU	5150	CG	ARG	E	479	2824	1925	2979	-348	545	-592	C
	ATOM	5151	CD	ARG	E	479	39.752	-17.232	-3.507	1.00	22.85		C
5	ANISOU	5151	CD	ARG	E	479	3081	2279	3322	-408	517	-680	C
	ATOM	5152	NE	ARG	E	479	39.500	-15.800	-3.765	1.00	25.19		N
	ANISOU	5152	NE	ARG	E	479	3393	2459	3718	-468	552	-765	N
	ATOM	5153	CZ	ARG	E	479	39.487	-15.222	-4.979	1.00	27.21		C
	ANISOU	5153	CZ	ARG	E	479	3679	2582	4078	-498	582	-718	C
10	ATOM	5154	NH1	ARG	E	479	39.709	-15.928	-6.090	1.00	26.37		N
	ANISOU	5154	NH1	ARG	E	479	3581	2470	3970	-482	595	-610	N
	ATOM	5155	NH2	ARG	E	479	39.248	-13.924	-5.085	1.00	26.41		N
	ANISOU	5155	NH2	ARG	E	479	3609	2347	4078	-547	597	-780	N
	ATOM	5156	C	ARG	E	479	39.697	-21.757	-3.727	1.00	19.49		C
15	ANISOU	5156	C	ARG	E	479	2720	1912	2775	-189	429	-345	C
	ATOM	5157	O	ARG	E	479	38.976	-22.661	-4.158	1.00	18.74		O
	ANISOU	5157	O	ARG	E	479	2681	1743	2697	-162	449	-271	O
	ATOM	5158	N	VAL	E	480	40.609	-21.940	-2.772	1.00	20.82		N
	ANISOU	5158	N	VAL	E	480	2847	2187	2876	-166	349	-348	N
20	ATOM	5159	CA	VAL	E	480	40.767	-23.248	-2.116	1.00	21.96		C
	ANISOU	5159	CA	VAL	E	480	3031	2353	2960	-92	271	-232	C
	ATOM	5160	CB	VAL	E	480	42.207	-23.838	-2.322	1.00	22.03		C
	ANISOU	5160	CB	VAL	E	480	2948	2393	3028	3	178	-229	C
	ATOM	5161	CG1	VAL	E	480	42.429	-25.077	-1.472	1.00	22.81		C
25	ANISOU	5161	CG1	VAL	E	480	3098	2500	3069	95	63	-94	C
	ATOM	5162	CG2	VAL	E	480	42.460	-24.160	-3.772	1.00	20.19		C
	ANISOU	5162	CG2	VAL	E	480	2677	2061	2932	38	234	-261	C
	ATOM	5163	C	VAL	E	480	40.412	-23.122	-0.620	1.00	23.54		C
	ANISOU	5163	C	VAL	E	480	3277	2674	2994	-131	235	-206	C
30	ATOM	5164	O	VAL	E	480	40.953	-22.280	0.097	1.00	24.05		O
	ANISOU	5164	O	VAL	E	480	3287	2864	2988	-167	198	-300	O
	ATOM	5165	N	SER	E	481	39.492	-23.966	-0.161	1.00	24.81		N
	ANISOU	5165	N	SER	E	481	3538	2808	3083	-141	253	-88	N
	ATOM	5166	CA	SER	E	481	39.093	-24.015	1.249	1.00	26.08		C
35	ANISOU	5166	CA	SER	E	481	3757	3104	3048	-193	236	-40	C
	ATOM	5167	CB	SER	E	481	37.836	-24.872	1.399	1.00	25.78		C
	ANISOU	5167	CB	SER	E	481	3824	3003	2969	-243	310	83	C
	ATOM	5168	OG	SER	E	481	37.426	-24.964	2.750	1.00	25.77		O
	ANISOU	5168	OG	SER	E	481	3886	3155	2752	-316	315	141	O
40	ATOM	5169	C	SER	E	481	40.194	-24.566	2.157	1.00	28.89		C
	ANISOU	5169	C	SER	E	481	4114	3570	3294	-131	82	47	C
	ATOM	5170	O	SER	E	481	40.829	-25.579	1.858	1.00	29.34		O
	ANISOU	5170	O	SER	E	481	4181	3543	3423	-30	-9	161	O
	ATOM	5171	N	LYS	E	482	40.406	-23.902	3.280	1.00	31.33		N
45	ANISOU	5171	N	LYS	E	482	4407	4070	3426	-183	44	-16	N
	ATOM	5172	CA	LYS	E	482	41.264	-24.437	4.320	1.00	35.34		C
	ANISOU	5172	CA	LYS	E	482	4931	4720	3776	-135	-119	86	C
	ATOM	5173	CB	LYS	E	482	42.004	-23.295	5.021	1.00	36.93		C
	ANISOU	5173	CB	LYS	E	482	5031	5127	3875	-177	-179	-95	C
50	ATOM	5174	CG	LYS	E	482	43.111	-22.672	4.207	1.00	38.22		C
	ANISOU	5174	CG	LYS	E	482	5038	5259	4224	-134	-219	-240	C
	ATOM	5175	CD	LYS	E	482	43.698	-21.521	4.982	1.00	44.98		C
	ANISOU	5175	CD	LYS	E	482	5803	6309	4977	-211	-267	-433	C
	ATOM	5176	CE	LYS	E	482	45.223	-21.561	4.968	1.00	47.96		C
55	ANISOU	5176	CE	LYS	E	482	6028	6783	5410	-142	-430	-476	C
	ATOM	5177	NZ	LYS	E	482	45.777	-20.298	5.551	1.00	50.79		N
	ANISOU	5177	NZ	LYS	E	482	6280	7307	5710	-250	-458	-708	N
	ATOM	5178	C	LYS	E	482	40.480	-25.277	5.345	1.00	37.85		C
	ANISOU	5178	C	LYS	E	482	5402	5097	3882	-186	-120	278	C
60	ATOM	5179	O	LYS	E	482	41.059	-25.722	6.324	1.00	40.42		O
	ANISOU	5179	O	LYS	E	482	5770	5557	4030	-157	-263	396	O
	ATOM	5180	N	MSE	E	483	39.178	-25.477	5.113	1.00	38.08		N
	ANISOU	5180	N	MSE	E	483	5507	5039	3923	-271	35	313	N
	ATOM	5181	CA	MSE	E	483	38.319	-26.309	5.975	1.00	41.13		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5181	CA	MSE	E	483	6038	5469	4121	-357	73	501	C
	ATOM	5182	CB	MSE	E	483	36.882	-25.754	6.064	1.00	40.37		C
	ANISOU	5182	CB	MSE	E	483	5941	5421	3976	-498	279	393	C
	ATOM	5183	CG	MSE	E	483	36.761	-24.265	6.345	1.00	40.01		C
5	ANISOU	5183	CG	MSE	E	483	5787	5531	3882	-542	350	123	C
	ATOM	5184	SE	MSE	E	483	37.684	-23.720	7.991	0.90	48.53		SE
	ANISOU	5184	SE	MSE	E	483	6871	6944	4625	-576	224	65	SE
	ATOM	5185	CE	MSE	E	483	36.796	-24.873	9.310	1.00	39.30		C
10	ANISOU	5185	CE	MSE	E	483	5885	5939	3108	-711	273	332	C
	ATOM	5186	C	MSE	E	483	38.246	-27.706	5.373	1.00	42.30		C
	ANISOU	5186	C	MSE	E	483	6281	5381	4412	-297	34	716	C
	ATOM	5187	O	MSE	E	483	37.810	-27.893	4.207	1.00	41.41		O
	ANISOU	5187	O	MSE	E	483	6140	5074	4520	-280	115	669	O
	ATOM	5188	OXT	MSE	E	483	38.610	-28.668	6.048	1.00	45.09		O
15	ANISOU	5188	OXT	MSE	E	483	6745	5727	4660	-266	-87	937	O
	ATOM	5189	N	SER	F	322	34.011	6.452	-60.832	1.00	64.98		N
	ANISOU	5189	N	SER	F	322	10039	10556	4093	-1803	691	1251	N
	ATOM	5190	CA	SER	F	322	32.816	6.735	-59.979	1.00	62.59		C
20	ANISOU	5190	CA	SER	F	322	9734	10002	4046	-1536	361	1309	C
	ATOM	5191	CB	SER	F	322	32.604	8.243	-59.821	1.00	64.65		C
	ANISOU	5191	CB	SER	F	322	10337	9931	4296	-1631	298	1564	C
	ATOM	5192	OG	SER	F	322	33.389	8.747	-58.754	1.00	65.13		O
	ANISOU	5192	OG	SER	F	322	10229	9915	4604	-1806	456	1515	O
	ATOM	5193	C	SER	F	322	31.562	6.093	-60.548	1.00	61.62		C
25	ANISOU	5193	C	SER	F	322	9683	9900	3831	-1253	68	1295	C
	ATOM	5194	O	SER	F	322	31.304	6.186	-61.745	1.00	64.33		O
	ANISOU	5194	O	SER	F	322	10330	10282	3832	-1271	13	1407	O
	ATOM	5195	N	PHE	F	323	30.793	5.447	-59.672	1.00	57.78		N
30	ANISOU	5195	N	PHE	F	323	8921	9391	3643	-1013	-115	1152	N
	ATOM	5196	CA	PHE	F	323	29.540	4.774	-60.034	1.00	56.60		C
	ANISOU	5196	CA	PHE	F	323	8754	9271	3481	-759	-400	1094	C
	ATOM	5197	CB	PHE	F	323	29.803	3.472	-60.817	1.00	56.49		C
	ANISOU	5197	CB	PHE	F	323	8646	9535	3285	-767	-321	906	C
	ATOM	5198	CG	PHE	F	323	30.640	2.458	-60.073	1.00	53.82		C
35	ANISOU	5198	CG	PHE	F	323	7956	9345	3148	-799	-105	669	C
	ATOM	5199	CD1	PHE	F	323	30.039	1.474	-59.298	1.00	49.66		C
	ANISOU	5199	CD1	PHE	F	323	7167	8820	2880	-621	-219	487	C
	ATOM	5200	CE1	PHE	F	323	30.800	0.533	-58.628	1.00	48.33		C
40	ANISOU	5200	CE1	PHE	F	323	6732	8755	2877	-621	-52	290	C
	ATOM	5201	CZ	PHE	F	323	32.182	0.565	-58.719	1.00	49.24		C
	ANISOU	5201	CZ	PHE	F	323	6772	9006	2930	-778	220	248	C
	ATOM	5202	CE2	PHE	F	323	32.796	1.537	-59.491	1.00	52.46		C
	ANISOU	5202	CE2	PHE	F	323	7386	9446	3100	-985	365	404	C
	ATOM	5203	CD2	PHE	F	323	32.028	2.476	-60.167	1.00	54.43		C
45	ANISOU	5203	CD2	PHE	F	323	7968	9559	3154	-1005	210	625	C
	ATOM	5204	C	PHE	F	323	28.693	4.508	-58.789	1.00	53.34		C
	ANISOU	5204	C	PHE	F	323	8069	8746	3453	-555	-559	984	C
	ATOM	5205	O	PHE	F	323	28.952	5.075	-57.735	1.00	52.04		O
50	ANISOU	5205	O	PHE	F	323	7823	8434	3515	-588	-490	1003	O
	ATOM	5206	N	SER	F	324	27.717	3.610	-58.913	1.00	52.31		N
	ANISOU	5206	N	SER	F	324	7801	8693	3380	-371	-751	850	N
	ATOM	5207	CA	SER	F	324	26.659	3.430	-57.923	1.00	50.15		C
	ANISOU	5207	CA	SER	F	324	7311	8311	3432	-183	-917	760	C
	ATOM	5208	CB	SER	F	324	25.461	4.292	-58.342	1.00	52.27		C
55	ANISOU	5208	CB	SER	F	324	7742	8435	3685	-5	-1217	905	C
	ATOM	5209	OG	SER	F	324	24.546	4.524	-57.289	1.00	51.91		O
	ANISOU	5209	OG	SER	F	324	7504	8244	3975	161	-1325	848	O
	ATOM	5210	C	SER	F	324	26.254	1.948	-57.864	1.00	48.44		C
60	ANISOU	5210	C	SER	F	324	6852	8258	3293	-116	-945	520	C
	ATOM	5211	O	SER	F	324	26.075	1.322	-58.895	1.00	50.04		O
	ANISOU	5211	O	SER	F	324	7125	8610	3280	-114	-1019	464	O
	ATOM	5212	N	PHE	F	325	26.129	1.389	-56.660	1.00	45.78		N
	ANISOU	5212	N	PHE	F	325	6271	7878	3245	-79	-878	379	N
	ATOM	5213	CA	PHE	F	325	25.670	-0.004	-56.478	1.00	43.79		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5213	CA	PHE	F	325	5824	7722	3091	-32	-896	158	C
	ATOM	5214	CB	PHE	F	325	26.785	-1.009	-56.819	1.00	43.32		C
	ANISOU	5214	CB	PHE	F	325	5751	7815	2894	-128	-702	38	C
	ATOM	5215	CG	PHE	F	325	26.407	-2.453	-56.596	1.00	42.81		C
5	ANISOU	5215	CG	PHE	F	325	5543	7795	2927	-86	-705	-186	C
	ATOM	5216	CD1	PHE	F	325	25.471	-3.087	-57.424	1.00	45.16		C
	ANISOU	5216	CD1	PHE	F	325	5857	8167	3136	-52	-875	-288	C
	ATOM	5217	CE1	PHE	F	325	25.112	-4.424	-57.209	1.00	44.54		C
10	ANISOU	5217	CE1	PHE	F	325	5674	8097	3153	-49	-865	-503	C
	ATOM	5218	CZ	PHE	F	325	25.706	-5.150	-56.167	1.00	42.37		C
	ANISOU	5218	CZ	PHE	F	325	5311	7741	3047	-53	-689	-594	C
	ATOM	5219	CE2	PHE	F	325	26.651	-4.536	-55.348	1.00	40.54		C
	ANISOU	5219	CE2	PHE	F	325	5059	7456	2890	-58	-547	-487	C
	ATOM	5220	CD2	PHE	F	325	26.989	-3.188	-55.561	1.00	41.44		C
15	ANISOU	5220	CD2	PHE	F	325	5244	7577	2924	-88	-552	-295	C
	ATOM	5221	C	PHE	F	325	25.132	-0.224	-55.053	1.00	41.64		C
	ANISOU	5221	C	PHE	F	325	5353	7325	3145	26	-873	66	C
	ATOM	5222	O	PHE	F	325	25.807	0.091	-54.067	1.00	39.51		O
	ANISOU	5222	O	PHE	F	325	5054	6968	2990	-20	-727	92	O
20	ATOM	5223	N	GLY	F	326	23.906	-0.747	-54.969	1.00	41.53		N
	ANISOU	5223	N	GLY	F	326	5205	7311	3264	109	-1015	-51	N
	ATOM	5224	CA	GLY	F	326	23.229	-1.041	-53.700	1.00	39.72		C
	ANISOU	5224	CA	GLY	F	326	4794	6976	3322	140	-970	-158	C
	ATOM	5225	C	GLY	F	326	23.119	0.104	-52.706	1.00	39.23		C
25	ANISOU	5225	C	GLY	F	326	4733	6746	3427	187	-931	-57	C
	ATOM	5226	O	GLY	F	326	23.248	-0.105	-51.503	1.00	37.01		O
	ANISOU	5226	O	GLY	F	326	4384	6376	3302	155	-790	-119	O
	ATOM	5227	N	GLY	F	327	22.887	1.309	-53.220	1.00	40.74		N
	ANISOU	5227	N	GLY	F	327	5040	6875	3563	264	-1061	99	N
30	ATOM	5228	CA	GLY	F	327	22.741	2.501	-52.404	1.00	41.28		C
	ANISOU	5228	CA	GLY	F	327	5152	6754	3780	325	-1040	192	C
	ATOM	5229	C	GLY	F	327	24.066	3.126	-51.996	1.00	40.95		C
	ANISOU	5229	C	GLY	F	327	5272	6631	3655	195	-873	305	C
	ATOM	5230	O	GLY	F	327	24.101	4.024	-51.162	1.00	40.80		O
35	ANISOU	5230	O	GLY	F	327	5305	6440	3756	207	-821	353	O
	ATOM	5231	N	PHE	F	328	25.160	2.646	-52.578	1.00	40.57		N
	ANISOU	5231	N	PHE	F	328	5289	6716	3411	64	-781	323	N
	ATOM	5232	CA	PHE	F	328	26.480	3.152	-52.254	1.00	40.14		C
	ANISOU	5232	CA	PHE	F	328	5327	6634	3289	-87	-619	398	C
40	ATOM	5233	CB	PHE	F	328	27.337	2.054	-51.593	1.00	38.59		C
	ANISOU	5233	CB	PHE	F	328	4985	6548	3129	-161	-471	255	C
	ATOM	5234	CG	PHE	F	328	26.937	1.747	-50.172	1.00	36.26		C
	ANISOU	5234	CG	PHE	F	328	4584	6146	3047	-114	-436	152	C
	ATOM	5235	CD1	PHE	F	328	27.509	2.439	-49.118	1.00	35.56		C
45	ANISOU	5235	CD1	PHE	F	328	4532	5943	3037	-180	-359	178	C
	ATOM	5236	CE1	PHE	F	328	27.135	2.179	-47.794	1.00	35.95		C
	ANISOU	5236	CE1	PHE	F	328	4532	5891	3238	-147	-318	85	C
	ATOM	5237	CZ	PHE	F	328	26.175	1.205	-47.525	1.00	35.59		C
	ANISOU	5237	CZ	PHE	F	328	4392	5853	3279	-67	-328	-30	C
50	ATOM	5238	CE2	PHE	F	328	25.579	0.501	-48.591	1.00	35.31		C
	ANISOU	5238	CE2	PHE	F	328	4292	5930	3195	-16	-406	-67	C
	ATOM	5239	CD2	PHE	F	328	25.972	0.772	-49.896	1.00	36.57		C
	ANISOU	5239	CD2	PHE	F	328	4509	6196	3191	-31	-472	21	C
	ATOM	5240	C	PHE	F	328	27.164	3.747	-53.487	1.00	42.14		C
55	ANISOU	5240	C	PHE	F	328	5784	6945	3284	-188	-612	551	C
	ATOM	5241	O	PHE	F	328	27.123	3.162	-54.574	1.00	43.04		O
	ANISOU	5241	O	PHE	F	328	5930	7212	3211	-186	-657	538	O
	ATOM	5242	N	THR	F	329	27.753	4.931	-53.308	1.00	43.06		N
	ANISOU	5242	N	THR	F	329	6063	6922	3376	-296	-547	691	N
60	ATOM	5243	CA	THR	F	329	28.590	5.562	-54.324	1.00	44.99		C
	ANISOU	5243	CA	THR	F	329	6526	7199	3369	-463	-471	842	C
	ATOM	5244	CB	THR	F	329	28.582	7.124	-54.212	1.00	47.13		C
	ANISOU	5244	CB	THR	F	329	7067	7201	3639	-520	-492	1036	C
	ATOM	5245	OG1	THR	F	329	27.239	7.622	-54.309	1.00	47.99		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5245	OG1	THR	F	329	7274	7135	3825	-281	-725	1105	O
	ATOM	5246	CG2	THR	F	329	29.435	7.782	-55.313	1.00	49.33		C
	ANISOU	5246	CG2	THR	F	329	7622	7494	3626	-739	-385	1209	C
	ATOM	5247	C	THR	F	329	30.011	5.037	-54.169	1.00	44.33		C
5	ANISOU	5247	C	THR	F	329	6307	7296	3238	-659	-242	750	C
	ATOM	5248	O	THR	F	329	30.661	5.270	-53.164	1.00	43.50		O
	ANISOU	5248	O	THR	F	329	6103	7145	3278	-750	-146	702	O
	ATOM	5249	N	PHE	F	330	30.485	4.299	-55.160	1.00	45.43		N
10	ANISOU	5249	N	PHE	F	330	6430	7653	3179	-712	-166	704	N
	ATOM	5250	CA	PHE	F	330	31.856	3.815	-55.144	1.00	45.51		C
	ANISOU	5250	CA	PHE	F	330	6284	7859	3150	-873	57	599	C
	ATOM	5251	CB	PHE	F	330	31.974	2.448	-55.811	1.00	44.24		C
	ANISOU	5251	CB	PHE	F	330	5998	7924	2886	-793	95	438	C
	ATOM	5252	CG	PHE	F	330	31.265	1.341	-55.083	1.00	41.56		C
15	ANISOU	5252	CG	PHE	F	330	5484	7570	2737	-593	-24	281	C
	ATOM	5253	CD1	PHE	F	330	31.970	0.227	-54.643	1.00	39.01		C
	ANISOU	5253	CD1	PHE	F	330	4950	7373	2501	-551	72	97	C
	ATOM	5254	CE1	PHE	F	330	31.319	-0.811	-53.999	1.00	36.87		C
20	ANISOU	5254	CE1	PHE	F	330	4580	7051	2379	-392	-23	-32	C
	ATOM	5255	CZ	PHE	F	330	29.941	-0.742	-53.767	1.00	36.29		C
	ANISOU	5255	CZ	PHE	F	330	4566	6835	2390	-298	-191	0	C
	ATOM	5256	CE2	PHE	F	330	29.229	0.364	-54.190	1.00	37.65		C
	ANISOU	5256	CE2	PHE	F	330	4887	6913	2505	-313	-297	159	C
	ATOM	5257	CD2	PHE	F	330	29.886	1.396	-54.852	1.00	39.87		C
25	ANISOU	5257	CD2	PHE	F	330	5319	7211	2619	-446	-227	310	C
	ATOM	5258	C	PHE	F	330	32.713	4.818	-55.875	1.00	48.65		C
	ANISOU	5258	C	PHE	F	330	6873	8264	3348	-1124	219	745	C
	ATOM	5259	O	PHE	F	330	32.259	5.448	-56.807	1.00	50.59		O
30	ANISOU	5259	O	PHE	F	330	7408	8428	3384	-1150	160	912	O
	ATOM	5260	N	LYS	F	331	33.946	4.979	-55.416	1.00	50.04		N
	ANISOU	5260	N	LYS	F	331	6892	8531	3590	-1318	414	680	N
	ATOM	5261	CA	LYS	F	331	34.964	5.753	-56.116	1.00	53.68		C
	ANISOU	5261	CA	LYS	F	331	7471	9055	3869	-1620	639	769	C
35	ATOM	5262	CB	LYS	F	331	35.231	7.083	-55.410	1.00	55.11		C
	ANISOU	5262	CB	LYS	F	331	7777	9006	4157	-1811	660	889	C
	ATOM	5263	CG	LYS	F	331	34.021	7.996	-55.305	1.00	58.38		C
	ANISOU	5263	CG	LYS	F	331	8516	9084	4581	-1684	447	1080	C
	ATOM	5264	CD	LYS	F	331	34.421	9.467	-55.258	1.00	65.79		C
40	ANISOU	5264	CD	LYS	F	331	9739	9778	5479	-1948	534	1252	C
	ATOM	5265	CE	LYS	F	331	33.390	10.311	-56.018	1.00	69.37		C
	ANISOU	5265	CE	LYS	F	331	10638	9954	5763	-1842	370	1498	C
	ATOM	5266	NZ	LYS	F	331	33.674	11.800	-55.808	1.00	74.95		N
	ANISOU	5266	NZ	LYS	F	331	11678	10334	6466	-2070	432	1671	N
	ATOM	5267	C	LYS	F	331	36.204	4.910	-56.034	1.00	53.61		C
45	ANISOU	5267	C	LYS	F	331	7117	9344	3907	-1704	845	557	C
	ATOM	5268	O	LYS	F	331	36.661	4.624	-54.932	1.00	51.96		O
	ANISOU	5268	O	LYS	F	331	6638	9168	3938	-1666	824	424	O
	ATOM	5269	N	ARG	F	332	36.740	4.480	-57.175	1.00	55.82		N
50	ANISOU	5269	N	ARG	F	332	7406	9846	3958	-1795	1035	512	N
	ATOM	5270	CA	ARG	F	332	37.975	3.711	-57.141	1.00	56.45		C
	ANISOU	5270	CA	ARG	F	332	7126	10222	4102	-1854	1251	286	C
	ATOM	5271	CB	ARG	F	332	38.200	2.902	-58.417	1.00	58.54		C
	ANISOU	5271	CB	ARG	F	332	7413	10718	4111	-1836	1419	191	C
55	ATOM	5272	CG	ARG	F	332	39.426	1.993	-58.330	1.00	58.83		C
	ANISOU	5272	CG	ARG	F	332	7035	11059	4257	-1823	1632	-82	C
	ATOM	5273	CD	ARG	F	332	39.626	1.183	-59.593	1.00	60.93		C
	ANISOU	5273	CD	ARG	F	332	7343	11542	4265	-1793	1821	-205	C
	ATOM	5274	NE	ARG	F	332	40.094	1.998	-60.711	1.00	63.73		N
60	ANISOU	5274	NE	ARG	F	332	7925	11986	4305	-2121	2102	-93	N
	ATOM	5275	CZ	ARG	F	332	39.945	1.662	-61.989	1.00	67.27		C
	ANISOU	5275	CZ	ARG	F	332	8607	12545	4407	-2151	2238	-103	C
	ATOM	5276	NH1	ARG	F	332	39.334	0.528	-62.321	1.00	65.85		N
	ANISOU	5276	NH1	ARG	F	332	8448	12400	4171	-1873	2106	-235	N
	ATOM	5277	NH2	ARG	F	332	40.400	2.464	-62.946	1.00	71.36		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5277	NH2	ARG	F	332	9373	13127	4613	-2480	2512	18	N
	ATOM	5278	C	ARG	F	332	39.138	4.648	-56.879	1.00	58.97		C
	ANISOU	5278	C	ARG	F	332	7335	10596	4475	-2189	1464	297	C
	ATOM	5279	O	ARG	F	332	39.386	5.586	-57.629	1.00	61.80		O
5	ANISOU	5279	O	ARG	F	332	7943	10911	4627	-2474	1635	449	O
	ATOM	5280	N	THR	F	333	39.841	4.386	-55.789	1.00	58.21		N
	ANISOU	5280	N	THR	F	333	6878	10586	4652	-2165	1442	134	N
	ATOM	5281	CA	THR	F	333	40.945	5.229	-55.366	1.00	60.07		C
10	ANISOU	5281	CA	THR	F	333	6945	10888	4991	-2487	1602	103	C
	ATOM	5282	CB	THR	F	333	40.955	5.395	-53.809	1.00	57.87		C
	ANISOU	5282	CB	THR	F	333	6499	10485	5005	-2405	1378	45	C
	ATOM	5283	OG1	THR	F	333	40.820	4.116	-53.173	1.00	53.94		O
	ANISOU	5283	OG1	THR	F	333	5755	10082	4659	-2055	1210	-124	O
	ATOM	5284	CG2	THR	F	333	39.781	6.265	-53.360	1.00	55.42		C
15	ANISOU	5284	CG2	THR	F	333	6572	9793	4692	-2367	1177	257	C
	ATOM	5285	C	THR	F	333	42.260	4.664	-55.913	1.00	63.49		C
	ANISOU	5285	C	THR	F	333	7009	11703	5413	-2612	1892	-115	C
	ATOM	5286	O	THR	F	333	43.229	5.410	-56.156	1.00	66.66		O
20	ANISOU	5286	O	THR	F	333	7310	12223	5793	-2977	2143	-133	O
	ATOM	5287	N	SER	F	334	42.274	3.351	-56.144	1.00	62.58		N
	ANISOU	5287	N	SER	F	334	6695	11769	5312	-2317	1875	-291	N
	ATOM	5288	CA	SER	F	334	43.502	2.644	-56.507	1.00	65.70		C
	ANISOU	5288	CA	SER	F	334	6674	12530	5758	-2338	2121	-550	C
	ATOM	5289	CB	SER	F	334	44.291	2.301	-55.244	1.00	65.54		C
25	ANISOU	5289	CB	SER	F	334	6199	12626	6076	-2225	1985	-745	C
	ATOM	5290	OG	SER	F	334	44.801	3.472	-54.626	1.00	68.04		O
	ANISOU	5290	OG	SER	F	334	6457	12896	6498	-2553	2002	-685	O
	ATOM	5291	C	SER	F	334	43.246	1.357	-57.283	1.00	65.13		C
30	ANISOU	5291	C	SER	F	334	6595	12586	5565	-2050	2161	-684	C
	ATOM	5292	O	SER	F	334	42.223	0.701	-57.097	1.00	62.02		O
	ANISOU	5292	O	SER	F	334	6381	12018	5168	-1758	1918	-644	O
	ATOM	5293	N	GLY	F	335	44.195	0.999	-58.142	1.00	68.40		N
	ANISOU	5293	N	GLY	F	335	6793	13307	5888	-2150	2488	-866	N
	ATOM	5294	CA	GLY	F	335	44.157	-0.277	-58.850	1.00	68.50		C
35	ANISOU	5294	CA	GLY	F	335	6754	13467	5808	-1876	2563	-1055	C
	ATOM	5295	C	GLY	F	335	43.389	-0.225	-60.154	1.00	68.74		C
	ANISOU	5295	C	GLY	F	335	7239	13435	5445	-1951	2668	-925	C
	ATOM	5296	O	GLY	F	335	43.026	0.858	-60.629	1.00	69.46		O
40	ANISOU	5296	O	GLY	F	335	7680	13399	5314	-2236	2722	-681	O
	ATOM	5297	N	SER	F	336	43.149	-1.405	-60.731	1.00	68.37		N
	ANISOU	5297	N	SER	F	336	7212	13464	5303	-1688	2679	-1092	N
	ATOM	5298	CA	SER	F	336	42.397	-1.531	-61.986	1.00	69.05		C
	ANISOU	5298	CA	SER	F	336	7727	13513	4996	-1723	2739	-1010	C
	ATOM	5299	CB	SER	F	336	43.217	-1.023	-63.178	1.00	73.61		C
45	ANISOU	5299	CB	SER	F	336	8375	14331	5263	-2063	3179	-1036	C
	ATOM	5300	OG	SER	F	336	44.204	-1.967	-63.529	1.00	76.75		O
	ANISOU	5300	OG	SER	F	336	8413	15033	5715	-1957	3464	-1374	O
	ATOM	5301	C	SER	F	336	41.939	-2.968	-62.240	1.00	67.73		C
50	ANISOU	5301	C	SER	F	336	7568	13350	4817	-1369	2631	-1214	C
	ATOM	5302	O	SER	F	336	42.344	-3.898	-61.517	1.00	66.67		O
	ANISOU	5302	O	SER	F	336	7102	13257	4972	-1096	2562	-1428	O
	ATOM	5303	N	SER	F	337	41.095	-3.128	-63.279	1.00	68.08		N
	ANISOU	5303	N	SER	F	337	8018	13336	4512	-1379	2602	-1144	N
	ATOM	5304	CA	SER	F	337	40.508	-4.417	-63.644	1.00	67.00		C
55	ANISOU	5304	CA	SER	F	337	7973	13170	4315	-1097	2486	-1327	C
	ATOM	5305	CB	SER	F	337	39.336	-4.739	-62.720	1.00	62.53		C
	ANISOU	5305	CB	SER	F	337	7481	12315	3961	-875	2064	-1229	C
	ATOM	5306	OG	SER	F	337	38.333	-3.755	-62.848	1.00	60.99		O
	ANISOU	5306	OG	SER	F	337	7612	11944	3619	-1016	1861	-934	O
60	ATOM	5307	C	SER	F	337	40.018	-4.501	-65.096	1.00	69.66		C
	ANISOU	5307	C	SER	F	337	8719	13566	4183	-1202	2583	-1314	C
	ATOM	5308	O	SER	F	337	39.755	-3.477	-65.752	1.00	70.99		O
	ANISOU	5308	O	SER	F	337	9208	13715	4051	-1462	2625	-1078	O
	ATOM	5309	N	ILE	F	338	39.898	-5.738	-65.580	1.00	70.19		N

# ES 2 454 773 T3

					ANISOU 5309	N	ILE	F	338	8806	13686	4178	-994	2605	-1570	N
					ATOM 5310	CA	ILE	F	338	39.155	-6.038	-66.796	1.00	71.90		C
					ANISOU 5310	CA	ILE	F	338	9439	13908	3972	-1029	2574	-1583	C
					ATOM 5311	CB	ILE	F	338	40.002	-6.853	-67.853	1.00	76.35		C
5					ANISOU 5311	CB	ILE	F	338	9987	14730	4290	-1023	2965	-1906	C
					ATOM 5312	CG1	ILE	F	338	40.263	-8.298	-67.393	1.00	75.23		C
					ANISOU 5312	CG1	ILE	F	338	9575	14570	4439	-678	2951	-2246	C
					ATOM 5313	CD1	ILE	F	338	40.863	-9.201	-68.486	1.00	80.18		C
10					ANISOU 5313	CD1	ILE	F	338	10254	15401	4810	-623	3291	-2589	C
					ATOM 5314	CG2	ILE	F	338	41.320	-6.112	-68.205	1.00	78.90		C
					ANISOU 5314	CG2	ILE	F	338	10131	15320	4527	-1288	3428	-1925	C
					ATOM 5315	C	ILE	F	338	37.828	-6.734	-66.425	1.00	68.91		C
					ANISOU 5315	C	ILE	F	338	9200	13287	3697	-806	2150	-1576	C
					ATOM 5316	O	ILE	F	338	37.757	-7.445	-65.419	1.00	66.10		O
15					ANISOU 5316	O	ILE	F	338	8600	12808	3708	-581	2005	-1683	O
					ATOM 5317	N	LYS	F	339	36.784	-6.500	-67.226	1.00	69.74		N
					ANISOU 5317	N	LYS	F	339	9700	13325	3473	-882	1949	-1445	N
					ATOM 5318	CA	LYS	F	339	35.463	-7.116	-67.021	1.00	67.74		C
					ANISOU 5318	CA	LYS	F	339	9570	12878	3290	-720	1556	-1458	C
20					ATOM 5319	CB	LYS	F	339	34.333	-6.139	-67.371	1.00	67.59		C
					ANISOU 5319	CB	LYS	F	339	9864	12753	3064	-831	1250	-1160	C
					ATOM 5320	CG	LYS	F	339	34.393	-4.798	-66.699	1.00	66.44		C
					ANISOU 5320	CG	LYS	F	339	9674	12510	3061	-940	1203	-852	C
					ATOM 5321	CD	LYS	F	339	33.675	-3.720	-67.540	1.00	68.91		C
25					ANISOU 5321	CD	LYS	F	339	10398	12778	3007	-1082	1029	-569	C
					ATOM 5322	CE	LYS	F	339	34.362	-2.348	-67.345	1.00	70.79		C
					ANISOU 5322	CE	LYS	F	339	10682	12989	3227	-1292	1208	-308	C
					ATOM 5323	NZ	LYS	F	339	34.350	-1.864	-65.889	1.00	67.41		N
					ANISOU 5323	NZ	LYS	F	339	9955	12387	3271	-1227	1105	-208	N
30					ATOM 5324	C	LYS	F	339	35.324	-8.349	-67.910	1.00	70.21		C
					ANISOU 5324	C	LYS	F	339	10033	13263	3382	-630	1607	-1759	C
					ATOM 5325	O	LYS	F	339	35.364	-8.238	-69.132	1.00	73.21		O
					ANISOU 5325	O	LYS	F	339	10707	13787	3321	-763	1726	-1788	O
35					ATOM 5326	N	ARG	F	340	35.143	-9.514	-67.302	1.00	68.86		N
					ANISOU 5326	N	ARG	F	340	9700	12972	3492	-415	1515	-1980	N
					ATOM 5327	CA	ARG	F	340	35.046	-10.755	-68.056	1.00	71.85		C
					ANISOU 5327	CA	ARG	F	340	10224	13375	3699	-321	1570	-2296	C
					ATOM 5328	CB	ARG	F	340	36.226	-11.677	-67.715	1.00	72.59		C
					ANISOU 5328	CB	ARG	F	340	10046	13519	4016	-132	1871	-2586	C
40					ATOM 5329	CG	ARG	F	340	36.403	-12.842	-68.679	1.00	76.97		C
					ANISOU 5329	CG	ARG	F	340	10775	14131	4338	-46	2034	-2942	C
					ATOM 5330	CD	ARG	F	340	37.468	-13.841	-68.233	1.00	78.54		C
					ANISOU 5330	CD	ARG	F	340	10696	14325	4818	215	2278	-3243	C
					ATOM 5331	NE	ARG	F	340	37.621	-14.943	-69.196	1.00	86.31		N
45					ANISOU 5331	NE	ARG	F	340	11880	15342	5571	307	2449	-3605	N
					ATOM 5332	CZ	ARG	F	340	36.819	-16.011	-69.279	1.00	87.14		C
					ANISOU 5332	CZ	ARG	F	340	12201	15224	5684	409	2247	-3787	C
					ATOM 5333	NH1	ARG	F	340	35.781	-16.154	-68.451	1.00	84.58		N
					ANISOU 5333	NH1	ARG	F	340	11903	14639	5593	422	1877	-3641	N
50					ATOM 5334	NH2	ARG	F	340	37.058	-16.949	-70.188	1.00	89.57		N
					ANISOU 5334	NH2	ARG	F	340	12702	15565	5765	482	2435	-4134	N
					ATOM 5335	C	ARG	F	340	33.708	-11.429	-67.754	1.00	70.08		C
					ANISOU 5335	C	ARG	F	340	10105	12931	3592	-240	1188	-2333	C
55					ATOM 5336	O	ARG	F	340	33.361	-11.615	-66.587	1.00	67.34		O
					ANISOU 5336	O	ARG	F	340	9563	12392	3630	-132	1021	-2278	O
					ATOM 5337	N	GLU	F	341	32.949	-11.763	-68.797	1.00	72.62		N
					ANISOU 5337	N	GLU	F	341	10737	13286	3568	-315	1050	-2429	N
					ATOM 5338	CA	GLU	F	341	31.665	-12.460	-68.643	1.00	72.00		C
					ANISOU 5338	CA	GLU	F	341	10745	13030	3582	-280	699	-2511	C
60					ATOM 5339	CB	GLU	F	341	30.833	-12.346	-69.924	1.00	75.35		C
					ANISOU 5339	CB	GLU	F	341	11521	13561	3548	-419	499	-2531	C
					ATOM 5340	CG	GLU	F	341	29.378	-12.802	-69.795	1.00	75.43		C
					ANISOU 5340	CG	GLU	F	341	11576	13430	3654	-432	82	-2580	C
					ATOM 5341	CD	GLU	F	341	28.386	-11.646	-69.818	1.00	75.78		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5341	CD	GLU	F	341	11656	13495	3643	-509	-266	-2273	C
	ATOM	5342	OE1	GLU	F	341	27.661	-11.539	-70.835	1.00	78.56		O
	ANISOU	5342	OE1	GLU	F	341	12266	13948	3635	-593	-508	-2290	O
	ATOM	5343	OE2	GLU	F	341	28.329	-10.858	-68.835	1.00	72.03		O
5	ANISOU	5343	OE2	GLU	F	341	10963	12933	3474	-469	-311	-2029	O
	ATOM	5344	C	GLU	F	341	31.866	-13.933	-68.254	1.00	72.08		C
	ANISOU	5344	C	GLU	F	341	10682	12885	3819	-116	781	-2838	C
	ATOM	5345	O	GLU	F	341	32.667	-14.650	-68.854	1.00	74.94		O
	ANISOU	5345	O	GLU	F	341	11113	13324	4035	-49	1050	-3099	O
10	ATOM	5346	N	GLU	F	342	31.125	-14.370	-67.245	1.00	69.62		N
	ANISOU	5346	N	GLU	F	342	10251	12340	3862	-54	560	-2823	N
	ATOM	5347	CA	GLU	F	342	31.293	-15.693	-66.653	1.00	69.64		C
	ANISOU	5347	CA	GLU	F	342	10208	12126	4127	103	619	-3074	C
	ATOM	5348	CB	GLU	F	342	32.322	-15.633	-65.514	1.00	67.97		C
15	ANISOU	5348	CB	GLU	F	342	9720	11849	4259	282	797	-3004	C
	ATOM	5349	CG	GLU	F	342	33.695	-16.187	-65.890	1.00	72.52		C
	ANISOU	5349	CG	GLU	F	342	10240	12529	4785	450	1138	-3236	C
	ATOM	5350	CD	GLU	F	342	34.866	-15.386	-65.320	1.00	73.01		C
	ANISOU	5350	CD	GLU	F	342	9998	12742	5001	520	1337	-3091	C
20	ATOM	5351	OE1	GLU	F	342	35.691	-14.915	-66.127	1.00	76.14		O
	ANISOU	5351	OE1	GLU	F	342	10366	13400	5165	460	1597	-3130	O
	ATOM	5352	OE2	GLU	F	342	34.977	-15.234	-64.084	1.00	71.41		O
	ANISOU	5352	OE2	GLU	F	342	9591	12405	5135	615	1243	-2952	O
	ATOM	5353	C	GLU	F	342	29.962	-16.216	-66.134	1.00	67.95		C
25	ANISOU	5353	C	GLU	F	342	10035	11683	4100	41	312	-3093	C
	ATOM	5354	O	GLU	F	342	29.181	-15.466	-65.550	1.00	65.42		O
	ANISOU	5354	O	GLU	F	342	9603	11333	3922	-40	100	-2859	O
	ATOM	5355	N	GLU	F	343	29.706	-17.498	-66.380	1.00	69.90		N
	ANISOU	5355	N	GLU	F	343	10445	11769	4346	66	308	-3389	N
30	ATOM	5356	CA	GLU	F	343	28.559	-18.194	-65.805	1.00	69.18		C
	ANISOU	5356	CA	GLU	F	343	10385	11429	4472	-16	79	-3457	C
	ATOM	5357	CB	GLU	F	343	28.115	-19.373	-66.685	1.00	72.48		C
	ANISOU	5357	CB	GLU	F	343	11077	11759	4703	-93	38	-3804	C
	ATOM	5358	CG	GLU	F	343	26.910	-19.055	-67.631	1.00	74.73		C
35	ANISOU	5358	CG	GLU	F	343	11479	12200	4715	-329	-260	-3829	C
	ATOM	5359	CD	GLU	F	343	26.608	-20.312	-68.539	1.00	78.55		C
	ANISOU	5359	CD	GLU	F	343	12260	12593	4990	-414	-279	-4224	C
	ATOM	5360	OE1	GLU	F	343	26.210	-21.396	-67.996	1.00	78.42		O
	ANISOU	5360	OE1	GLU	F	343	12303	12280	5215	-445	-298	-4412	O
40	ATOM	5361	OE2	GLU	F	343	26.759	-20.210	-69.802	1.00	81.28		O
	ANISOU	5361	OE2	GLU	F	343	12817	13155	4912	-468	-271	-4349	O
	ATOM	5362	C	GLU	F	343	28.962	-18.700	-64.434	1.00	66.86		C
	ANISOU	5362	C	GLU	F	343	9963	10869	4573	140	169	-3421	C
	ATOM	5363	O	GLU	F	343	30.023	-19.295	-64.287	1.00	68.01		O
45	ANISOU	5363	O	GLU	F	343	10119	10944	4777	342	387	-3549	O
	ATOM	5364	N	VAL	F	344	28.126	-18.450	-63.434	1.00	64.55		N
	ANISOU	5364	N	VAL	F	344	9551	10437	4540	58	0	-3253	N
	ATOM	5365	CA	VAL	F	344	28.351	-18.977	-62.081	1.00	62.97		C
	ANISOU	5365	CA	VAL	F	344	9292	9954	4679	175	57	-3208	C
50	ATOM	5366	CB	VAL	F	344	28.623	-17.848	-61.021	1.00	59.59		C
	ANISOU	5366	CB	VAL	F	344	8616	9585	4440	225	51	-2890	C
	ATOM	5367	CG1	VAL	F	344	29.883	-17.084	-61.375	1.00	59.63		C
	ANISOU	5367	CG1	VAL	F	344	8500	9834	4323	357	219	-2806	C
	ATOM	5368	CG2	VAL	F	344	27.435	-16.885	-60.878	1.00	57.61		C
55	ANISOU	5368	CG2	VAL	F	344	8250	9422	4217	29	-159	-2700	C
	ATOM	5369	C	VAL	F	344	27.175	-19.874	-61.683	1.00	63.62		C
	ANISOU	5369	C	VAL	F	344	9499	9764	4910	11	-81	-3328	C
	ATOM	5370	O	VAL	F	344	26.167	-19.933	-62.404	1.00	65.05		O
	ANISOU	5370	O	VAL	F	344	9736	10016	4963	-196	-243	-3431	O
60	ATOM	5371	N	LEU	F	345	27.309	-20.581	-60.561	1.00	62.81		N
	ANISOU	5371	N	LEU	F	345	9450	9352	5063	92	-20	-3322	N
	ATOM	5372	CA	LEU	F	345	26.254	-21.491	-60.114	1.00	64.00		C
	ANISOU	5372	CA	LEU	F	345	9749	9208	5359	-98	-99	-3437	C
	ATOM	5373	CB	LEU	F	345	26.623	-22.938	-60.433	1.00	66.98		C

ES 2 454 773 T3

					10440	9302	5705	-18	4	-3726	C
					25.588	-24.015	-60.112	1.00	69.00		C
					10916	9216	6083	-256	-48	-3887	C
					25.216	-24.820	-61.343	1.00	72.57		C
5					11584	9653	6334	-394	-85	-4220	C
					26.113	-24.915	-59.016	1.00	69.88		C
					11247	8912	6394	-92	72	-3866	C
					25.911	-21.302	-58.632	1.00	61.95		C
					9405	8757	5376	-129	-105	-3225	C
10					26.775	-21.464	-57.754	1.00	61.11		O
					9333	8496	5389	83	-3	-3125	O
					24.649	-20.944	-58.369	1.00	61.45		N
					9224	8720	5404	-389	-230	-3169	N
					24.186	-20.634	-57.011	1.00	59.61		C
15					8895	8347	5406	-459	-215	-2976	C
					22.830	-19.857	-56.990	1.00	59.00		C
					8570	8441	5406	-711	-358	-2918	C
					21.739	-20.769	-57.159	1.00	61.25		O
					8940	8578	5755	-989	-400	-3137	O
20					22.775	-18.783	-58.068	1.00	58.59		C
					8329	8761	5170	-678	-507	-2868	C
					24.058	-21.898	-56.162	1.00	61.14		C
					9368	8119	5743	-514	-112	-3065	C
					24.144	-23.020	-56.681	1.00	64.20		O
25					10015	8309	6069	-530	-77	-3293	O
					23.851	-21.703	-54.861	1.00	59.58		N
					9155	7768	5717	-548	-58	-2884	N
					23.695	-22.800	-53.910	1.00	61.10		C
					9656	7535	6025	-620	47	-2913	C
30					22.384	-23.558	-54.037	1.00	63.56		C
					10062	7682	6405	-1000	56	-3100	C
					22.088	-24.419	-53.209	1.00	65.10		O
					10531	7510	6694	-1136	166	-3112	O
					21.594	-23.215	-55.055	1.00	64.06		N
35					9904	8019	6416	-1185	-68	-3241	N
					20.382	-23.946	-55.409	1.00	66.83		C
					10293	8274	6823	-1558	-97	-3477	C
					19.142	-23.043	-55.278	1.00	66.16		C
					9806	8464	6867	-1802	-190	-3437	C
40					17.840	-23.839	-55.092	1.00	69.65		C
					10255	8745	7462	-2237	-149	-3647	C
					17.773	-24.763	-54.278	1.00	72.02		O
					10853	8662	7850	-2387	37	-3669	O
					16.799	-23.468	-55.839	1.00	69.91		N
45					9964	9072	7527	-2447	-330	-3802	N
					20.544	-24.474	-56.834	1.00	69.06		C
					10684	8640	6915	-1547	-200	-3738	C
					19.582	-24.911	-57.473	1.00	71.54		O
					10974	8984	7225	-1844	-293	-3970	O
50					21.791	-24.430	-57.308	1.00	68.36		N
					10708	8599	6666	-1207	-176	-3713	N
					22.186	-24.875	-58.655	1.00	70.41		C
					11104	8949	6701	-1136	-228	-3954	C
					22.034	-26.402	-58.833	1.00	74.30		C
55					11995	9037	7197	-1269	-153	-4240	C
					23.212	-27.314	-58.448	1.00	75.35		C
					12494	8800	7338	-960	11	-4265	C
					23.480	-27.324	-56.942	1.00	73.43		C
					12321	8288	7290	-860	111	-4005	C
60					22.971	-28.730	-58.948	1.00	79.27		C
					13395	8930	7794	-1104	54	-4593	C
					21.494	-24.087	-59.774	1.00	70.46		C
					10850	9370	6551	-1276	-435	-4021	C
					21.080	-24.656	-60.785	1.00	73.71		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5405	O	LEU	F	349	11378	9813	6815	-1431	-529	-4288	O
	ATOM	5406	N	GLN	F	350	21.378	-22.778	-59.579	1.00	67.14		N
	ANISOU	5406	N	GLN	F	350	10108	9250	6152	-1213	-519	-3778	N
	ATOM	5407	CA	GLN	F	350	20.865	-21.888	-60.610	1.00	67.20		C
5	ANISOU	5407	CA	GLN	F	350	9898	9645	5989	-1271	-738	-3784	C
	ATOM	5408	CB	GLN	F	350	19.977	-20.807	-59.982	1.00	65.17		C
	ANISOU	5408	CB	GLN	F	350	9286	9560	5916	-1363	-855	-3582	C
	ATOM	5409	CG	GLN	F	350	19.282	-19.897	-60.986	1.00	66.25		C
	ANISOU	5409	CG	GLN	F	350	9203	10065	5904	-1411	-1134	-3582	C
10	ATOM	5410	CD	GLN	F	350	18.266	-18.962	-60.350	1.00	65.23		C
	ANISOU	5410	CD	GLN	F	350	8713	10069	6003	-1493	-1259	-3436	C
	ATOM	5411	OE1	GLN	F	350	18.433	-18.500	-59.215	1.00	63.41		O
	ANISOU	5411	OE1	GLN	F	350	8380	9742	5972	-1419	-1115	-3235	O
	ATOM	5412	NE2	GLN	F	350	17.205	-18.670	-61.091	1.00	67.82		N
15	ANISOU	5412	NE2	GLN	F	350	8845	10626	6297	-1630	-1540	-3552	N
	ATOM	5413	C	GLN	F	350	22.031	-21.267	-61.393	1.00	66.19		C
	ANISOU	5413	C	GLN	F	350	9811	9742	5597	-994	-707	-3697	C
	ATOM	5414	O	GLN	F	350	23.053	-20.903	-60.811	1.00	63.73		O
	ANISOU	5414	O	GLN	F	350	9487	9398	5327	-760	-551	-3513	O
20	ATOM	5415	N	THR	F	351	21.873	-21.162	-62.711	1.00	68.30		N
	ANISOU	5415	N	THR	F	351	10130	10239	5581	-1042	-850	-3841	N
	ATOM	5416	CA	THR	F	351	22.896	-20.578	-63.589	1.00	68.33		C
	ANISOU	5416	CA	THR	F	351	10199	10477	5286	-837	-796	-3781	C
	ATOM	5417	CB	THR	F	351	22.933	-21.313	-64.957	1.00	72.47		C
25	ANISOU	5417	CB	THR	F	351	10986	11065	5483	-903	-838	-4090	C
	ATOM	5418	OG1	THR	F	351	23.426	-22.645	-64.764	1.00	74.33		O
	ANISOU	5418	OG1	THR	F	351	11477	10978	5788	-858	-645	-4327	O
	ATOM	5419	CG2	THR	F	351	23.822	-20.584	-65.965	1.00	72.87		C
	ANISOU	5419	CG2	THR	F	351	11102	11406	5178	-749	-781	-4024	C
30	ATOM	5420	C	THR	F	351	22.726	-19.054	-63.781	1.00	66.46		C
	ANISOU	5420	C	THR	F	351	9733	10556	4964	-796	-942	-3503	C
	ATOM	5421	O	THR	F	351	21.670	-18.577	-64.223	1.00	67.46		O
	ANISOU	5421	O	THR	F	351	9740	10849	5042	-941	-1208	-3500	O
	ATOM	5422	N	LEU	F	352	23.774	-18.303	-63.438	1.00	63.82		N
35	ANISOU	5422	N	LEU	F	352	9338	10288	4622	-594	-780	-3279	N
	ATOM	5423	CA	LEU	F	352	23.783	-16.849	-63.611	1.00	62.08		C
	ANISOU	5423	CA	LEU	F	352	8962	10317	4309	-548	-879	-3005	C
	ATOM	5424	CB	LEU	F	352	23.883	-16.122	-62.257	1.00	58.40		C
	ANISOU	5424	CB	LEU	F	352	8278	9763	4150	-474	-815	-2744	C
40	ATOM	5425	CG	LEU	F	352	22.734	-16.210	-61.252	1.00	57.71		C
	ANISOU	5425	CG	LEU	F	352	8017	9528	4381	-599	-923	-2723	C
	ATOM	5426	CD1	LEU	F	352	23.172	-15.633	-59.924	1.00	54.58		C
	ANISOU	5426	CD1	LEU	F	352	7487	9024	4226	-496	-788	-2494	C
	ATOM	5427	CD2	LEU	F	352	21.468	-15.522	-61.746	1.00	59.33		C
45	ANISOU	5427	CD2	LEU	F	352	8065	9916	4561	-720	-1217	-2699	C
	ATOM	5428	C	LEU	F	352	24.939	-16.408	-64.496	1.00	62.47		C
	ANISOU	5428	C	LEU	F	352	9140	10557	4038	-426	-732	-2963	C
	ATOM	5429	O	LEU	F	352	26.059	-16.914	-64.364	1.00	62.17		O
	ANISOU	5429	O	LEU	F	352	9174	10448	4001	-291	-475	-3039	O
50	ATOM	5430	N	LYS	F	353	24.665	-15.457	-65.384	1.00	63.27		N
	ANISOU	5430	N	LYS	F	353	9272	10900	3869	-470	-892	-2843	N
	ATOM	5431	CA	LYS	F	353	25.722	-14.814	-66.150	1.00	64.14		C
	ANISOU	5431	CA	LYS	F	353	9502	11201	3667	-397	-727	-2748	C
	ATOM	5432	CB	LYS	F	353	25.257	-14.567	-67.589	1.00	67.60		C
55	ANISOU	5432	CB	LYS	F	353	10164	11852	3670	-499	-919	-2806	C
	ATOM	5433	CG	LYS	F	353	26.308	-14.823	-68.681	1.00	70.46		C
	ANISOU	5433	CG	LYS	F	353	10783	12357	3632	-480	-672	-2941	C
	ATOM	5434	CD	LYS	F	353	25.734	-14.438	-70.067	1.00	74.26		C
	ANISOU	5434	CD	LYS	F	353	11530	13051	3636	-595	-907	-2954	C
60	ATOM	5435	CE	LYS	F	353	26.582	-14.974	-71.227	1.00	78.07		C
	ANISOU	5435	CE	LYS	F	353	12316	13659	3685	-614	-662	-3177	C
	ATOM	5436	NZ	LYS	F	353	25.986	-14.635	-72.572	1.00	81.80		N
	ANISOU	5436	NZ	LYS	F	353	13103	14333	3646	-737	-916	-3190	N
	ATOM	5437	C	LYS	F	353	26.085	-13.500	-65.445	1.00	61.18		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5437	C	LYS	F	353	8950	10869	3425	-333	-686	-2411	C
	ATOM	5438	O	LYS	F	353	25.259	-12.592	-65.346	1.00	60.54		O
	ANISOU	5438	O	LYS	F	353	8789	10834	3380	-374	-920	-2221	O
	ATOM	5439	N	ILE	F	354	27.308	-13.410	-64.930	1.00	59.64		N
5	ANISOU	5439	N	ILE	F	354	8685	10652	3322	-226	-399	-2355	N
	ATOM	5440	CA	ILE	F	354	27.766	-12.181	-64.259	1.00	57.21		C
	ANISOU	5440	CA	ILE	F	354	8224	10380	3133	-191	-340	-2061	C
	ATOM	5441	CB	ILE	F	354	27.922	-12.336	-62.706	1.00	53.63		C
	ANISOU	5441	CB	ILE	F	354	7553	9725	3099	-105	-280	-1999	C
10	ATOM	5442	CG1	ILE	F	354	29.041	-13.330	-62.353	1.00	54.06		C
	ANISOU	5442	CG1	ILE	F	354	7590	9699	3250	27	-30	-2177	C
	ATOM	5443	CD1	ILE	F	354	29.514	-13.275	-60.917	1.00	51.17		C
	ANISOU	5443	CD1	ILE	F	354	7045	9181	3215	133	39	-2074	C
	ATOM	5444	CG2	ILE	F	354	26.599	-12.724	-62.050	1.00	51.74		C
15	ANISOU	5444	CG2	ILE	F	354	7246	9318	3094	-161	-499	-2033	C
	ATOM	5445	C	ILE	F	354	29.064	-11.642	-64.869	1.00	58.84		C
	ANISOU	5445	C	ILE	F	354	8491	10766	3100	-178	-75	-2003	C
	ATOM	5446	O	ILE	F	354	29.891	-12.409	-65.373	1.00	60.22		O
	ANISOU	5446	O	ILE	F	354	8735	10998	3147	-131	148	-2215	O
20	ATOM	5447	N	ARG	F	355	29.226	-10.318	-64.815	1.00	58.63		N
	ANISOU	5447	N	ARG	F	355	8438	10819	3021	-229	-85	-1728	N
	ATOM	5448	CA	ARG	F	355	30.437	-9.658	-65.305	1.00	60.49		C
	ANISOU	5448	CA	ARG	F	355	8713	11221	3050	-274	189	-1647	C
	ATOM	5449	CB	ARG	F	355	30.117	-8.263	-65.852	1.00	61.44		C
25	ANISOU	5449	CB	ARG	F	355	8992	11418	2933	-394	74	-1361	C
	ATOM	5450	CG	ARG	F	355	31.245	-7.634	-66.651	1.00	64.96		C
	ANISOU	5450	CG	ARG	F	355	9569	12047	3066	-511	373	-1292	C
	ATOM	5451	CD	ARG	F	355	30.886	-6.237	-67.160	1.00	66.33		C
	ANISOU	5451	CD	ARG	F	355	9972	12237	2992	-636	245	-979	C
30	ATOM	5452	NE	ARG	F	355	30.037	-6.239	-68.360	1.00	71.70		N
	ANISOU	5452	NE	ARG	F	355	10987	12983	3272	-678	11	-971	N
	ATOM	5453	CZ	ARG	F	355	29.472	-5.154	-68.895	1.00	73.47		C
	ANISOU	5453	CZ	ARG	F	355	11472	13191	3252	-738	-203	-704	C
	ATOM	5454	NH1	ARG	F	355	29.634	-3.953	-68.346	1.00	73.36		N
35	ANISOU	5454	NH1	ARG	F	355	11440	13073	3362	-773	-196	-423	N
	ATOM	5455	NH2	ARG	F	355	28.736	-5.268	-69.988	1.00	77.30		N
	ANISOU	5455	NH2	ARG	F	355	12262	13752	3359	-754	-445	-722	N
	ATOM	5456	C	ARG	F	355	31.472	-9.601	-64.187	1.00	57.93		C
	ANISOU	5456	C	ARG	F	355	8122	10848	3041	-191	403	-1623	C
40	ATOM	5457	O	ARG	F	355	31.365	-8.802	-63.252	1.00	55.72		O
	ANISOU	5457	O	ARG	F	355	7705	10480	2987	-196	329	-1419	O
	ATOM	5458	N	VAL	F	356	32.454	-10.488	-64.286	1.00	59.00		N
	ANISOU	5458	N	VAL	F	356	8187	11038	3193	-99	649	-1853	N
	ATOM	5459	CA	VAL	F	356	33.472	-10.669	-63.254	1.00	57.54		C
45	ANISOU	5459	CA	VAL	F	356	7731	10818	3314	26	815	-1887	C
	ATOM	5460	CB	VAL	F	356	34.034	-12.124	-63.294	1.00	59.07		C
	ANISOU	5460	CB	VAL	F	356	7892	10969	3584	215	953	-2208	C
	ATOM	5461	CG1	VAL	F	356	35.263	-12.285	-62.413	1.00	58.90		C
	ANISOU	5461	CG1	VAL	F	356	7583	10962	3833	377	1122	-2261	C
50	ATOM	5462	CG2	VAL	F	356	32.959	-13.120	-62.889	1.00	58.12		C
	ANISOU	5462	CG2	VAL	F	356	7884	10597	3601	282	725	-2309	C
	ATOM	5463	C	VAL	F	356	34.594	-9.647	-63.446	1.00	58.53		C
	ANISOU	5463	C	VAL	F	356	7742	11144	3352	-77	1059	-1769	C
	ATOM	5464	O	VAL	F	356	35.136	-9.510	-64.553	1.00	61.27		O
55	ANISOU	5464	O	VAL	F	356	8201	11690	3390	-175	1273	-1838	O
	ATOM	5465	N	HIS	F	357	34.942	-8.926	-62.380	1.00	56.02		N
	ANISOU	5465	N	HIS	F	357	7219	10776	3291	-82	1041	-1603	N
	ATOM	5466	CA	HIS	F	357	36.060	-7.989	-62.470	1.00	57.30		C
	ANISOU	5466	CA	HIS	F	357	7240	11120	3411	-212	1281	-1516	C
60	ATOM	5467	CB	HIS	F	357	35.754	-6.682	-61.737	1.00	55.20		C
	ANISOU	5467	CB	HIS	F	357	6955	10760	3259	-343	1148	-1222	C
	ATOM	5468	CG	HIS	F	357	34.762	-5.810	-62.460	1.00	56.04		C
	ANISOU	5468	CG	HIS	F	357	7368	10819	3105	-492	995	-1005	C
	ATOM	5469	ND1	HIS	F	357	35.108	-4.564	-62.960	1.00	57.20		N

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5469	ND1	HIS	F	357	7641	11040	3052	-709	1109	-802	N
	ATOM	5470	CE1	HIS	F	357	34.034	-4.029	-63.539	1.00	57.73		C
	ANISOU	5470	CE1	HIS	F	357	8005	11020	2910	-757	890	-629	C
	ATOM	5471	NE2	HIS	F	357	33.002	-4.895	-63.453	1.00	56.73		N
5	ANISOU	5471	NE2	HIS	F	357	7904	10798	2853	-597	644	-736	N
	ATOM	5472	CD2	HIS	F	357	33.429	-6.007	-62.764	1.00	55.77		C
	ANISOU	5472	CD2	HIS	F	357	7539	10666	2984	-449	720	-964	C
	ATOM	5473	C	HIS	F	357	37.379	-8.623	-62.026	1.00	57.96		C
	ANISOU	5473	C	HIS	F	357	7008	11315	3698	-68	1502	-1730	C
10	ATOM	5474	O	HIS	F	357	37.441	-9.312	-61.010	1.00	56.64		O
	ANISOU	5474	O	HIS	F	357	6685	11010	3825	136	1387	-1810	O
	ATOM	5475	N	GLU	F	358	38.424	-8.396	-62.813	1.00	60.88		N
	ANISOU	5475	N	GLU	F	358	7293	11938	3900	-169	1821	-1829	N
	ATOM	5476	CA	GLU	F	358	39.720	-9.030	-62.584	1.00	62.68		C
15	ANISOU	5476	CA	GLU	F	358	7182	12324	4310	-13	2054	-2080	C
	ATOM	5477	CB	GLU	F	358	40.114	-9.904	-63.775	1.00	66.22		C
	ANISOU	5477	CB	GLU	F	358	7711	12931	4519	53	2310	-2364	C
	ATOM	5478	CG	GLU	F	358	39.357	-11.213	-63.855	1.00	66.22		C
	ANISOU	5478	CG	GLU	F	358	7904	12729	4529	286	2137	-2540	C
20	ATOM	5479	CD	GLU	F	358	39.723	-12.027	-65.081	1.00	70.08		C
	ANISOU	5479	CD	GLU	F	358	8515	13362	4752	337	2398	-2837	C
	ATOM	5480	OE1	GLU	F	358	40.884	-11.947	-65.532	1.00	73.92		O
	ANISOU	5480	OE1	GLU	F	358	8787	14108	5193	324	2746	-3000	O
	ATOM	5481	OE2	GLU	F	358	38.844	-12.747	-65.596	1.00	70.92		O
25	ANISOU	5481	OE2	GLU	F	358	8924	13330	4693	377	2265	-2927	O
	ATOM	5482	C	GLU	F	358	40.822	-8.024	-62.297	1.00	63.33		C
	ANISOU	5482	C	GLU	F	358	6971	12606	4485	-186	2258	-2010	C
	ATOM	5483	O	GLU	F	358	41.201	-7.245	-63.165	1.00	65.86		O
	ANISOU	5483	O	GLU	F	358	7365	13110	4550	-452	2506	-1950	O
30	ATOM	5484	N	GLY	F	359	41.349	-8.079	-61.081	1.00	61.35		N
	ANISOU	5484	N	GLY	F	359	6404	12317	4590	-48	2153	-2027	N
	ATOM	5485	CA	GLY	F	359	42.408	-7.178	-60.650	1.00	62.41		C
	ANISOU	5485	CA	GLY	F	359	6211	12637	4866	-213	2303	-1990	C
	ATOM	5486	C	GLY	F	359	42.221	-6.774	-59.198	1.00	59.15		C
35	ANISOU	5486	C	GLY	F	359	5681	12045	4748	-161	2011	-1834	C
	ATOM	5487	O	GLY	F	359	41.145	-6.954	-58.626	1.00	55.46		O
	ANISOU	5487	O	GLY	F	359	5438	11308	4326	-64	1725	-1700	O
	ATOM	5488	N	TYR	F	360	43.272	-6.231	-58.597	1.00	60.49		N
	ANISOU	5488	N	TYR	F	360	5491	12378	5116	-241	2091	-1868	N
40	ATOM	5489	CA	TYR	F	360	43.140	-5.679	-57.274	1.00	58.50		C
	ANISOU	5489	CA	TYR	F	360	5160	11974	5092	-248	1830	-1716	C
	ATOM	5490	CB	TYR	F	360	44.441	-5.768	-56.483	1.00	61.17		C
	ANISOU	5490	CB	TYR	F	360	5016	12510	5718	-156	1845	-1890	C
	ATOM	5491	CG	TYR	F	360	44.405	-5.033	-55.139	1.00	60.37		C
45	ANISOU	5491	CG	TYR	F	360	4845	12280	5811	-223	1588	-1737	C
	ATOM	5492	CD1	TYR	F	360	44.129	-5.711	-53.941	1.00	57.83		C
	ANISOU	5492	CD1	TYR	F	360	4525	11766	5682	75	1267	-1742	C
	ATOM	5493	CE1	TYR	F	360	44.117	-5.040	-52.728	1.00	55.89		C
	ANISOU	5493	CE1	TYR	F	360	4244	11416	5577	3	1045	-1619	C
50	ATOM	5494	CZ	TYR	F	360	44.376	-3.669	-52.698	1.00	57.61		C
	ANISOU	5494	CZ	TYR	F	360	4417	11704	5768	-369	1137	-1499	C
	ATOM	5495	OH	TYR	F	360	44.375	-2.958	-51.515	1.00	56.33		O
	ANISOU	5495	OH	TYR	F	360	4240	11432	5729	-460	926	-1398	O
	ATOM	5496	CE2	TYR	F	360	44.640	-2.979	-53.864	1.00	60.25		C
55	ANISOU	5496	CE2	TYR	F	360	4762	12201	5929	-672	1451	-1478	C
	ATOM	5497	CD2	TYR	F	360	44.645	-3.656	-55.072	1.00	61.36		C
	ANISOU	5497	CD2	TYR	F	360	4949	12461	5906	-601	1675	-1589	C
	ATOM	5498	C	TYR	F	360	42.675	-4.246	-57.382	1.00	57.20		C
	ANISOU	5498	C	TYR	F	360	5212	11733	4789	-608	1840	-1441	C
60	ATOM	5499	O	TYR	F	360	43.193	-3.472	-58.181	1.00	59.56		O
	ANISOU	5499	O	TYR	F	360	5502	12205	4923	-901	2110	-1412	O
	ATOM	5500	N	GLU	F	361	41.695	-3.909	-56.553	1.00	53.97		N
	ANISOU	5500	N	GLU	F	361	5014	11047	4446	-581	1556	-1245	N
	ATOM	5501	CA	GLU	F	361	41.110	-2.579	-56.522	1.00	52.98		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5501	CA	GLU	F	361	5129	10781	4221	-857	1514	-981	C
	ATOM	5502	CB	GLU	F	361	39.809	-2.561	-57.329	1.00	51.91		C
	ANISOU	5502	CB	GLU	F	361	5403	10479	3840	-858	1435	-834	C
	ATOM	5503	CG	GLU	F	361	40.021	-2.601	-58.835	1.00	54.36		C
5	ANISOU	5503	CG	GLU	F	361	5852	10968	3836	-989	1691	-875	C
	ATOM	5504	CD	GLU	F	361	38.780	-3.055	-59.586	1.00	54.79		C
	ANISOU	5504	CD	GLU	F	361	6252	10895	3671	-887	1552	-820	C
	ATOM	5505	OE1	GLU	F	361	38.124	-4.047	-59.150	1.00	52.19		O
	ANISOU	5505	OE1	GLU	F	361	5923	10445	3464	-635	1355	-913	O
10	ATOM	5506	OE2	GLU	F	361	38.474	-2.410	-60.614	1.00	54.98		O
	ANISOU	5506	OE2	GLU	F	361	6559	10938	3391	-1074	1633	-684	O
	ATOM	5507	C	GLU	F	361	40.862	-2.085	-55.099	1.00	50.53		C
	ANISOU	5507	C	GLU	F	361	4782	10279	4137	-837	1267	-874	C
	ATOM	5508	O	GLU	F	361	40.743	-2.868	-54.158	1.00	48.99		O
15	ANISOU	5508	O	GLU	F	361	4492	9997	4125	-585	1074	-955	O
	ATOM	5509	N	GLU	F	362	40.781	-0.769	-54.967	1.00	50.77		N
	ANISOU	5509	N	GLU	F	362	4930	10227	4132	-1111	1284	-690	N
	ATOM	5510	CA	GLU	F	362	40.569	-0.116	-53.696	1.00	49.49		C
	ANISOU	5510	CA	GLU	F	362	4773	9883	4149	-1141	1086	-593	C
20	ATOM	5511	CB	GLU	F	362	41.853	0.602	-53.290	1.00	52.22		C
	ANISOU	5511	CB	GLU	F	362	4827	10402	4614	-1376	1204	-662	C
	ATOM	5512	CG	GLU	F	362	42.289	0.516	-51.833	1.00	53.76		C
	ANISOU	5512	CG	GLU	F	362	4795	10573	5058	-1278	995	-745	C
	ATOM	5513	CD	GLU	F	362	43.791	0.759	-51.700	1.00	59.82		C
25	ANISOU	5513	CD	GLU	F	362	5136	11637	5954	-1447	1128	-920	C
	ATOM	5514	OE1	GLU	F	362	44.203	1.943	-51.674	1.00	63.47		O
	ANISOU	5514	OE1	GLU	F	362	5597	12108	6413	-1798	1232	-851	O
	ATOM	5515	OE2	GLU	F	362	44.566	-0.232	-51.658	1.00	61.55		O
	ANISOU	5515	OE2	GLU	F	362	5018	12080	6288	-1231	1134	-1137	O
30	ATOM	5516	C	GLU	F	362	39.471	0.903	-53.950	1.00	47.93		C
	ANISOU	5516	C	GLU	F	362	4959	9439	3815	-1279	1021	-345	C
	ATOM	5517	O	GLU	F	362	39.619	1.764	-54.816	1.00	50.08		O
	ANISOU	5517	O	GLU	F	362	5385	9735	3909	-1529	1187	-230	O
	ATOM	5518	N	PHE	F	363	38.374	0.793	-53.206	1.00	44.53		N
35	ANISOU	5518	N	PHE	F	363	4688	8767	3465	-1111	788	-267	N
	ATOM	5519	CA	PHE	F	363	37.236	1.684	-53.350	1.00	43.24		C
	ANISOU	5519	CA	PHE	F	363	4850	8361	3218	-1169	690	-58	C
	ATOM	5520	CB	PHE	F	363	35.981	0.878	-53.683	1.00	40.67		C
	ANISOU	5520	CB	PHE	F	363	4673	7941	2838	-939	548	-53	C
40	ATOM	5521	CG	PHE	F	363	36.051	0.171	-54.979	1.00	40.68		C
	ANISOU	5521	CG	PHE	F	363	4709	8111	2635	-910	655	-120	C
	ATOM	5522	CD1	PHE	F	363	35.670	0.807	-56.150	1.00	41.53		C
	ANISOU	5522	CD1	PHE	F	363	5074	8214	2492	-1035	704	21	C
	ATOM	5523	CE1	PHE	F	363	35.734	0.141	-57.373	1.00	42.89		C
45	ANISOU	5523	CE1	PHE	F	363	5312	8550	2433	-1019	806	-55	C
	ATOM	5524	CZ	PHE	F	363	36.189	-1.158	-57.422	1.00	42.89		C
	ANISOU	5524	CZ	PHE	F	363	5110	8707	2481	-871	874	-284	C
	ATOM	5525	CE2	PHE	F	363	36.573	-1.800	-56.244	1.00	41.85		C
	ANISOU	5525	CE2	PHE	F	363	4721	8557	2623	-723	816	-416	C
50	ATOM	5526	CD2	PHE	F	363	36.503	-1.134	-55.038	1.00	39.67		C
	ANISOU	5526	CD2	PHE	F	363	4392	8132	2547	-749	702	-327	C
	ATOM	5527	C	PHE	F	363	36.925	2.473	-52.094	1.00	42.77		C
	ANISOU	5527	C	PHE	F	363	4840	8086	3327	-1199	550	18	C
	ATOM	5528	O	PHE	F	363	37.135	2.007	-50.973	1.00	41.83		O
55	ANISOU	5528	O	PHE	F	363	4561	7954	3377	-1087	450	-85	O
	ATOM	5529	N	THR	F	364	36.389	3.667	-52.305	1.00	43.89		N
	ANISOU	5529	N	THR	F	364	5240	8037	3400	-1337	537	201	N
	ATOM	5530	CA	THR	F	364	35.644	4.393	-51.289	1.00	42.92		C
	ANISOU	5530	CA	THR	F	364	5254	7647	3406	-1303	388	282	C
60	ATOM	5531	CB	THR	F	364	35.989	5.912	-51.391	1.00	45.24		C
	ANISOU	5531	CB	THR	F	364	5738	7796	3655	-1580	468	427	C
	ATOM	5532	OG1	THR	F	364	36.808	6.290	-50.279	1.00	45.24		O
	ANISOU	5532	OG1	THR	F	364	5587	7795	3810	-1716	475	338	O
	ATOM	5533	CG2	THR	F	364	34.757	6.819	-51.449	1.00	46.04		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5533	CG2	THR	F	364	6170	7588	3736	-1510	345	604	C
	ATOM	5534	C	THR	F	364	34.153	4.071	-51.527	1.00	41.58		C
	ANISOU	5534	C	THR	F	364	5252	7332	3215	-1076	236	345	C
	ATOM	5535	O	THR	F	364	33.686	4.150	-52.663	1.00	43.15		O
5	ANISOU	5535	O	THR	F	364	5607	7543	3244	-1066	239	436	O
	ATOM	5536	N	MSE	F	365	33.435	3.668	-50.475	1.00	39.53		N
	ANISOU	5536	N	MSE	F	365	4952	6953	3115	-905	109	284	N
	ATOM	5537	CA	MSE	F	365	31.970	3.467	-50.514	1.00	38.74		C
	ANISOU	5537	CA	MSE	F	365	4959	6713	3047	-717	-25	317	C
10	ATOM	5538	CB	MSE	F	365	31.558	2.102	-49.967	1.00	36.04		C
	ANISOU	5538	CB	MSE	F	365	4475	6423	2797	-544	-77	168	C
	ATOM	5539	CG	MSE	F	365	32.040	0.907	-50.754	1.00	36.93		C
	ANISOU	5539	CG	MSE	F	365	4478	6743	2812	-498	-25	64	C
	ATOM	5540	SE	MSE	F	365	31.519	-0.802	-49.939	0.90	39.05		SE
15	ANISOU	5540	SE	MSE	F	365	4645	6991	3203	-298	-87	-113	SE
	ATOM	5541	CE	MSE	F	365	29.589	-0.577	-49.841	1.00	35.91		C
	ANISOU	5541	CE	MSE	F	365	4355	6406	2882	-215	-210	-68	C
	ATOM	5542	C	MSE	F	365	31.317	4.540	-49.661	1.00	37.78		C
	ANISOU	5542	C	MSE	F	365	4972	6339	3046	-712	-92	392	C
20	ATOM	5543	O	MSE	F	365	31.692	4.733	-48.500	1.00	37.16		O
	ANISOU	5543	O	MSE	F	365	4845	6192	3080	-755	-78	332	O
	ATOM	5544	N	VAL	F	366	30.362	5.267	-50.226	1.00	38.03		N
	ANISOU	5544	N	VAL	F	366	5182	6223	3045	-647	-175	514	N
	ATOM	5545	CA	VAL	F	366	29.724	6.334	-49.460	1.00	38.03		C
25	ANISOU	5545	CA	VAL	F	366	5316	5962	3171	-610	-229	570	C
	ATOM	5546	CB	VAL	F	366	30.225	7.753	-49.873	1.00	40.41		C
	ANISOU	5546	CB	VAL	F	366	5862	6104	3387	-782	-188	733	C
	ATOM	5547	CG1	VAL	F	366	29.484	8.835	-49.096	1.00	40.76		C
	ANISOU	5547	CG1	VAL	F	366	6072	5842	3573	-704	-250	771	C
30	ATOM	5548	CG2	VAL	F	366	31.728	7.887	-49.656	1.00	39.69		C
	ANISOU	5548	CG2	VAL	F	366	5703	6126	3250	-1053	-37	699	C
	ATOM	5549	C	VAL	F	366	28.216	6.220	-49.565	1.00	37.81		C
	ANISOU	5549	C	VAL	F	366	5297	5841	3228	-377	-366	566	C
	ATOM	5550	O	VAL	F	366	27.635	6.467	-50.626	1.00	39.06		O
35	ANISOU	5550	O	VAL	F	366	5559	5991	3289	-297	-470	667	O
	ATOM	5551	N	GLY	F	367	27.601	5.809	-48.458	1.00	36.34		N
	ANISOU	5551	N	GLY	F	367	4995	5600	3214	-276	-367	439	N
	ATOM	5552	CA	GLY	F	367	26.149	5.662	-48.373	1.00	35.97		C
	ANISOU	5552	CA	GLY	F	367	4885	5486	3296	-73	-463	389	C
40	ATOM	5553	C	GLY	F	367	25.571	6.755	-47.502	1.00	37.01		C
	ANISOU	5553	C	GLY	F	367	5111	5371	3580	-2	-460	393	C
	ATOM	5554	O	GLY	F	367	26.298	7.648	-47.027	1.00	37.55		O
	ANISOU	5554	O	GLY	F	367	5332	5300	3634	-122	-397	444	O
	ATOM	5555	N	LYS	F	368	24.263	6.678	-47.289	1.00	37.07		N
45	ANISOU	5555	N	LYS	F	368	5015	5327	3743	187	-521	315	N
	ATOM	5556	CA	LYS	F	368	23.522	7.707	-46.596	1.00	39.14		C
	ANISOU	5556	CA	LYS	F	368	5344	5357	4169	313	-519	293	C
	ATOM	5557	CB	LYS	F	368	22.035	7.565	-46.942	1.00	40.86		C
	ANISOU	5557	CB	LYS	F	368	5388	5594	4542	553	-639	224	C
50	ATOM	5558	CG	LYS	F	368	21.244	8.827	-46.755	1.00	45.35		C
	ANISOU	5558	CG	LYS	F	368	6044	5921	5265	758	-706	244	C
	ATOM	5559	CD	LYS	F	368	20.322	9.053	-47.934	1.00	52.09		C
	ANISOU	5559	CD	LYS	F	368	6847	6803	6142	988	-956	316	C
	ATOM	5560	CE	LYS	F	368	21.070	9.688	-49.121	1.00	54.74		C
55	ANISOU	5560	CE	LYS	F	368	7484	7077	6236	936	-1094	561	C
	ATOM	5561	NZ	LYS	F	368	20.132	10.022	-50.240	1.00	57.30		N
	ANISOU	5561	NZ	LYS	F	368	7821	7398	6554	1192	-1381	650	N
	ATOM	5562	C	LYS	F	368	23.751	7.641	-45.067	1.00	37.84		C
	ANISOU	5562	C	LYS	F	368	5174	5115	4090	229	-347	158	C
60	ATOM	5563	O	LYS	F	368	23.754	8.670	-44.375	1.00	38.54		O
	ANISOU	5563	O	LYS	F	368	5412	4988	4245	237	-298	153	O
	ATOM	5564	N	ARG	F	369	23.945	6.421	-44.577	1.00	35.65		N
	ANISOU	5564	N	ARG	F	369	4759	4999	3789	150	-265	51	N
	ATOM	5565	CA	ARG	F	369	24.089	6.136	-43.170	1.00	35.10		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5565	CA	ARG	F	369	4704	4880	3753	76	-120	-72	C
	ATOM	5566	CB	ARG	F	369	22.839	5.418	-42.628	1.00	35.16		C
	ANISOU	5566	CB	ARG	F	369	4548	4914	3898	172	-37	-226	C
	ATOM	5567	CG	ARG	F	369	21.534	6.240	-42.641	1.00	36.78		C
5	ANISOU	5567	CG	ARG	F	369	4677	4998	4298	364	-46	-284	C
	ATOM	5568	CD	ARG	F	369	20.626	5.893	-41.434	1.00	39.03		C
	ANISOU	5568	CD	ARG	F	369	4867	5249	4714	379	152	-479	C
	ATOM	5569	NE	ARG	F	369	20.476	7.016	-40.493	1.00	39.37		N
	ANISOU	5569	NE	ARG	F	369	5053	5078	4826	428	260	-540	N
10	ATOM	5570	CZ	ARG	F	369	20.294	6.888	-39.186	1.00	41.20		C
	ANISOU	5570	CZ	ARG	F	369	5349	5245	5059	356	470	-682	C
	ATOM	5571	NH1	ARG	F	369	20.260	5.688	-38.625	1.00	40.27		N
	ANISOU	5571	NH1	ARG	F	369	5187	5244	4870	225	594	-756	N
	ATOM	5572	NH2	ARG	F	369	20.172	7.967	-38.423	1.00	45.93		N
15	ANISOU	5572	NH2	ARG	F	369	6100	5643	5708	408	562	-750	N
	ATOM	5573	C	ARG	F	369	25.349	5.297	-42.903	1.00	33.83		C
	ANISOU	5573	C	ARG	F	369	4557	4853	3444	-89	-92	-70	C
	ATOM	5574	O	ARG	F	369	25.582	4.876	-41.779	1.00	33.68		O
	ANISOU	5574	O	ARG	F	369	4575	4816	3407	-150	-7	-158	O
20	ATOM	5575	N	ALA	F	370	26.165	5.072	-43.928	1.00	33.74		N
	ANISOU	5575	N	ALA	F	370	4525	4977	3319	-148	-165	25	N
	ATOM	5576	CA	ALA	F	370	27.433	4.376	-43.756	1.00	33.32		C
	ANISOU	5576	CA	ALA	F	370	4448	5061	3152	-271	-149	14	C
	ATOM	5577	CB	ALA	F	370	27.219	2.866	-43.786	1.00	32.53		C
25	ANISOU	5577	CB	ALA	F	370	4229	5094	3036	-219	-139	-68	C
	ATOM	5578	C	ALA	F	370	28.480	4.805	-44.796	1.00	34.46		C
	ANISOU	5578	C	ALA	F	370	4607	5301	3186	-377	-183	124	C
	ATOM	5579	O	ALA	F	370	28.141	5.420	-45.821	1.00	35.44		O
	ANISOU	5579	O	ALA	F	370	4786	5396	3282	-351	-228	227	O
30	ATOM	5580	N	THR	F	371	29.749	4.533	-44.485	1.00	34.41		N
	ANISOU	5580	N	THR	F	371	4557	5404	3113	-500	-162	97	N
	ATOM	5581	CA	THR	F	371	30.877	4.693	-45.401	1.00	35.72		C
	ANISOU	5581	CA	THR	F	371	4675	5719	3179	-628	-147	157	C
	ATOM	5582	CB	THR	F	371	31.658	6.063	-45.259	1.00	37.27		C
35	ANISOU	5582	CB	THR	F	371	4983	5816	3361	-831	-115	222	C
	ATOM	5583	OG1	THR	F	371	32.299	6.139	-43.983	1.00	39.27		O
	ANISOU	5583	OG1	THR	F	371	5217	6048	3656	-912	-125	125	O
	ATOM	5584	CG2	THR	F	371	30.771	7.277	-45.436	1.00	38.77		C
	ANISOU	5584	CG2	THR	F	371	5387	5755	3590	-806	-128	324	C
40	ATOM	5585	C	THR	F	371	31.864	3.567	-45.105	1.00	35.06		C
	ANISOU	5585	C	THR	F	371	4426	5831	3065	-633	-144	55	C
	ATOM	5586	O	THR	F	371	31.992	3.125	-43.961	1.00	34.68		O
	ANISOU	5586	O	THR	F	371	4370	5753	3055	-598	-175	-28	O
	ATOM	5587	N	ALA	F	372	32.582	3.125	-46.131	1.00	35.32		N
45	ANISOU	5587	N	ALA	F	372	4346	6058	3017	-666	-110	60	N
	ATOM	5588	CA	ALA	F	372	33.520	2.019	-45.996	1.00	34.84		C
	ANISOU	5588	CA	ALA	F	372	4107	6186	2944	-621	-112	-50	C
	ATOM	5589	CB	ALA	F	372	32.796	0.677	-46.224	1.00	33.58		C
	ANISOU	5589	CB	ALA	F	372	3933	6046	2781	-434	-136	-111	C
50	ATOM	5590	C	ALA	F	372	34.709	2.162	-46.952	1.00	36.35		C
	ANISOU	5590	C	ALA	F	372	4157	6590	3064	-749	-25	-55	C
	ATOM	5591	O	ALA	F	372	34.637	2.846	-47.979	1.00	37.00		O
	ANISOU	5591	O	ALA	F	372	4314	6683	3060	-860	51	41	O
	ATOM	5592	N	ILE	F	373	35.809	1.530	-46.579	1.00	36.90		N
55	ANISOU	5592	N	ILE	F	373	4028	6828	3166	-731	-35	-172	N
	ATOM	5593	CA	ILE	F	373	36.920	1.327	-47.482	1.00	38.46		C
	ANISOU	5593	CA	ILE	F	373	4023	7274	3317	-805	74	-232	C
	ATOM	5594	CB	ILE	F	373	38.271	1.774	-46.878	1.00	40.52		C
	ANISOU	5594	CB	ILE	F	373	4067	7677	3652	-954	71	-316	C
60	ATOM	5595	CG1	ILE	F	373	38.285	3.292	-46.705	1.00	41.82		C
	ANISOU	5595	CG1	ILE	F	373	4365	7713	3813	-1228	112	-214	C
	ATOM	5596	CD1	ILE	F	373	38.951	3.744	-45.409	1.00	46.04		C
	ANISOU	5596	CD1	ILE	F	373	4819	8231	4445	-1323	-5	-292	C
	ATOM	5597	CG2	ILE	F	373	39.438	1.353	-47.777	1.00	42.20		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5597	CG2	ILE	F	373	3998	8188	3847	-998	208	-427	C
	ATOM	5598	C	ILE	F	373	36.917	-0.152	-47.827	1.00	37.80		C
	ANISOU	5598	C	ILE	F	373	3843	7296	3223	-576	62	-341	C
	ATOM	5599	O	ILE	F	373	37.018	-1.025	-46.943	1.00	36.27		O
5	ANISOU	5599	O	ILE	F	373	3606	7073	3101	-402	-52	-425	O
	ATOM	5600	N	LEU	F	374	36.771	-0.409	-49.125	1.00	37.99		N
	ANISOU	5600	N	LEU	F	374	3882	7418	3136	-580	175	-333	N
	ATOM	5601	CA	LEU	F	374	36.835	-1.740	-49.675	1.00	37.72		C
	ANISOU	5601	CA	LEU	F	374	3776	7485	3070	-391	197	-455	C
10	ATOM	5602	CB	LEU	F	374	35.600	-2.008	-50.541	1.00	36.81		C
	ANISOU	5602	CB	LEU	F	374	3865	7278	2844	-346	196	-396	C
	ATOM	5603	CG	LEU	F	374	35.410	-3.409	-51.127	1.00	35.70		C
	ANISOU	5603	CG	LEU	F	374	3719	7187	2659	-167	206	-529	C
	ATOM	5604	CD1	LEU	F	374	35.355	-4.482	-50.037	1.00	32.88		C
15	ANISOU	5604	CD1	LEU	F	374	3345	6714	2434	29	94	-622	C
	ATOM	5605	CD2	LEU	F	374	34.154	-3.412	-51.980	1.00	36.04		C
	ANISOU	5605	CD2	LEU	F	374	3956	7151	2586	-180	174	-465	C
	ATOM	5606	C	LEU	F	374	38.114	-1.935	-50.495	1.00	40.40		C
	ANISOU	5606	C	LEU	F	374	3881	8101	3369	-441	359	-571	C
20	ATOM	5607	O	LEU	F	374	38.330	-1.244	-51.491	1.00	41.59		O
	ANISOU	5607	O	LEU	F	374	4056	8354	3393	-631	516	-515	O
	ATOM	5608	N	ARG	F	375	38.958	-2.863	-50.040	1.00	41.39		N
	ANISOU	5608	N	ARG	F	375	3788	8340	3600	-264	322	-734	N
	ATOM	5609	CA	ARG	F	375	40.081	-3.367	-50.817	1.00	44.76		C
25	ANISOU	5609	CA	ARG	F	375	3954	9037	4017	-227	480	-901	C
	ATOM	5610	CB	ARG	F	375	41.365	-3.461	-49.975	1.00	46.06		C
	ANISOU	5610	CB	ARG	F	375	3782	9363	4356	-167	416	-1037	C
	ATOM	5611	CG	ARG	F	375	41.765	-2.160	-49.277	1.00	47.35		C
	ANISOU	5611	CG	ARG	F	375	3874	9536	4580	-429	379	-955	C
30	ATOM	5612	CD	ARG	F	375	43.214	-2.192	-48.753	1.00	51.18		C
	ANISOU	5612	CD	ARG	F	375	3943	10275	5227	-420	344	-1131	C
	ATOM	5613	NE	ARG	F	375	43.464	-1.175	-47.726	1.00	56.01		N
	ANISOU	5613	NE	ARG	F	375	4529	10837	5914	-618	213	-1075	N
	ATOM	5614	CZ	ARG	F	375	44.650	-0.608	-47.469	1.00	59.99		C
35	ANISOU	5614	CZ	ARG	F	375	4690	11572	6531	-795	230	-1192	C
	ATOM	5615	NH1	ARG	F	375	45.730	-0.928	-48.175	1.00	63.23		N
	ANISOU	5615	NH1	ARG	F	375	4713	12304	7009	-801	399	-1375	N
	ATOM	5616	NH2	ARG	F	375	44.757	0.294	-46.496	1.00	61.29		N
	ANISOU	5616	NH2	ARG	F	375	4888	11655	6746	-981	88	-1145	N
40	ATOM	5617	C	ARG	F	375	39.650	-4.740	-51.345	1.00	44.39		C
	ANISOU	5617	C	ARG	F	375	3991	8951	3922	26	478	-1009	C
	ATOM	5618	O	ARG	F	375	39.022	-5.515	-50.620	1.00	42.96		O
	ANISOU	5618	O	ARG	F	375	3945	8574	3804	217	312	-1010	O
	ATOM	5619	N	LYS	F	376	39.987	-5.036	-52.600	1.00	46.26		N
45	ANISOU	5619	N	LYS	F	376	4176	9365	4035	5	679	-1106	N
	ATOM	5620	CA	LYS	F	376	39.348	-6.134	-53.320	1.00	46.24		C
	ANISOU	5620	CA	LYS	F	376	4340	9297	3933	173	694	-1190	C
	ATOM	5621	CB	LYS	F	376	38.040	-5.601	-53.905	1.00	45.02		C
	ANISOU	5621	CB	LYS	F	376	4494	9002	3608	21	666	-1020	C
50	ATOM	5622	CG	LYS	F	376	37.218	-6.592	-54.639	1.00	45.84		C
	ANISOU	5622	CG	LYS	F	376	4788	9030	3597	138	648	-1099	C
	ATOM	5623	CD	LYS	F	376	36.312	-5.902	-55.630	1.00	45.93		C
	ANISOU	5623	CD	LYS	F	376	5028	9033	3391	-41	662	-965	C
	ATOM	5624	CE	LYS	F	376	35.659	-6.942	-56.497	1.00	47.28		C
55	ANISOU	5624	CE	LYS	F	376	5357	9181	3425	56	651	-1090	C
	ATOM	5625	NZ	LYS	F	376	36.674	-7.533	-57.410	1.00	49.17		N
	ANISOU	5625	NZ	LYS	F	376	5499	9636	3547	101	872	-1286	N
	ATOM	5626	C	LYS	F	376	40.212	-6.718	-54.445	1.00	49.04		C
	ANISOU	5626	C	LYS	F	376	4537	9897	4199	227	926	-1392	C
60	ATOM	5627	O	LYS	F	376	40.914	-5.980	-55.142	1.00	51.37		O
	ANISOU	5627	O	LYS	F	376	4701	10414	4403	20	1140	-1400	O
	ATOM	5628	N	ALA	F	377	40.148	-8.041	-54.624	1.00	48.89		N
	ANISOU	5628	N	ALA	F	377	4554	9824	4200	490	905	-1564	N
	ATOM	5629	CA	ALA	F	377	40.819	-8.718	-55.746	1.00	50.86		C

## ES 2 454 773 T3

		ANISOU	5629	CA	ALA	F	377	4702	10273	4349	573	1136	-1786	C
		ATOM	5630	CB	ALA	F	377	41.903	-9.649	-55.227	1.00	53.08		C
		ANISOU	5630	CB	ALA	F	377	4691	10631	4845	884	1125	-2013	C
		ATOM	5631	C	ALA	F	377	39.807	-9.480	-56.625	1.00	50.17		C
5		ANISOU	5631	C	ALA	F	377	4938	10055	4069	617	1139	-1830	C
		ATOM	5632	O	ALA	F	377	38.594	-9.335	-56.445	1.00	47.07		O
		ANISOU	5632	O	ALA	F	377	4807	9454	3625	543	972	-1675	O
		ATOM	5633	N	THR	F	378	40.302	-10.282	-57.575	1.00	52.64		N
		ANISOU	5633	N	THR	F	378	5218	10501	4283	731	1331	-2062	N
10		ATOM	5634	CA	THR	F	378	39.443	-11.109	-58.447	1.00	52.30		C
		ANISOU	5634	CA	THR	F	378	5480	10344	4050	774	1333	-2154	C
		ATOM	5635	CB	THR	F	378	40.261	-11.862	-59.508	1.00	56.31		C
		ANISOU	5635	CB	THR	F	378	5911	11045	4441	890	1603	-2444	C
		ATOM	5636	OG1	THR	F	378	41.023	-10.926	-60.282	1.00	58.56		O
15		ANISOU	5636	OG1	THR	F	378	6043	11640	4566	661	1879	-2434	O
		ATOM	5637	CG2	THR	F	378	39.345	-12.685	-60.420	1.00	56.32		C
		ANISOU	5637	CG2	THR	F	378	6258	10920	4219	905	1590	-2552	C
		ATOM	5638	C	THR	F	378	38.624	-12.111	-57.623	1.00	50.10		C
20		ANISOU	5638	C	THR	F	378	5380	9738	3920	974	1085	-2166	C
		ATOM	5639	O	THR	F	378	39.174	-13.029	-57.010	1.00	50.63		O
		ANISOU	5639	O	THR	F	378	5354	9711	4174	1249	1041	-2309	O
		ATOM	5640	N	ARG	F	379	37.307	-11.917	-57.630	1.00	47.53		N
		ANISOU	5640	N	ARG	F	379	5314	9237	3507	831	928	-2016	N
		ATOM	5641	CA	ARG	F	379	36.375	-12.691	-56.812	1.00	45.98		C
25		ANISOU	5641	CA	ARG	F	379	5299	8730	3442	929	717	-1996	C
		ATOM	5642	CB	ARG	F	379	35.991	-13.986	-57.509	1.00	47.10		C
		ANISOU	5642	CB	ARG	F	379	5649	8750	3497	1039	741	-2218	C
		ATOM	5643	CG	ARG	F	379	35.553	-13.795	-58.975	1.00	49.36		C
		ANISOU	5643	CG	ARG	F	379	6077	9194	3483	864	839	-2280	C
30		ATOM	5644	CD	ARG	F	379	34.872	-15.036	-59.519	1.00	49.19		C
		ANISOU	5644	CD	ARG	F	379	6310	8999	3381	920	800	-2486	C
		ATOM	5645	NE	ARG	F	379	33.688	-15.336	-58.716	1.00	48.20		N
		ANISOU	5645	NE	ARG	F	379	6327	8598	3390	864	582	-2392	N
		ATOM	5646	CZ	ARG	F	379	32.926	-16.417	-58.847	1.00	48.36		C
35		ANISOU	5646	CZ	ARG	F	379	6569	8396	3409	870	509	-2542	C
		ATOM	5647	NH1	ARG	F	379	33.204	-17.326	-59.776	1.00	50.81		N
		ANISOU	5647	NH1	ARG	F	379	7015	8710	3582	951	618	-2802	N
		ATOM	5648	NH2	ARG	F	379	31.886	-16.587	-58.042	1.00	43.85		N
		ANISOU	5648	NH2	ARG	F	379	6090	7596	2976	779	346	-2448	N
40		ATOM	5649	C	ARG	F	379	36.840	-12.931	-55.347	1.00	45.52		C
		ANISOU	5649	C	ARG	F	379	5126	8523	3646	1110	592	-1952	C
		ATOM	5650	O	ARG	F	379	36.679	-14.029	-54.799	1.00	46.28		O
		ANISOU	5650	O	ARG	F	379	5352	8383	3849	1302	501	-2041	O
		ATOM	5651	N	ARG	F	380	37.400	-11.897	-54.717	1.00	44.64		N
45		ANISOU	5651	N	ARG	F	380	4807	8534	3618	1036	579	-1811	N
		ATOM	5652	CA	ARG	F	380	37.835	-11.998	-53.324	1.00	44.23		C
		ANISOU	5652	CA	ARG	F	380	4663	8367	3777	1184	430	-1758	C
		ATOM	5653	CB	ARG	F	380	39.209	-12.663	-53.248	1.00	47.80		C
		ANISOU	5653	CB	ARG	F	380	4876	8940	4345	1461	483	-1956	C
50		ATOM	5654	CG	ARG	F	380	39.793	-12.813	-51.838	1.00	49.84		C
		ANISOU	5654	CG	ARG	F	380	5033	9103	4802	1655	286	-1915	C
		ATOM	5655	CD	ARG	F	380	41.062	-13.651	-51.917	1.00	56.80		C
		ANISOU	5655	CD	ARG	F	380	5680	10096	5807	1991	313	-2147	C
		ATOM	5656	NE	ARG	F	380	42.171	-13.087	-51.147	1.00	61.43		N
55		ANISOU	5656	NE	ARG	F	380	5917	10875	6548	2062	223	-2147	N
		ATOM	5657	CZ	ARG	F	380	43.388	-12.828	-51.635	1.00	64.11		C
		ANISOU	5657	CZ	ARG	F	380	5845	11552	6964	2111	368	-2317	C
		ATOM	5658	NH1	ARG	F	380	43.677	-13.067	-52.908	1.00	65.91		N
		ANISOU	5658	NH1	ARG	F	380	5980	11960	7104	2099	641	-2496	N
60		ATOM	5659	NH2	ARG	F	380	44.326	-12.326	-50.842	1.00	65.00		N
		ANISOU	5659	NH2	ARG	F	380	5629	11835	7234	2157	247	-2324	N
		ATOM	5660	C	ARG	F	380	37.852	-10.660	-52.621	1.00	41.88		C
		ANISOU	5660	C	ARG	F	380	4256	8133	3523	993	370	-1553	C
		ATOM	5661	O	ARG	F	380	38.517	-9.734	-53.075	1.00	42.95		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5661	O	ARG	F	380	4196	8508	3614	848	494	-1530	O
	ATOM	5662	N	LEU	F	381	37.099	-10.574	-51.519	1.00	39.44		N
	ANISOU	5662	N	LEU	F	381	4100	7595	3292	975	200	-1415	N
	ATOM	5663	CA	LEU	F	381	37.138	-9.447	-50.574	1.00	37.48		C
5	ANISOU	5663	CA	LEU	F	381	3781	7350	3109	840	116	-1247	C
	ATOM	5664	CB	LEU	F	381	35.919	-9.479	-49.643	1.00	35.32		C
	ANISOU	5664	CB	LEU	F	381	3754	6800	2866	791	-16	-1118	C
	ATOM	5665	CG	LEU	F	381	35.557	-8.300	-48.733	1.00	33.09		C
	ANISOU	5665	CG	LEU	F	381	3486	6465	2620	628	-85	-947	C
10	ATOM	5666	CD1	LEU	F	381	34.028	-8.185	-48.630	1.00	28.32		C
	ANISOU	5666	CD1	LEU	F	381	3096	5671	1992	513	-108	-858	C
	ATOM	5667	CD2	LEU	F	381	36.185	-8.462	-47.322	1.00	32.20		C
	ANISOU	5667	CD2	LEU	F	381	3358	6270	2605	750	-225	-936	C
	ATOM	5668	C	LEU	F	381	38.412	-9.549	-49.763	1.00	38.85		C
15	ANISOU	5668	C	LEU	F	381	3730	7616	3415	1002	44	-1313	C
	ATOM	5669	O	LEU	F	381	38.661	-10.569	-49.124	1.00	39.13		O
	ANISOU	5669	O	LEU	F	381	3822	7515	3530	1250	-72	-1389	O
	ATOM	5670	N	VAL	F	382	39.229	-8.500	-49.829	1.00	39.49		N
	ANISOU	5670	N	VAL	F	382	3562	7926	3518	858	106	-1289	N
20	ATOM	5671	CA	VAL	F	382	40.512	-8.475	-49.144	1.00	41.58		C
	ANISOU	5671	CA	VAL	F	382	3538	8340	3920	980	28	-1378	C
	ATOM	5672	CB	VAL	F	382	41.603	-7.708	-49.966	1.00	43.41		C
	ANISOU	5672	CB	VAL	F	382	3420	8920	4155	821	228	-1467	C
	ATOM	5673	CG1	VAL	F	382	42.891	-7.551	-49.173	1.00	44.97		C
25	ANISOU	5673	CG1	VAL	F	382	3263	9301	4525	909	121	-1569	C
	ATOM	5674	CG2	VAL	F	382	41.887	-8.422	-51.295	1.00	45.12		C
	ANISOU	5674	CG2	VAL	F	382	3569	9282	4293	909	448	-1638	C
	ATOM	5675	C	VAL	F	382	40.312	-7.883	-47.743	1.00	40.72		C
	ANISOU	5675	C	VAL	F	382	3510	8092	3870	921	-175	-1239	C
30	ATOM	5676	O	VAL	F	382	40.756	-8.472	-46.752	1.00	41.67		O
	ANISOU	5676	O	VAL	F	382	3618	8139	4075	1138	-368	-1279	O
	ATOM	5677	N	GLN	F	383	39.620	-6.740	-47.677	1.00	39.32		N
	ANISOU	5677	N	GLN	F	383	3446	7862	3630	645	-138	-1080	N
	ATOM	5678	CA	GLN	F	383	39.373	-6.002	-46.438	1.00	38.54		C
35	ANISOU	5678	CA	GLN	F	383	3444	7637	3564	546	-287	-961	C
	ATOM	5679	CB	GLN	F	383	40.628	-5.223	-46.012	1.00	40.51		C
	ANISOU	5679	CB	GLN	F	383	3390	8104	3898	455	-334	-1014	C
	ATOM	5680	CG	GLN	F	383	40.645	-4.744	-44.547	1.00	40.45		C
	ANISOU	5680	CG	GLN	F	383	3469	7978	3921	423	-545	-949	C
40	ATOM	5681	CD	GLN	F	383	41.875	-3.885	-44.209	1.00	43.46		C
	ANISOU	5681	CD	GLN	F	383	3531	8595	4388	279	-598	-1023	C
	ATOM	5682	OE1	GLN	F	383	42.401	-3.158	-45.063	1.00	47.32		O
	ANISOU	5682	OE1	GLN	F	383	3803	9284	4893	65	-416	-1057	O
	ATOM	5683	NE2	GLN	F	383	42.331	-3.969	-42.958	1.00	43.22		N
45	ANISOU	5683	NE2	GLN	F	383	3486	8538	4398	376	-848	-1052	N
	ATOM	5684	C	GLN	F	383	38.227	-5.022	-46.652	1.00	36.57		C
	ANISOU	5684	C	GLN	F	383	3400	7259	3236	306	-212	-801	C
	ATOM	5685	O	GLN	F	383	38.119	-4.405	-47.720	1.00	37.21		O
	ANISOU	5685	O	GLN	F	383	3447	7443	3248	144	-58	-768	O
50	ATOM	5686	N	LEU	F	384	37.369	-4.907	-45.642	1.00	34.97		N
	ANISOU	5686	N	LEU	F	384	3425	6828	3036	299	-318	-709	N
	ATOM	5687	CA	LEU	F	384	36.306	-3.912	-45.594	1.00	33.66		C
	ANISOU	5687	CA	LEU	F	384	3428	6527	2834	111	-275	-576	C
	ATOM	5688	CB	LEU	F	384	34.924	-4.535	-45.873	1.00	31.81		C
55	ANISOU	5688	CB	LEU	F	384	3403	6118	2566	163	-248	-546	C
	ATOM	5689	CG	LEU	F	384	33.659	-3.661	-45.748	1.00	30.14		C
	ANISOU	5689	CG	LEU	F	384	3344	5757	2352	32	-224	-435	C
	ATOM	5690	CD1	LEU	F	384	33.439	-2.719	-46.929	1.00	25.61		C
	ANISOU	5690	CD1	LEU	F	384	2737	5271	1724	-100	-144	-364	C
60	ATOM	5691	CD2	LEU	F	384	32.413	-4.513	-45.509	1.00	29.87		C
	ANISOU	5691	CD2	LEU	F	384	3472	5546	2330	101	-229	-452	C
	ATOM	5692	C	LEU	F	384	36.364	-3.301	-44.207	1.00	33.92		C
	ANISOU	5692	C	LEU	F	384	3539	6450	2901	56	-390	-531	C
	ATOM	5693	O	LEU	F	384	36.411	-4.017	-43.192	1.00	34.45		O



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5693	O	LEU	F	384	3703	6414	2973	195	-514	-559	O
	ATOM	5694	N	ILE	F	385	36.419	-1.976	-44.173	1.00	34.62		N
	ANISOU	5694	N	ILE	F	385	3612	6550	2992	-150	-352	-464	N
	ATOM	5695	CA	ILE	F	385	36.450	-1.228	-42.930	1.00	35.04		C
5	ANISOU	5695	CA	ILE	F	385	3759	6494	3061	-238	-445	-436	C
	ATOM	5696	CB	ILE	F	385	37.718	-0.361	-42.822	1.00	36.95		C
	ANISOU	5696	CB	ILE	F	385	3794	6908	3338	-401	-473	-480	C
	ATOM	5697	CG1	ILE	F	385	38.985	-1.211	-43.001	1.00	38.55		C
	ANISOU	5697	CG1	ILE	F	385	3710	7352	3587	-268	-538	-611	C
10	ATOM	5698	CD1	ILE	F	385	40.287	-0.384	-43.171	1.00	41.49		C
	ANISOU	5698	CD1	ILE	F	385	3783	7960	4019	-466	-520	-687	C
	ATOM	5699	CG2	ILE	F	385	37.746	0.385	-41.474	1.00	37.52		C
	ANISOU	5699	CG2	ILE	F	385	3994	6855	3407	-499	-592	-475	C
	ATOM	5700	C	ILE	F	385	35.213	-0.350	-42.996	1.00	34.38		C
15	ANISOU	5700	C	ILE	F	385	3874	6223	2965	-350	-364	-332	C
	ATOM	5701	O	ILE	F	385	35.148	0.522	-43.864	1.00	35.97		O
	ANISOU	5701	O	ILE	F	385	4050	6456	3159	-485	-273	-270	O
	ATOM	5702	N	VAL	F	386	34.230	-0.603	-42.119	1.00	32.76		N
	ANISOU	5702	N	VAL	F	386	3871	5822	2755	-286	-389	-317	N
20	ATOM	5703	CA	VAL	F	386	32.929	0.098	-42.139	1.00	31.18		C
	ANISOU	5703	CA	VAL	F	386	3822	5448	2576	-341	-310	-251	C
	ATOM	5704	CB	VAL	F	386	31.707	-0.895	-42.196	1.00	30.22		C
	ANISOU	5704	CB	VAL	F	386	3791	5226	2465	-223	-267	-266	C
	ATOM	5705	CG1	VAL	F	386	30.411	-0.170	-42.554	1.00	28.82		C
25	ANISOU	5705	CG1	VAL	F	386	3669	4938	2344	-255	-195	-220	C
	ATOM	5706	CG2	VAL	F	386	31.928	-2.001	-43.194	1.00	31.56		C
	ANISOU	5706	CG2	VAL	F	386	3858	5519	2615	-125	-265	-303	C
	ATOM	5707	C	VAL	F	386	32.736	1.020	-40.921	1.00	31.34		C
	ANISOU	5707	C	VAL	F	386	3995	5314	2601	-430	-328	-248	C
30	ATOM	5708	O	VAL	F	386	33.123	0.664	-39.792	1.00	31.29		O
	ANISOU	5708	O	VAL	F	386	4065	5275	2548	-406	-407	-298	O
	ATOM	5709	N	SER	F	387	32.167	2.205	-41.181	1.00	30.66		N
	ANISOU	5709	N	SER	F	387	3973	5122	2554	-523	-264	-192	N
	ATOM	5710	CA	SER	F	387	31.593	3.089	-40.168	1.00	30.93		C
35	ANISOU	5710	CA	SER	F	387	4185	4961	2606	-577	-238	-204	C
	ATOM	5711	CB	SER	F	387	32.314	4.437	-40.147	1.00	32.15		C
	ANISOU	5711	CB	SER	F	387	4367	5081	2766	-752	-252	-182	C
	ATOM	5712	OG	SER	F	387	33.719	4.299	-40.027	1.00	33.45		O
	ANISOU	5712	OG	SER	F	387	4399	5419	2892	-849	-338	-224	O
40	ATOM	5713	C	SER	F	387	30.123	3.319	-40.541	1.00	30.20		C
	ANISOU	5713	C	SER	F	387	4150	4737	2589	-496	-148	-176	C
	ATOM	5714	O	SER	F	387	29.797	3.411	-41.720	1.00	30.80		O
	ANISOU	5714	O	SER	F	387	4146	4862	2693	-463	-140	-113	O
	ATOM	5715	N	GLY	F	388	29.239	3.409	-39.556	1.00	29.35		N
45	ANISOU	5715	N	GLY	F	388	4170	4476	2507	-463	-82	-233	N
	ATOM	5716	CA	GLY	F	388	27.829	3.707	-39.816	1.00	28.50		C
	ANISOU	5716	CA	GLY	F	388	4063	4258	2506	-376	4	-240	C
	ATOM	5717	C	GLY	F	388	27.081	4.361	-38.647	1.00	28.60		C
	ANISOU	5717	C	GLY	F	388	4224	4084	2558	-377	109	-322	C
50	ATOM	5718	O	GLY	F	388	27.550	4.343	-37.526	1.00	27.72		O
	ANISOU	5718	O	GLY	F	388	4253	3926	2354	-450	122	-378	O
	ATOM	5719	N	LYS	F	389	25.894	4.911	-38.914	1.00	28.96		N
	ANISOU	5719	N	LYS	F	389	4235	4030	2737	-281	179	-343	N
	ATOM	5720	CA	LYS	F	389	25.150	5.640	-37.881	1.00	30.12		C
55	ANISOU	5720	CA	LYS	F	389	4504	3998	2943	-260	308	-446	C
	ATOM	5721	CB	LYS	F	389	24.270	6.732	-38.500	1.00	31.54		C
	ANISOU	5721	CB	LYS	F	389	4640	4054	3289	-128	310	-434	C
	ATOM	5722	CG	LYS	F	389	25.065	7.735	-39.311	1.00	31.37		C
	ANISOU	5722	CG	LYS	F	389	4699	3977	3246	-167	180	-301	C
60	ATOM	5723	CD	LYS	F	389	24.164	8.721	-39.993	1.00	32.90		C
	ANISOU	5723	CD	LYS	F	389	4890	4023	3587	1	146	-263	C
	ATOM	5724	CE	LYS	F	389	24.971	9.802	-40.644	1.00	33.28		C
	ANISOU	5724	CE	LYS	F	389	5107	3953	3584	-75	49	-123	C
	ATOM	5725	NZ	LYS	F	389	24.087	10.800	-41.284	1.00	36.05		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5725	NZ	LYS	F	389	5517	4114	4065	121	-12	-67	N
	ATOM	5726	C	LYS	F	389	24.345	4.720	-36.971	1.00	30.25		C
	ANISOU	5726	C	LYS	F	389	4529	4017	2950	-255	466	-565	C
	ATOM	5727	O	LYS	F	389	23.902	5.131	-35.891	1.00	31.37		O
5	ANISOU	5727	O	LYS	F	389	4806	4031	3083	-274	611	-673	O
	ATOM	5728	N	ASP	F	390	24.204	3.466	-37.393	1.00	29.12		N
	ANISOU	5728	N	ASP	F	390	4269	4006	2789	-251	455	-550	N
	ATOM	5729	CA	ASP	F	390	23.576	2.440	-36.575	1.00	29.97		C
	ANISOU	5729	CA	ASP	F	390	4424	4105	2858	-296	612	-643	C
10	ATOM	5730	CB	ASP	F	390	22.041	2.586	-36.553	1.00	30.71		C
	ANISOU	5730	CB	ASP	F	390	4366	4164	3137	-237	789	-763	C
	ATOM	5731	CG	ASP	F	390	21.410	2.597	-37.954	1.00	30.11		C
	ANISOU	5731	CG	ASP	F	390	4012	4192	3236	-122	680	-736	C
	ATOM	5732	OD1	ASP	F	390	21.906	1.900	-38.876	1.00	31.34		O
15	ANISOU	5732	OD1	ASP	F	390	4099	4466	3341	-128	537	-651	O
	ATOM	5733	OD2	ASP	F	390	20.396	3.303	-38.134	1.00	27.66		O
	ANISOU	5733	OD2	ASP	F	390	3554	3847	3110	-10	729	-811	O
	ATOM	5734	C	ASP	F	390	23.993	1.035	-37.017	1.00	29.58		C
	ANISOU	5734	C	ASP	F	390	4340	4171	2729	-323	541	-594	C
20	ATOM	5735	O	ASP	F	390	24.751	0.863	-37.972	1.00	28.60		O
	ANISOU	5735	O	ASP	F	390	4127	4153	2588	-291	379	-507	O
	ATOM	5736	N	GLU	F	391	23.482	0.046	-36.293	1.00	30.84		N
	ANISOU	5736	N	GLU	F	391	4594	4290	2833	-389	685	-659	N
	ATOM	5737	CA	GLU	F	391	23.729	-1.385	-36.518	1.00	30.78		C
25	ANISOU	5737	CA	GLU	F	391	4622	4325	2747	-417	652	-631	C
	ATOM	5738	CB	GLU	F	391	22.983	-2.177	-35.421	1.00	31.99		C
	ANISOU	5738	CB	GLU	F	391	4962	4364	2827	-533	875	-709	C
	ATOM	5739	CG	GLU	F	391	23.324	-3.638	-35.334	1.00	31.45		C
	ANISOU	5739	CG	GLU	F	391	5056	4259	2634	-576	853	-670	C
30	ATOM	5740	CD	GLU	F	391	22.692	-4.319	-34.139	1.00	33.38		C
	ANISOU	5740	CD	GLU	F	391	5573	4355	2756	-724	1088	-721	C
	ATOM	5741	OE1	GLU	F	391	23.273	-5.342	-33.707	1.00	33.05		O
	ANISOU	5741	OE1	GLU	F	391	5804	4219	2535	-744	1036	-654	O
	ATOM	5742	OE2	GLU	F	391	21.639	-3.850	-33.633	1.00	30.81		O
35	ANISOU	5742	OE2	GLU	F	391	5202	3997	2506	-814	1329	-829	O
	ATOM	5743	C	GLU	F	391	23.286	-1.857	-37.909	1.00	30.79		C
	ANISOU	5743	C	GLU	F	391	4372	4443	2884	-367	585	-630	C
	ATOM	5744	O	GLU	F	391	24.001	-2.594	-38.588	1.00	30.38		O
	ANISOU	5744	O	GLU	F	391	4307	4463	2773	-336	456	-576	O
40	ATOM	5745	N	GLN	F	392	22.099	-1.421	-38.324	1.00	32.45		N
	ANISOU	5745	N	GLN	F	392	4380	4677	3273	-346	666	-706	N
	ATOM	5746	CA	GLN	F	392	21.515	-1.817	-39.610	1.00	32.48		C
	ANISOU	5746	CA	GLN	F	392	4144	4800	3398	-304	583	-727	C
	ATOM	5747	CB	GLN	F	392	20.092	-1.260	-39.718	1.00	34.09		C
45	ANISOU	5747	CB	GLN	F	392	4120	5020	3814	-271	678	-843	C
	ATOM	5748	CG	GLN	F	392	19.442	-1.344	-41.095	1.00	35.80		C
	ANISOU	5748	CG	GLN	F	392	4067	5374	4160	-195	528	-866	C
	ATOM	5749	CD	GLN	F	392	19.152	-2.771	-41.513	1.00	38.28		C
	ANISOU	5749	CD	GLN	F	392	4332	5752	4461	-309	544	-935	C
50	ATOM	5750	OE1	GLN	F	392	19.360	-3.713	-40.739	1.00	38.79		O
	ANISOU	5750	OE1	GLN	F	392	4575	5730	4433	-443	686	-960	O
	ATOM	5751	NE2	GLN	F	392	18.687	-2.945	-42.749	1.00	38.16		N
	ANISOU	5751	NE2	GLN	F	392	4110	5869	4519	-260	384	-963	N
	ATOM	5752	C	GLN	F	392	22.369	-1.346	-40.784	1.00	31.31		C
55	ANISOU	5752	C	GLN	F	392	3932	4753	3213	-208	364	-613	C
	ATOM	5753	O	GLN	F	392	22.674	-2.123	-41.683	1.00	30.61		O
	ANISOU	5753	O	GLN	F	392	3793	4758	3081	-202	268	-594	O
	ATOM	5754	N	SER	F	393	22.754	-0.071	-40.752	1.00	31.83		N
	ANISOU	5754	N	SER	F	393	4026	4785	3285	-152	308	-546	N
60	ATOM	5755	CA	SER	F	393	23.555	0.584	-41.804	1.00	31.84		C
	ANISOU	5755	CA	SER	F	393	4001	4859	3240	-99	140	-428	C
	ATOM	5756	CB	SER	F	393	23.778	2.031	-41.404	1.00	32.41		C
	ANISOU	5756	CB	SER	F	393	4160	4818	3334	-79	137	-379	C
	ATOM	5757	OG	SER	F	393	22.513	2.621	-41.159	1.00	36.78		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5757	OG	SER	F	393	4636	5288	4050	2	210	-458	O
	ATOM	5758	C	SER	F	393	24.904	-0.068	-42.095	1.00	31.09		C
	ANISOU	5758	C	SER	F	393	3969	4851	2992	-139	63	-365	C
	ATOM	5759	O	SER	F	393	25.370	-0.089	-43.238	1.00	31.67		O
5	ANISOU	5759	O	SER	F	393	3975	5039	3019	-116	-36	-305	O
	ATOM	5760	N	ILE	F	394	25.531	-0.560	-41.031	1.00	30.78		N
	ANISOU	5760	N	ILE	F	394	4068	4760	2868	-190	110	-387	N
	ATOM	5761	CA	ILE	F	394	26.767	-1.307	-41.083	1.00	29.79		C
	ANISOU	5761	CA	ILE	F	394	3986	4710	2624	-191	33	-359	C
10	ATOM	5762	CB	ILE	F	394	27.351	-1.480	-39.645	1.00	29.65		C
	ANISOU	5762	CB	ILE	F	394	4156	4598	2511	-226	48	-374	C
	ATOM	5763	CG1	ILE	F	394	27.823	-0.134	-39.098	1.00	29.52		C
	ANISOU	5763	CG1	ILE	F	394	4191	4541	2482	-279	24	-348	C
	ATOM	5764	CD1	ILE	F	394	27.916	-0.060	-37.553	1.00	31.10		C
15	ANISOU	5764	CD1	ILE	F	394	4613	4618	2587	-330	64	-390	C
	ATOM	5765	CG2	ILE	F	394	28.466	-2.533	-39.621	1.00	29.07		C
	ANISOU	5765	CG2	ILE	F	394	4119	4590	2336	-174	-54	-367	C
	ATOM	5766	C	ILE	F	394	26.499	-2.669	-41.731	1.00	29.71		C
	ANISOU	5766	C	ILE	F	394	3929	4753	2607	-158	31	-404	C
20	ATOM	5767	O	ILE	F	394	27.278	-3.120	-42.577	1.00	29.55		O
	ANISOU	5767	O	ILE	F	394	3847	4847	2533	-116	-47	-388	O
	ATOM	5768	N	ALA	F	395	25.403	-3.316	-41.324	1.00	30.22		N
	ANISOU	5768	N	ALA	F	395	4027	4730	2726	-194	137	-478	N
	ATOM	5769	CA	ALA	F	395	25.009	-4.588	-41.908	1.00	30.57		C
25	ANISOU	5769	CA	ALA	F	395	4048	4791	2775	-201	149	-541	C
	ATOM	5770	CB	ALA	F	395	23.837	-5.225	-41.145	1.00	31.36		C
	ANISOU	5770	CB	ALA	F	395	4215	4766	2934	-302	310	-630	C
	ATOM	5771	C	ALA	F	395	24.716	-4.452	-43.403	1.00	30.78		C
	ANISOU	5771	C	ALA	F	395	3889	4961	2846	-163	60	-548	C
30	ATOM	5772	O	ALA	F	395	25.104	-5.325	-44.164	1.00	31.52		O
	ANISOU	5772	O	ALA	F	395	3978	5117	2882	-138	10	-576	O
	ATOM	5773	N	GLU	F	396	24.072	-3.354	-43.821	1.00	31.71		N
	ANISOU	5773	N	GLU	F	396	3881	5119	3047	-145	31	-523	N
	ATOM	5774	CA	GLU	F	396	23.861	-3.029	-45.257	1.00	31.94		C
35	ANISOU	5774	CA	GLU	F	396	3780	5281	3073	-95	-93	-498	C
	ATOM	5775	CB	GLU	F	396	23.037	-1.743	-45.443	1.00	33.01		C
	ANISOU	5775	CB	GLU	F	396	3825	5402	3315	-41	-139	-461	C
	ATOM	5776	CG	GLU	F	396	21.538	-1.987	-45.467	1.00	35.48		C
	ANISOU	5776	CG	GLU	F	396	3973	5718	3789	-35	-123	-581	C
40	ATOM	5777	CD	GLU	F	396	20.680	-0.802	-44.997	1.00	38.57		C
	ANISOU	5777	CD	GLU	F	396	4281	6037	4338	44	-103	-589	C
	ATOM	5778	OE1	GLU	F	396	21.223	0.325	-44.807	1.00	39.47		O
	ANISOU	5778	OE1	GLU	F	396	4500	6075	4423	99	-126	-482	O
	ATOM	5779	OE2	GLU	F	396	19.447	-1.008	-44.817	1.00	35.64		O
45	ANISOU	5779	OE2	GLU	F	396	3729	5680	4133	47	-55	-721	O
	ATOM	5780	C	GLU	F	396	25.163	-2.938	-46.052	1.00	31.50		C
	ANISOU	5780	C	GLU	F	396	3762	5332	2874	-69	-168	-417	C
	ATOM	5781	O	GLU	F	396	25.290	-3.588	-47.089	1.00	32.61		O
	ANISOU	5781	O	GLU	F	396	3871	5579	2942	-56	-221	-449	O
50	ATOM	5782	N	ALA	F	397	26.128	-2.156	-45.567	1.00	30.36		N
	ANISOU	5782	N	ALA	F	397	3680	5169	2688	-79	-159	-334	N
	ATOM	5783	CA	ALA	F	397	27.425	-2.017	-46.242	1.00	30.05		C
	ANISOU	5783	CA	ALA	F	397	3636	5250	2530	-86	-193	-277	C
	ATOM	5784	CB	ALA	F	397	28.335	-0.987	-45.512	1.00	29.70		C
55	ANISOU	5784	CB	ALA	F	397	3637	5170	2479	-140	-180	-206	C
	ATOM	5785	C	ALA	F	397	28.164	-3.342	-46.421	1.00	29.77		C
	ANISOU	5785	C	ALA	F	397	3596	5288	2428	-49	-182	-356	C
	ATOM	5786	O	ALA	F	397	28.768	-3.583	-47.484	1.00	30.19		O
	ANISOU	5786	O	ALA	F	397	3600	5481	2390	-35	-195	-364	O
60	ATOM	5787	N	ILE	F	398	28.116	-4.184	-45.387	1.00	29.18		N
	ANISOU	5787	N	ILE	F	398	3597	5103	2385	-28	-151	-416	N
	ATOM	5788	CA	ILE	F	398	28.785	-5.500	-45.391	1.00	29.82		C
	ANISOU	5788	CA	ILE	F	398	3721	5193	2418	45	-156	-491	C
	ATOM	5789	CB	ILE	F	398	28.763	-6.184	-43.978	1.00	30.01		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5789	CB	ILE	F	398	3908	5042	2453	64	-137	-511	C
	ATOM	5790	CG1	ILE	F	398	29.506	-5.325	-42.937	1.00	28.78		C
	ANISOU	5790	CG1	ILE	F	398	3784	4871	2279	53	-173	-446	C
	ATOM	5791	CD1	ILE	F	398	29.361	-5.799	-41.514	1.00	29.65		C
5	ANISOU	5791	CD1	ILE	F	398	4105	4806	2357	54	-162	-447	C
	ATOM	5792	CG2	ILE	F	398	29.370	-7.571	-44.042	1.00	30.84		C
	ANISOU	5792	CG2	ILE	F	398	4096	5109	2512	173	-164	-580	C
	ATOM	5793	C	ILE	F	398	28.199	-6.428	-46.466	1.00	30.35		C
	ANISOU	5793	C	ILE	F	398	3770	5297	2466	59	-152	-577	C
10	ATOM	5794	O	ILE	F	398	28.943	-7.040	-47.237	1.00	31.40		O
	ANISOU	5794	O	ILE	F	398	3877	5526	2528	124	-162	-630	O
	ATOM	5795	N	ILE	F	399	26.868	-6.485	-46.522	1.00	30.23		N
	ANISOU	5795	N	ILE	F	399	3752	5216	2518	-8	-136	-610	N
	ATOM	5796	CA	ILE	F	399	26.139	-7.273	-47.508	1.00	30.68		C
15	ANISOU	5796	CA	ILE	F	399	3781	5309	2565	-31	-156	-710	C
	ATOM	5797	CB	ILE	F	399	24.585	-7.231	-47.249	1.00	31.14		C
	ANISOU	5797	CB	ILE	F	399	3785	5298	2749	-126	-136	-763	C
	ATOM	5798	CG1	ILE	F	399	24.226	-7.902	-45.914	1.00	29.45		C
	ANISOU	5798	CG1	ILE	F	399	3695	4892	2602	-193	-16	-803	C
20	ATOM	5799	CD1	ILE	F	399	22.950	-7.376	-45.272	1.00	29.44		C
	ANISOU	5799	CD1	ILE	F	399	3606	4839	2739	-287	62	-831	C
	ATOM	5800	CG2	ILE	F	399	23.800	-7.896	-48.410	1.00	32.52		C
	ANISOU	5800	CG2	ILE	F	399	3891	5551	2914	-170	-202	-881	C
	ATOM	5801	C	ILE	F	399	26.479	-6.784	-48.919	1.00	31.25		C
25	ANISOU	5801	C	ILE	F	399	3772	5569	2531	-6	-226	-685	C
	ATOM	5802	O	ILE	F	399	26.773	-7.594	-49.799	1.00	32.29		O
	ANISOU	5802	O	ILE	F	399	3926	5770	2572	20	-235	-772	O
	ATOM	5803	N	VAL	F	400	26.442	-5.468	-49.127	1.00	31.26		N
	ANISOU	5803	N	VAL	F	400	3717	5633	2527	-17	-266	-569	N
30	ATOM	5804	CA	VAL	F	400	26.703	-4.862	-50.439	1.00	31.99		C
	ANISOU	5804	CA	VAL	F	400	3791	5879	2484	-16	-326	-512	C
	ATOM	5805	CB	VAL	F	400	26.552	-3.321	-50.424	1.00	32.28		C
	ANISOU	5805	CB	VAL	F	400	3826	5904	2535	-32	-369	-359	C
	ATOM	5806	CG1	VAL	F	400	27.154	-2.712	-51.702	1.00	31.55		C
35	ANISOU	5806	CG1	VAL	F	400	3785	5949	2253	-57	-395	-270	C
	ATOM	5807	CG2	VAL	F	400	25.081	-2.906	-50.237	1.00	31.82		C
	ANISOU	5807	CG2	VAL	F	400	3714	5767	2609	-9	-454	-364	C
	ATOM	5808	C	VAL	F	400	28.110	-5.188	-50.913	1.00	32.53		C
	ANISOU	5808	C	VAL	F	400	3873	6063	2424	4	-258	-527	C
40	ATOM	5809	O	VAL	F	400	28.320	-5.462	-52.094	1.00	33.48		O
	ANISOU	5809	O	VAL	F	400	4010	6312	2399	3	-262	-566	O
	ATOM	5810	N	ALA	F	401	29.054	-5.149	-49.973	1.00	31.73		N
	ANISOU	5810	N	ALA	F	401	3756	5926	2375	25	-198	-510	N
	ATOM	5811	CA	ALA	F	401	30.462	-5.417	-50.239	1.00	32.29		C
45	ANISOU	5811	CA	ALA	F	401	3773	6123	2374	61	-131	-547	C
	ATOM	5812	CB	ALA	F	401	31.316	-4.940	-49.082	1.00	31.23		C
	ANISOU	5812	CB	ALA	F	401	3591	5955	2320	61	-122	-500	C
	ATOM	5813	C	ALA	F	401	30.738	-6.885	-50.529	1.00	32.85		C
	ANISOU	5813	C	ALA	F	401	3863	6199	2419	165	-106	-703	C
50	ATOM	5814	O	ALA	F	401	31.652	-7.205	-51.280	1.00	34.52		O
	ANISOU	5814	O	ALA	F	401	4018	6556	2542	209	-41	-775	O
	ATOM	5815	N	MSE	F	402	29.963	-7.768	-49.913	1.00	32.87		N
	ANISOU	5815	N	MSE	F	402	3957	6031	2501	198	-138	-765	N
	ATOM	5816	CA	MSE	F	402	30.121	-9.221	-50.081	1.00	34.29		C
55	ANISOU	5816	CA	MSE	F	402	4216	6142	2669	295	-120	-914	C
	ATOM	5817	CB	MSE	F	402	29.405	-10.001	-48.955	1.00	33.61		C
	ANISOU	5817	CB	MSE	F	402	4274	5812	2686	294	-135	-936	C
	ATOM	5818	CG	MSE	F	402	30.159	-10.004	-47.602	1.00	34.31		C
	ANISOU	5818	CG	MSE	F	402	4411	5796	2829	379	-152	-874	C
60	ATOM	5819	SE	MSE	F	402	29.225	-10.945	-46.127	0.90	35.69		SE
	ANISOU	5819	SE	MSE	F	402	4858	5634	3068	337	-136	-872	SE
	ATOM	5820	CE	MSE	F	402	30.613	-10.934	-44.782	1.00	35.68		C
	ANISOU	5820	CE	MSE	F	402	4931	5574	3050	510	-223	-797	C
	ATOM	5821	C	MSE	F	402	29.589	-9.629	-51.439	1.00	34.50		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5821	C	MSE	F	402	4268	6255	2587	255	-119	-1011	C
	ATOM	5822	O	MSE	F	402	30.190	-10.441	-52.110	1.00	36.42		O
	ANISOU	5822	O	MSE	F	402	4535	6549	2753	337	-73	-1137	O
	ATOM	5823	N	VAL	F	403	28.465	-9.043	-51.840	1.00	34.25		N
5	ANISOU	5823	N	VAL	F	403	4226	6243	2545	142	-183	-962	N
	ATOM	5824	CA	VAL	F	403	27.919	-9.227	-53.188	1.00	34.82		C
	ANISOU	5824	CA	VAL	F	403	4323	6427	2480	94	-232	-1038	C
	ATOM	5825	CB	VAL	F	403	26.495	-8.620	-53.318	1.00	34.53		C
	ANISOU	5825	CB	VAL	F	403	4248	6380	2494	0	-356	-989	C
10	ATOM	5826	CG1	VAL	F	403	25.966	-8.754	-54.767	1.00	35.80		C
	ANISOU	5826	CG1	VAL	F	403	4442	6680	2479	-40	-460	-1064	C
	ATOM	5827	CG2	VAL	F	403	25.531	-9.291	-52.314	1.00	33.68		C
	ANISOU	5827	CG2	VAL	F	403	4139	6086	2573	-50	-354	-1061	C
	ATOM	5828	C	VAL	F	403	28.878	-8.653	-54.249	1.00	35.95		C
15	ANISOU	5828	C	VAL	F	403	4446	6779	2433	106	-179	-1003	C
	ATOM	5829	O	VAL	F	403	29.190	-9.332	-55.244	1.00	37.21		O
	ANISOU	5829	O	VAL	F	403	4664	7031	2443	127	-138	-1133	O
	ATOM	5830	N	PHE	F	404	29.347	-7.420	-54.010	1.00	34.96		N
	ANISOU	5830	N	PHE	F	404	4259	6715	2308	72	-159	-839	N
20	ATOM	5831	CA	PHE	F	404	30.282	-6.688	-54.895	1.00	36.53		C
	ANISOU	5831	CA	PHE	F	404	4449	7101	2332	28	-72	-777	C
	ATOM	5832	CB	PHE	F	404	30.606	-5.293	-54.309	1.00	35.90		C
	ANISOU	5832	CB	PHE	F	404	4324	7008	2310	-45	-63	-589	C
	ATOM	5833	CG	PHE	F	404	31.373	-4.375	-55.245	1.00	37.51		C
25	ANISOU	5833	CG	PHE	F	404	4558	7371	2322	-153	35	-495	C
	ATOM	5834	CD1	PHE	F	404	30.713	-3.660	-56.254	1.00	38.35		C
	ANISOU	5834	CD1	PHE	F	404	4819	7508	2243	-225	-40	-382	C
	ATOM	5835	CE1	PHE	F	404	31.414	-2.801	-57.112	1.00	37.22		C
	ANISOU	5835	CE1	PHE	F	404	4768	7483	1890	-354	72	-274	C
30	ATOM	5836	CZ	PHE	F	404	32.771	-2.645	-56.966	1.00	39.43		C
	ANISOU	5836	CZ	PHE	F	404	4931	7877	2174	-433	279	-303	C
	ATOM	5837	CE2	PHE	F	404	33.452	-3.342	-55.961	1.00	39.28		C
	ANISOU	5837	CE2	PHE	F	404	4699	7858	2368	-343	332	-436	C
	ATOM	5838	CD2	PHE	F	404	32.747	-4.197	-55.097	1.00	38.17		C
35	ANISOU	5838	CD2	PHE	F	404	4522	7571	2408	-192	198	-517	C
	ATOM	5839	C	PHE	F	404	31.571	-7.463	-55.140	1.00	37.46		C
	ANISOU	5839	C	PHE	F	404	4505	7327	2403	103	81	-918	C
	ATOM	5840	O	PHE	F	404	32.134	-7.391	-56.225	1.00	39.22		O
	ANISOU	5840	O	PHE	F	404	4747	7721	2433	66	186	-960	O
40	ATOM	5841	N	SER	F	405	32.025	-8.203	-54.131	1.00	37.05		N
	ANISOU	5841	N	SER	F	405	4389	7171	2517	221	94	-995	N
	ATOM	5842	CA	SER	F	405	33.281	-8.958	-54.222	1.00	39.28		C
	ANISOU	5842	CA	SER	F	405	4576	7544	2804	352	212	-1143	C
	ATOM	5843	CB	SER	F	405	33.727	-9.455	-52.845	1.00	38.82		C
45	ANISOU	5843	CB	SER	F	405	4463	7343	2945	492	158	-1160	C
	ATOM	5844	OG	SER	F	405	33.038	-10.651	-52.515	1.00	40.42		O
	ANISOU	5844	OG	SER	F	405	4824	7332	3201	585	93	-1254	O
	ATOM	5845	C	SER	F	405	33.166	-10.136	-55.180	1.00	40.69		C
	ANISOU	5845	C	SER	F	405	4856	7736	2869	429	260	-1340	C
50	ATOM	5846	O	SER	F	405	34.178	-10.658	-55.653	1.00	42.13		O
	ANISOU	5846	O	SER	F	405	4962	8038	3005	534	391	-1487	O
	ATOM	5847	N	GLN	F	406	31.920	-10.534	-55.450	1.00	40.68		N
	ANISOU	5847	N	GLN	F	406	5011	7615	2832	371	155	-1361	N
	ATOM	5848	CA	GLN	F	406	31.572	-11.630	-56.381	1.00	42.61		C
55	ANISOU	5848	CA	GLN	F	406	5392	7843	2954	399	169	-1558	C
	ATOM	5849	CB	GLN	F	406	31.955	-11.281	-57.824	1.00	44.04		C
	ANISOU	5849	CB	GLN	F	406	5602	8265	2868	332	270	-1606	C
	ATOM	5850	CG	GLN	F	406	31.191	-10.103	-58.371	1.00	43.15		C
	ANISOU	5850	CG	GLN	F	406	5540	8242	2614	163	170	-1425	C
60	ATOM	5851	CD	GLN	F	406	31.738	-9.591	-59.677	1.00	44.42		C
	ANISOU	5851	CD	GLN	F	406	5768	8633	2476	81	291	-1422	C
	ATOM	5852	OE1	GLN	F	406	32.951	-9.500	-59.865	1.00	43.92		O
	ANISOU	5852	OE1	GLN	F	406	5611	8710	2369	105	499	-1468	O
	ATOM	5853	NE2	GLN	F	406	30.838	-9.241	-60.593	1.00	45.45		N

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5853	NE2	GLN	F	406	6064	8814	2393	-23	159	-1372	N
	ATOM	5854	C	GLN	F	406	32.173	-12.968	-55.971	1.00	43.95		C
	ANISOU	5854	C	GLN	F	406	5600	7871	3227	589	226	-1742	C
	ATOM	5855	O	GLN	F	406	32.433	-13.808	-56.819	1.00	46.15		O
5	ANISOU	5855	O	GLN	F	406	5963	8178	3395	657	304	-1937	O
	ATOM	5856	N	GLU	F	407	32.373	-13.145	-54.666	1.00	43.66		N
	ANISOU	5856	N	GLU	F	407	5534	7667	3389	684	177	-1678	N
	ATOM	5857	CA	GLU	F	407	32.972	-14.356	-54.087	1.00	45.89		C
	ANISOU	5857	CA	GLU	F	407	5886	7768	3781	902	190	-1811	C
10	ATOM	5858	CB	GLU	F	407	33.245	-14.162	-52.597	1.00	44.16		C
	ANISOU	5858	CB	GLU	F	407	5633	7413	3733	980	106	-1674	C
	ATOM	5859	CG	GLU	F	407	34.489	-13.382	-52.270	1.00	44.97		C
	ANISOU	5859	CG	GLU	F	407	5487	7716	3881	1066	133	-1614	C
	ATOM	5860	CD	GLU	F	407	35.177	-13.876	-51.008	1.00	45.76		C
15	ANISOU	5860	CD	GLU	F	407	5591	7667	4127	1279	35	-1602	C
	ATOM	5861	OE1	GLU	F	407	34.788	-14.945	-50.485	1.00	46.21		O
	ANISOU	5861	OE1	GLU	F	407	5887	7443	4229	1387	-30	-1645	O
	ATOM	5862	OE2	GLU	F	407	36.126	-13.199	-50.553	1.00	46.06		O
	ANISOU	5862	OE2	GLU	F	407	5409	7866	4226	1332	14	-1552	O
20	ATOM	5863	C	GLU	F	407	32.093	-15.581	-54.248	1.00	47.47		C
	ANISOU	5863	C	GLU	F	407	6337	7722	3977	890	155	-1951	C
	ATOM	5864	O	GLU	F	407	30.874	-15.486	-54.144	1.00	46.49		O
	ANISOU	5864	O	GLU	F	407	6303	7502	3860	703	80	-1898	O
	ATOM	5865	N	ASP	F	408	32.713	-16.737	-54.463	1.00	51.07		N
25	ANISOU	5865	N	ASP	F	408	6898	8065	4441	1090	210	-2142	N
	ATOM	5866	CA	ASP	F	408	31.942	-17.949	-54.697	1.00	53.71		C
	ANISOU	5866	CA	ASP	F	408	7506	8138	4762	1059	193	-2300	C
	ATOM	5867	CB	ASP	F	408	32.753	-19.039	-55.396	1.00	56.74		C
	ANISOU	5867	CB	ASP	F	408	7989	8471	5099	1286	290	-2553	C
30	ATOM	5868	CG	ASP	F	408	31.879	-19.947	-56.264	1.00	60.34		C
	ANISOU	5868	CG	ASP	F	408	8697	8784	5445	1155	300	-2755	C
	ATOM	5869	OD1	ASP	F	408	31.500	-19.542	-57.393	1.00	61.41		O
	ANISOU	5869	OD1	ASP	F	408	8794	9144	5396	993	324	-2821	O
	ATOM	5870	OD2	ASP	F	408	31.573	-21.074	-55.817	1.00	63.81		O
35	ANISOU	5870	OD2	ASP	F	408	9399	8875	5969	1205	273	-2849	O
	ATOM	5871	C	ASP	F	408	31.241	-18.477	-53.441	1.00	53.40		C
	ANISOU	5871	C	ASP	F	408	7660	7761	4869	1016	107	-2210	C
	ATOM	5872	O	ASP	F	408	30.214	-19.139	-53.548	1.00	54.39		O
	ANISOU	5872	O	ASP	F	408	7984	7691	4992	852	89	-2287	O
40	ATOM	5873	N	ACYS	F	409	31.777	-18.185	-52.260	0.50	52.75		N
	ANISOU	5873	N	ACYS	F	409	7531	7613	4899	1137	60	-2057	N
	ATOM	5874	N	BCYS	F	409	31.777	-18.185	-52.260	0.50	52.75		N
	ANISOU	5874	N	BCYS	F	409	7531	7613	4899	1137	60	-2057	N
	ATOM	5875	CA	ACYS	F	409	31.089	-18.592	-51.034	0.50	52.65		C
45	ANISOU	5875	CA	ACYS	F	409	7738	7288	4981	1065	2	-1951	C
	ATOM	5876	CA	BCYS	F	409	31.089	-18.592	-51.034	0.50	52.65		C
	ANISOU	5876	CA	BCYS	F	409	7738	7288	4981	1065	2	-1951	C
	ATOM	5877	CB	ACYS	F	409	32.047	-18.636	-49.835	0.50	52.96		C
	ANISOU	5877	CB	ACYS	F	409	7800	7221	5099	1305	-69	-1839	C
50	ATOM	5878	CB	BCYS	F	409	32.047	-18.636	-49.835	0.50	52.96		C
	ANISOU	5878	CB	BCYS	F	409	7800	7221	5099	1305	-69	-1839	C
	ATOM	5879	SG	ACYS	F	409	32.091	-17.163	-48.811	0.50	52.55		S
	ANISOU	5879	SG	ACYS	F	409	7540	7342	5085	1205	-130	-1593	S
	ATOM	5880	SG	BCYS	F	409	32.091	-17.163	-48.811	0.50	52.55		S
55	ANISOU	5880	SG	BCYS	F	409	7540	7342	5085	1205	-130	-1593	S
	ATOM	5881	C	ACYS	F	409	29.827	-17.739	-50.774	0.50	50.12		C
	ANISOU	5881	C	ACYS	F	409	7348	7022	4672	755	-13	-1821	C
	ATOM	5882	C	BCYS	F	409	29.827	-17.739	-50.774	0.50	50.12		C
	ANISOU	5882	C	BCYS	F	409	7348	7022	4672	755	-13	-1821	C
60	ATOM	5883	O	ACYS	F	409	28.886	-18.205	-50.136	0.50	50.44		O
	ANISOU	5883	O	ACYS	F	409	7577	6823	4766	597	-7	-1802	O
	ATOM	5884	O	BCYS	F	409	28.886	-18.205	-50.136	0.50	50.44		O
	ANISOU	5884	O	BCYS	F	409	7577	6823	4766	597	-7	-1802	O
	ATOM	5885	N	MSE	F	410	29.811	-16.507	-51.289	1.00	48.14		N

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5885	N	MSE	F	410	6837	7079	4377	671	-19	-1743	N
	ATOM	5886	CA	MSE	F	410	28.586	-15.667	-51.329	1.00	46.32		C
	ANISOU	5886	CA	MSE	F	410	6511	6930	4158	419	-48	-1656	C
	ATOM	5887	CB	MSE	F	410	28.941	-14.221	-51.724	1.00	44.79		C
5	ANISOU	5887	CB	MSE	F	410	6071	7035	3913	406	-68	-1529	C
	ATOM	5888	CG	MSE	F	410	27.762	-13.229	-51.931	1.00	42.99		C
	ANISOU	5888	CG	MSE	F	410	5730	6910	3694	209	-126	-1442	C
	ATOM	5889	SE	MSE	F	410	26.955	-13.098	-53.730	0.90	42.31		SE
	ANISOU	5889	SE	MSE	F	410	5600	7035	3439	86	-204	-1557	SE
10	ATOM	5890	CE	MSE	F	410	28.542	-12.628	-54.751	1.00	41.76		C
	ANISOU	5890	CE	MSE	F	410	5476	7222	3170	230	-121	-1549	C
	ATOM	5891	C	MSE	F	410	27.565	-16.259	-52.323	1.00	47.69		C
	ANISOU	5891	C	MSE	F	410	6753	7090	4276	253	-60	-1820	C
	ATOM	5892	O	MSE	F	410	26.393	-16.467	-51.992	1.00	47.49		O
15	ANISOU	5892	O	MSE	F	410	6775	6944	4327	57	-75	-1837	O
	ATOM	5893	N	ILE	F	411	28.020	-16.533	-53.544	1.00	48.99		N
	ANISOU	5893	N	ILE	F	411	6915	7393	4304	318	-48	-1959	N
	ATOM	5894	CA	ILE	F	411	27.176	-17.189	-54.556	1.00	50.31		C
	ANISOU	5894	CA	ILE	F	411	7177	7552	4386	171	-80	-2148	C
20	ATOM	5895	CB	ILE	F	411	27.852	-17.190	-55.945	1.00	51.34		C
	ANISOU	5895	CB	ILE	F	411	7295	7903	4310	257	-53	-2275	C
	ATOM	5896	CG1	ILE	F	411	27.605	-15.837	-56.612	1.00	50.21		C
	ANISOU	5896	CG1	ILE	F	411	6965	8064	4047	166	-123	-2142	C
	ATOM	5897	CD1	ILE	F	411	28.722	-15.359	-57.495	1.00	52.42		C
25	ANISOU	5897	CD1	ILE	F	411	7190	8586	4140	279	-32	-2145	C
	ATOM	5898	CG2	ILE	F	411	27.314	-18.312	-56.826	1.00	53.79		C
	ANISOU	5898	CG2	ILE	F	411	7799	8112	4525	167	-66	-2531	C
	ATOM	5899	C	ILE	F	411	26.671	-18.575	-54.108	1.00	51.93		C
	ANISOU	5899	C	ILE	F	411	7639	7413	4677	105	-50	-2292	C
30	ATOM	5900	O	ILE	F	411	25.517	-18.904	-54.355	1.00	53.42		O
	ANISOU	5900	O	ILE	F	411	7863	7547	4889	-126	-93	-2390	O
	ATOM	5901	N	LYS	F	412	27.502	-19.356	-53.416	1.00	52.22		N
	ANISOU	5901	N	LYS	F	412	7857	7215	4771	298	14	-2301	N
	ATOM	5902	CA	LYS	F	412	27.074	-20.655	-52.866	1.00	53.75		C
35	ANISOU	5902	CA	LYS	F	412	8365	7019	5038	237	51	-2401	C
	ATOM	5903	CB	LYS	F	412	28.288	-21.518	-52.480	1.00	55.14		C
	ANISOU	5903	CB	LYS	F	412	8752	6970	5227	556	88	-2438	C
	ATOM	5904	CG	LYS	F	412	29.038	-22.152	-53.648	1.00	57.75		C
	ANISOU	5904	CG	LYS	F	412	9134	7352	5454	744	126	-2667	C
40	ATOM	5905	CD	LYS	F	412	28.231	-23.272	-54.325	1.00	61.07		C
	ANISOU	5905	CD	LYS	F	412	9825	7547	5831	564	149	-2906	C
	ATOM	5906	CE	LYS	F	412	28.940	-23.834	-55.572	1.00	63.36		C
	ANISOU	5906	CE	LYS	F	412	10174	7912	5988	740	204	-3162	C
	ATOM	5907	NZ	LYS	F	412	28.944	-22.908	-56.735	1.00	61.64		N
45	ANISOU	5907	NZ	LYS	F	412	9691	8127	5602	663	198	-3197	N
	ATOM	5908	C	LYS	F	412	26.100	-20.546	-51.670	1.00	52.80		C
	ANISOU	5908	C	LYS	F	412	8297	6719	5046	18	66	-2268	C
	ATOM	5909	O	LYS	F	412	25.481	-21.540	-51.279	1.00	54.85		O
	ANISOU	5909	O	LYS	F	412	8819	6665	5356	-135	119	-2349	O
50	ATOM	5910	N	ALA	F	413	25.965	-19.345	-51.104	1.00	50.11		N
	ANISOU	5910	N	ALA	F	413	7723	6567	4749	-13	43	-2077	N
	ATOM	5911	CA	ALA	F	413	25.099	-19.097	-49.933	1.00	48.96		C
	ANISOU	5911	CA	ALA	F	413	7598	6290	4712	-206	90	-1956	C
	ATOM	5912	CB	ALA	F	413	25.724	-18.033	-49.014	1.00	46.53		C
55	ANISOU	5912	CB	ALA	F	413	7166	6089	4424	-67	75	-1735	C
	ATOM	5913	C	ALA	F	413	23.642	-18.733	-50.269	1.00	48.81		C
	ANISOU	5913	C	ALA	F	413	7393	6390	4762	-515	84	-2024	C
	ATOM	5914	O	ALA	F	413	22.815	-18.557	-49.364	1.00	48.53		O
	ANISOU	5914	O	ALA	F	413	7342	6265	4831	-700	159	-1964	O
60	ATOM	5915	N	VAL	F	414	23.341	-18.612	-51.562	1.00	49.08		N
	ANISOU	5915	N	VAL	F	414	7279	6637	4730	-561	-7	-2158	N
	ATOM	5916	CA	VAL	F	414	21.970	-18.436	-52.037	1.00	49.54		C
	ANISOU	5916	CA	VAL	F	414	7153	6817	4854	-830	-65	-2269	C
	ATOM	5917	CB	VAL	F	414	21.929	-18.102	-53.563	1.00	50.27		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5917	CB	VAL	F	414	7101	7196	4804	-801	-222	-2378	C
	ATOM	5918	CG1	VAL	F	414	20.491	-17.927	-54.072	1.00	49.09		C
	ANISOU	5918	CG1	VAL	F	414	6737	7190	4726	-1054	-341	-2505	C
	ATOM	5919	CG2	VAL	F	414	22.757	-16.861	-53.860	1.00	47.46		C
5	ANISOU	5919	CG2	VAL	F	414	6588	7096	4350	-582	-280	-2198	C
	ATOM	5920	C	VAL	F	414	21.156	-19.706	-51.750	1.00	52.59		C
	ANISOU	5920	C	VAL	F	414	7748	6913	5322	-1091	27	-2442	C
	ATOM	5921	O	VAL	F	414	21.612	-20.824	-52.012	1.00	54.19		O
	ANISOU	5921	O	VAL	F	414	8243	6888	5458	-1056	66	-2564	O
10	ATOM	5922	N	ARG	F	415	19.960	-19.513	-51.195	1.00	53.57		N
	ANISOU	5922	N	ARG	F	415	7719	7037	5597	-1355	78	-2459	N
	ATOM	5923	CA	ARG	F	415	19.009	-20.599	-50.933	1.00	56.86		C
	ANISOU	5923	CA	ARG	F	415	8279	7213	6113	-1686	189	-2636	C
	ATOM	5924	CB	ARG	F	415	18.679	-20.667	-49.434	1.00	56.75		C
15	ANISOU	5924	CB	ARG	F	415	8382	6972	6208	-1824	400	-2512	C
	ATOM	5925	CG	ARG	F	415	19.868	-20.954	-48.513	1.00	56.55		C
	ANISOU	5925	CG	ARG	F	415	8721	6681	6086	-1584	482	-2321	C
	ATOM	5926	CD	ARG	F	415	20.259	-22.434	-48.501	1.00	61.81		C
	ANISOU	5926	CD	ARG	F	415	9852	6947	6685	-1607	548	-2415	C
20	ATOM	5927	NE	ARG	F	415	21.475	-22.674	-47.715	1.00	62.49		N
	ANISOU	5927	NE	ARG	F	415	10262	6805	6676	-1304	561	-2235	N
	ATOM	5928	CZ	ARG	F	415	22.689	-22.855	-48.237	1.00	62.58		C
	ANISOU	5928	CZ	ARG	F	415	10363	6824	6592	-954	445	-2229	C
	ATOM	5929	NH1	ARG	F	415	22.868	-22.842	-49.557	1.00	61.25		N
25	ANISOU	5929	NH1	ARG	F	415	10028	6864	6379	-878	340	-2390	N
	ATOM	5930	NH2	ARG	F	415	23.727	-23.063	-47.431	1.00	62.31		N
	ANISOU	5930	NH2	ARG	F	415	10583	6594	6498	-677	434	-2075	N
	ATOM	5931	C	ARG	F	415	17.730	-20.345	-51.734	1.00	58.42		C
	ANISOU	5931	C	ARG	F	415	8134	7663	6402	-1935	70	-2824	C
30	ATOM	5932	O	ARG	F	415	17.145	-19.259	-51.654	1.00	58.20		O
	ANISOU	5932	O	ARG	F	415	7749	7898	6468	-1933	2	-2757	O
	ATOM	5933	N	GLY	F	416	17.295	-21.329	-52.509	1.00	61.08		N
	ANISOU	5933	N	GLY	F	416	8575	7920	6715	-2136	26	-3069	N
	ATOM	5934	CA	GLY	F	416	16.104	-21.163	-53.341	1.00	62.81		C
35	ANISOU	5934	CA	GLY	F	416	8459	8396	7010	-2372	-136	-3277	C
	ATOM	5935	C	GLY	F	416	16.429	-20.481	-54.658	1.00	61.99		C
	ANISOU	5935	C	GLY	F	416	8200	8622	6732	-2155	-406	-3291	C
	ATOM	5936	O	GLY	F	416	17.592	-20.198	-54.941	1.00	59.93		O
	ANISOU	5936	O	GLY	F	416	8093	8382	6296	-1854	-424	-3155	O
40	ATOM	5937	N	ASP	F	417	15.403	-20.224	-55.467	1.00	63.90		N
	ANISOU	5937	N	ASP	F	417	8138	9127	7013	-2314	-618	-3460	N
	ATOM	5938	CA	ASP	F	417	15.591	-19.601	-56.780	1.00	64.06		C
	ANISOU	5938	CA	ASP	F	417	8056	9458	6828	-2137	-900	-3476	C
	ATOM	5939	CB	ASP	F	417	14.602	-20.172	-57.801	1.00	67.95		C
45	ANISOU	5939	CB	ASP	F	417	8438	10082	7298	-2398	-1118	-3786	C
	ATOM	5940	CG	ASP	F	417	15.090	-21.481	-58.420	1.00	70.01		C
	ANISOU	5940	CG	ASP	F	417	9098	10118	7385	-2495	-1067	-4000	C
	ATOM	5941	OD1	ASP	F	417	16.312	-21.756	-58.345	1.00	67.20		O
	ANISOU	5941	OD1	ASP	F	417	9070	9582	6879	-2269	-919	-3895	O
50	ATOM	5942	OD2	ASP	F	417	14.257	-22.228	-58.994	1.00	73.52		O
	ANISOU	5942	OD2	ASP	F	417	9518	10568	7849	-2792	-1180	-4292	O
	ATOM	5943	C	ASP	F	417	15.497	-18.081	-56.723	1.00	62.18		C
	ANISOU	5943	C	ASP	F	417	7507	9500	6617	-1920	-1034	-3253	C
	ATOM	5944	O	ASP	F	417	14.874	-17.529	-55.816	1.00	61.19		O
55	ANISOU	5944	O	ASP	F	417	7135	9393	6721	-1970	-960	-3173	O
	ATOM	5945	N	LEU	F	418	16.133	-17.413	-57.685	1.00	61.75		N
	ANISOU	5945	N	LEU	F	418	7496	9647	6320	-1686	-1210	-3156	N
	ATOM	5946	CA	LEU	F	418	16.118	-15.948	-57.745	1.00	60.49		C
	ANISOU	5946	CA	LEU	F	418	7114	9719	6152	-1472	-1351	-2931	C
60	ATOM	5947	CB	LEU	F	418	17.537	-15.398	-57.923	1.00	57.76		C
	ANISOU	5947	CB	LEU	F	418	6989	9374	5583	-1201	-1274	-2707	C
	ATOM	5948	CG	LEU	F	418	18.593	-15.816	-56.888	1.00	55.19		C
	ANISOU	5948	CG	LEU	F	418	6875	8788	5307	-1122	-976	-2599	C
	ATOM	5949	CD1	LEU	F	418	19.955	-15.240	-57.229	1.00	53.26		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5949	CD1	LEU	F	418	6775	8610	4852	-874	-930	-2422	C
	ATOM	5950	CD2	LEU	F	418	18.177	-15.419	-55.497	1.00	52.84		C
	ANISOU	5950	CD2	LEU	F	418	6426	8377	5273	-1162	-838	-2481	C
	ATOM	5951	C	LEU	F	418	15.138	-15.398	-58.802	1.00	63.79		C
5	ANISOU	5951	C	LEU	F	418	7283	10437	6516	-1492	-1711	-3027	C
	ATOM	5952	O	LEU	F	418	15.392	-15.465	-60.017	1.00	65.29		O
	ANISOU	5952	O	LEU	F	418	7619	10766	6424	-1442	-1904	-3087	O
	ATOM	5953	N	ASN	F	419	14.019	-14.860	-58.308	1.00	65.15		N
10	ANISOU	5953	N	ASN	F	419	7085	10711	6958	-1553	-1798	-3047	N
	ATOM	5954	CA	ASN	F	419	12.905	-14.410	-59.137	1.00	69.14		C
	ANISOU	5954	CA	ASN	F	419	7285	11496	7490	-1571	-2166	-3170	C
	ATOM	5955	CB	ASN	F	419	11.688	-15.328	-58.915	1.00	72.59		C
	ANISOU	5955	CB	ASN	F	419	7461	11934	8184	-1910	-2173	-3488	C
	ATOM	5956	CG	ASN	F	419	11.896	-16.734	-59.469	1.00	75.06		C
15	ANISOU	5956	CG	ASN	F	419	8060	12114	8344	-2158	-2126	-3731	C
	ATOM	5957	OD1	ASN	F	419	12.169	-16.915	-60.657	1.00	76.13		O
	ANISOU	5957	OD1	ASN	F	419	8378	12363	8185	-2114	-2350	-3807	O
	ATOM	5958	ND2	ASN	F	419	11.741	-17.738	-58.608	1.00	76.18		N
20	ANISOU	5958	ND2	ASN	F	419	8272	11998	8674	-2427	-1828	-3861	N
	ATOM	5959	C	ASN	F	419	12.492	-12.941	-58.929	1.00	68.82		C
	ANISOU	5959	C	ASN	F	419	6962	11617	7568	-1329	-2328	-2971	C
	ATOM	5960	O	ASN	F	419	11.329	-12.583	-59.159	1.00	71.70		O
	ANISOU	5960	O	ASN	F	419	6960	12179	8104	-1346	-2585	-3092	O
	ATOM	5961	N	PHE	F	420	13.438	-12.093	-58.525	1.00	65.87		N
25	ANISOU	5961	N	PHE	F	420	6754	11162	7112	-1099	-2193	-2683	N
	ATOM	5962	CA	PHE	F	420	13.118	-10.705	-58.172	1.00	65.85		C
	ANISOU	5962	CA	PHE	F	420	6538	11242	7241	-872	-2295	-2489	C
	ATOM	5963	CB	PHE	F	420	14.226	-10.056	-57.331	1.00	61.88		C
30	ANISOU	5963	CB	PHE	F	420	6236	10564	6710	-720	-2025	-2217	C
	ATOM	5964	CG	PHE	F	420	14.370	-10.644	-55.947	1.00	60.67		C
	ANISOU	5964	CG	PHE	F	420	6083	10193	6774	-865	-1658	-2251	C
	ATOM	5965	CD1	PHE	F	420	15.369	-11.592	-55.674	1.00	58.71		C
	ANISOU	5965	CD1	PHE	F	420	6148	9758	6401	-954	-1418	-2253	C
35	ATOM	5966	CE1	PHE	F	420	15.511	-12.143	-54.394	1.00	56.02		C
	ANISOU	5966	CE1	PHE	F	420	5866	9196	6224	-1073	-1110	-2262	C
	ATOM	5967	CZ	PHE	F	420	14.657	-11.740	-53.367	1.00	56.93		C
	ANISOU	5967	CZ	PHE	F	420	5728	9288	6616	-1135	-998	-2278	C
	ATOM	5968	CE2	PHE	F	420	13.656	-10.794	-53.617	1.00	59.27		C
40	ANISOU	5968	CE2	PHE	F	420	5671	9783	7065	-1048	-1201	-2302	C
	ATOM	5969	CD2	PHE	F	420	13.516	-10.248	-54.907	1.00	61.33		C
	ANISOU	5969	CD2	PHE	F	420	5874	10254	7176	-897	-1551	-2282	C
	ATOM	5970	C	PHE	F	420	12.752	-9.824	-59.370	1.00	68.72		C
	ANISOU	5970	C	PHE	F	420	6852	11834	7423	-675	-2718	-2421	C
	ATOM	5971	O	PHE	F	420	13.329	-9.934	-60.459	1.00	69.39		O
45	ANISOU	5971	O	PHE	F	420	7220	11989	7156	-637	-2864	-2384	O
	ATOM	5972	N	VAL	F	421	11.776	-8.954	-59.131	1.00	70.81		N
	ANISOU	5972	N	VAL	F	421	6770	12208	7928	-541	-2906	-2410	N
	ATOM	5973	CA	VAL	F	421	11.229	-8.033	-60.118	1.00	74.14		C
50	ANISOU	5973	CA	VAL	F	421	7105	12827	8236	-313	-3351	-2341	C
	ATOM	5974	CB	VAL	F	421	9.792	-8.485	-60.500	1.00	78.54		C
	ANISOU	5974	CB	VAL	F	421	7234	13606	9001	-421	-3660	-2651	C
	ATOM	5975	CG1	VAL	F	421	8.878	-7.313	-60.807	1.00	82.04		C
	ANISOU	5975	CG1	VAL	F	421	7378	14217	9575	-122	-4060	-2593	C
55	ATOM	5976	CG2	VAL	F	421	9.832	-9.491	-61.650	1.00	80.93		C
	ANISOU	5976	CG2	VAL	F	421	7719	14022	9009	-611	-3856	-2839	C
	ATOM	5977	C	VAL	F	421	11.256	-6.621	-59.499	1.00	73.25		C
	ANISOU	5977	C	VAL	F	421	6923	12642	8268	-29	-3339	-2091	C
	ATOM	5978	O	VAL	F	421	11.324	-6.490	-58.270	1.00	71.13		O
60	ANISOU	5978	O	VAL	F	421	6541	12226	8260	-56	-3019	-2067	O
	ATOM	5979	N	ASN	F	422	11.235	-5.578	-60.335	1.00	75.33		N
	ANISOU	5979	N	ASN	F	422	7301	12982	8339	236	-3678	-1903	N
	ATOM	5980	CA	ASN	F	422	11.155	-4.182	-59.848	1.00	75.16		C
	ANISOU	5980	CA	ASN	F	422	7234	12867	8457	526	-3716	-1678	C
	ATOM	5981	CB	ASN	F	422	11.971	-3.211	-60.732	1.00	75.42		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	5981	CB	ASN	F	422	7709	12848	8099	726	-3890	-1361	C
	ATOM	5982	CG	ASN	F	422	11.733	-3.403	-62.234	1.00	78.66		C
	ANISOU	5982	CG	ASN	F	422	8283	13451	8152	754	-4312	-1386	C
	ATOM	5983	OD1	ASN	F	422	12.644	-3.194	-63.032	1.00	78.39		O
5	ANISOU	5983	OD1	ASN	F	422	8691	13389	7703	758	-4323	-1195	O
	ATOM	5984	ND2	ASN	F	422	10.515	-3.784	-62.621	1.00	82.48		N
	ANISOU	5984	ND2	ASN	F	422	8411	14140	8786	763	-4655	-1629	N
	ATOM	5985	C	ASN	F	422	9.730	-3.647	-59.623	1.00	78.75		C
	ANISOU	5985	C	ASN	F	422	7196	13446	9279	707	-3985	-1818	C
10	ATOM	5986	O	ASN	F	422	8.770	-4.093	-60.259	1.00	82.55		O
	ANISOU	5986	O	ASN	F	422	7398	14147	9820	676	-4307	-2041	O
	ATOM	5987	N	ASN	F	425	7.024	-4.833	-63.856	1.00	98.86		N
	ANISOU	5987	N	ASN	F	425	9351	16900	11312	750	-5734	-2397	N
	ATOM	5988	CA	ASN	F	425	7.135	-6.277	-63.620	1.00	97.53		C
15	ANISOU	5988	CA	ASN	F	425	9123	16747	11187	326	-5436	-2676	C
	ATOM	5989	CB	ASN	F	425	5.828	-6.981	-64.027	1.00	102.75		C
	ANISOU	5989	CB	ASN	F	425	9296	17692	12053	177	-5785	-3064	C
	ATOM	5990	CG	ASN	F	425	5.624	-8.316	-63.314	1.00	102.31		C
	ANISOU	5990	CG	ASN	F	425	9017	17603	12253	-265	-5400	-3381	C
20	ATOM	5991	OD1	ASN	F	425	5.938	-8.463	-62.125	1.00	99.34		O
	ANISOU	5991	OD1	ASN	F	425	8595	17029	12122	-377	-4908	-3350	O
	ATOM	5992	ND2	ASN	F	425	5.084	-9.292	-64.040	1.00	106.55		N
	ANISOU	5992	ND2	ASN	F	425	9446	18321	12716	-527	-5632	-3690	N
	ATOM	5993	C	ASN	F	425	8.361	-6.918	-64.312	1.00	94.87		C
25	ANISOU	5993	C	ASN	F	425	9373	16317	10355	150	-5275	-2581	C
	ATOM	5994	O	ASN	F	425	8.342	-8.097	-64.685	1.00	95.60		O
	ANISOU	5994	O	ASN	F	425	9505	16474	10347	-145	-5240	-2830	O
	ATOM	5995	N	GLN	F	426	9.430	-6.136	-64.450	1.00	91.71		N
	ANISOU	5995	N	GLN	F	426	9420	15760	9667	322	-5153	-2238	N
30	ATOM	5996	CA	GLN	F	426	10.599	-6.536	-65.229	1.00	89.89		C
	ANISOU	5996	CA	GLN	F	426	9732	15477	8946	211	-5027	-2133	C
	ATOM	5997	CB	GLN	F	426	11.215	-5.312	-65.891	1.00	90.44		C
	ANISOU	5997	CB	GLN	F	426	10206	15499	8656	478	-5188	-1769	C
	ATOM	5998	CG	GLN	F	426	10.299	-4.689	-66.940	1.00	97.68		C
35	ANISOU	5998	CG	GLN	F	426	11101	16610	9404	704	-5808	-1744	C
	ATOM	5999	CD	GLN	F	426	10.355	-3.172	-66.960	1.00	99.86		C
	ANISOU	5999	CD	GLN	F	426	11537	16771	9635	1056	-5984	-1390	C
	ATOM	6000	OE1	GLN	F	426	10.705	-2.530	-65.963	1.00	97.48		O
	ANISOU	6000	OE1	GLN	F	426	11179	16268	9590	1145	-5681	-1230	O
40	ATOM	6001	NE2	GLN	F	426	9.997	-2.588	-68.101	1.00	105.16		N
	ANISOU	6001	NE2	GLN	F	426	12440	17552	9963	1259	-6492	-1268	N
	ATOM	6002	C	GLN	F	426	11.620	-7.231	-64.357	1.00	84.44		C
	ANISOU	6002	C	GLN	F	426	9182	14578	8323	4	-4459	-2135	C
	ATOM	6003	O	GLN	F	426	11.740	-6.912	-63.176	1.00	81.85		O
45	ANISOU	6003	O	GLN	F	426	8691	14096	8313	37	-4164	-2056	O
	ATOM	6004	N	ARG	F	427	12.359	-8.169	-64.948	1.00	83.25		N
	ANISOU	6004	N	ARG	F	427	9349	14421	7862	-189	-4319	-2232	N
	ATOM	6005	CA	ARG	F	427	13.309	-9.025	-64.224	1.00	78.32		C
	ANISOU	6005	CA	ARG	F	427	8863	13606	7291	-373	-3826	-2279	C
50	ATOM	6006	CB	ARG	F	427	13.485	-10.355	-64.972	1.00	80.10		C
	ANISOU	6006	CB	ARG	F	427	9276	13874	7285	-608	-3811	-2550	C
	ATOM	6007	CG	ARG	F	427	14.098	-11.462	-64.139	1.00	76.56		C
	ANISOU	6007	CG	ARG	F	427	8883	13214	6993	-803	-3370	-2682	C
	ATOM	6008	CD	ARG	F	427	14.519	-12.666	-64.971	1.00	77.87		C
55	ANISOU	6008	CD	ARG	F	427	9339	13376	6870	-982	-3325	-2916	C
	ATOM	6009	NE	ARG	F	427	15.694	-13.289	-64.368	1.00	73.46		N
	ANISOU	6009	NE	ARG	F	427	9005	12591	6315	-1013	-2884	-2889	N
	ATOM	6010	CZ	ARG	F	427	15.669	-14.203	-63.397	1.00	71.27		C
	ANISOU	6010	CZ	ARG	F	427	8652	12105	6323	-1165	-2616	-3026	C
60	ATOM	6011	NH1	ARG	F	427	14.518	-14.649	-62.913	1.00	72.31		N
	ANISOU	6011	NH1	ARG	F	427	8487	12227	6763	-1350	-2697	-3217	N
	ATOM	6012	NH2	ARG	F	427	16.809	-14.675	-62.908	1.00	67.90		N
	ANISOU	6012	NH2	ARG	F	427	8452	11478	5871	-1132	-2266	-2974	N
	ATOM	6013	C	ARG	F	427	14.672	-8.348	-64.009	1.00	74.70		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6013	C	ARG	F	427	8734	13001	6647	-251	-3533	-1973	C
	ATOM	6014	O	ARG	F	427	15.300	-7.904	-64.973	1.00	75.87		O
	ANISOU	6014	O	ARG	F	427	9220	13212	6395	-172	-3625	-1821	O
	ATOM	6015	N	LEU	F	428	15.131	-8.282	-62.758	1.00	70.08		N
5	ANISOU	6015	N	LEU	F	428	8058	12231	6337	-257	-3177	-1893	N
	ATOM	6016	CA	LEU	F	428	16.419	-7.647	-62.441	1.00	66.81		C
	ANISOU	6016	CA	LEU	F	428	7899	11689	5796	-165	-2899	-1630	C
	ATOM	6017	CB	LEU	F	428	16.562	-7.399	-60.921	1.00	63.57		C
	ANISOU	6017	CB	LEU	F	428	7303	11097	5755	-149	-2609	-1557	C
10	ATOM	6018	CG	LEU	F	428	15.516	-6.574	-60.147	1.00	63.89		C
	ANISOU	6018	CG	LEU	F	428	7011	11121	6144	-34	-2730	-1518	C
	ATOM	6019	CD1	LEU	F	428	15.697	-6.733	-58.634	1.00	62.28		C
	ANISOU	6019	CD1	LEU	F	428	6672	10736	6257	-96	-2381	-1524	C
	ATOM	6020	CD2	LEU	F	428	15.535	-5.103	-60.527	1.00	64.62		C
15	ANISOU	6020	CD2	LEU	F	428	7197	11227	6130	203	-2935	-1253	C
	ATOM	6021	C	LEU	F	428	17.636	-8.433	-62.980	1.00	65.60		C
	ANISOU	6021	C	LEU	F	428	8076	11517	5330	-268	-2664	-1675	C
	ATOM	6022	O	LEU	F	428	17.516	-9.608	-63.330	1.00	66.61		O
	ANISOU	6022	O	LEU	F	428	8239	11668	5402	-417	-2648	-1925	O
20	ATOM	6023	N	ASN	F	429	18.796	-7.770	-63.056	1.00	63.59		N
	ANISOU	6023	N	ASN	F	429	8056	11222	4884	-191	-2477	-1450	N
	ATOM	6024	CA	ASN	F	429	20.054	-8.420	-63.463	1.00	62.44		C
	ANISOU	6024	CA	ASN	F	429	8171	11070	4485	-261	-2205	-1496	C
	ATOM	6025	CB	ASN	F	429	21.027	-7.413	-64.103	1.00	63.01		C
25	ANISOU	6025	CB	ASN	F	429	8510	11197	4233	-193	-2135	-1245	C
	ATOM	6026	CG	ASN	F	429	21.529	-6.363	-63.128	1.00	60.93		C
	ANISOU	6026	CG	ASN	F	429	8175	10809	4167	-113	-1976	-998	C
	ATOM	6027	OD1	ASN	F	429	22.477	-6.593	-62.368	1.00	58.51		O
	ANISOU	6027	OD1	ASN	F	429	7839	10412	3980	-137	-1668	-990	O
30	ATOM	6028	ND2	ASN	F	429	20.914	-5.187	-63.169	1.00	62.71		N
	ANISOU	6028	ND2	ASN	F	429	8387	11023	4418	-6	-2203	-799	N
	ATOM	6029	C	ASN	F	429	20.718	-9.203	-62.314	1.00	58.73		C
	ANISOU	6029	C	ASN	F	429	7615	10428	4271	-309	-1860	-1579	C
	ATOM	6030	O	ASN	F	429	20.508	-8.869	-61.159	1.00	56.33		O
35	ANISOU	6030	O	ASN	F	429	7122	10004	4278	-277	-1781	-1501	O
	ATOM	6031	N	PRO	F	430	21.502	-10.253	-62.639	1.00	58.55		N
	ANISOU	6031	N	PRO	F	430	7752	10388	4107	-370	-1665	-1747	N
	ATOM	6032	CA	PRO	F	430	22.103	-11.214	-61.701	1.00	56.25		C
	ANISOU	6032	CA	PRO	F	430	7432	9919	4022	-392	-1387	-1860	C
40	ATOM	6033	CB	PRO	F	430	23.143	-11.919	-62.569	1.00	57.92		C
	ANISOU	6033	CB	PRO	F	430	7882	10184	3943	-387	-1225	-1989	C
	ATOM	6034	CG	PRO	F	430	22.512	-11.934	-63.934	1.00	61.22		C
	ANISOU	6034	CG	PRO	F	430	8436	10778	4048	-454	-1472	-2086	C
	ATOM	6035	CD	PRO	F	430	21.832	-10.598	-64.041	1.00	61.60		C
45	ANISOU	6035	CD	PRO	F	430	8395	10925	4087	-406	-1721	-1851	C
	ATOM	6036	C	PRO	F	430	22.770	-10.649	-60.433	1.00	53.25		C
	ANISOU	6036	C	PRO	F	430	6949	9412	3872	-310	-1184	-1672	C
	ATOM	6037	O	PRO	F	430	22.727	-11.279	-59.364	1.00	51.32		O
	ANISOU	6037	O	PRO	F	430	6623	8994	3881	-331	-1058	-1737	O
50	ATOM	6038	N	MSE	F	431	23.393	-9.482	-60.550	1.00	52.56		N
	ANISOU	6038	N	MSE	F	431	6896	9398	3678	-235	-1153	-1444	N
	ATOM	6039	CA	MSE	F	431	24.056	-8.867	-59.414	1.00	49.48		C
	ANISOU	6039	CA	MSE	F	431	6418	8904	3479	-176	-983	-1278	C
	ATOM	6040	CB	MSE	F	431	25.096	-7.852	-59.885	1.00	49.34		C
55	ANISOU	6040	CB	MSE	F	431	6508	8987	3253	-144	-888	-1088	C
	ATOM	6041	CG	MSE	F	431	26.338	-8.505	-60.487	1.00	49.79		C
	ANISOU	6041	CG	MSE	F	431	6683	9129	3106	-146	-670	-1196	C
	ATOM	6042	SE	MSE	F	431	27.421	-9.500	-59.208	0.90	48.52		SE
	ANISOU	6042	SE	MSE	F	431	6408	8820	3206	-65	-407	-1314	SE
60	ATOM	6043	CE	MSE	F	431	28.095	-8.003	-58.164	1.00	42.60		C
	ANISOU	6043	CE	MSE	F	431	5533	8047	2607	-51	-331	-1034	C
	ATOM	6044	C	MSE	F	431	23.033	-8.245	-58.467	1.00	48.53		C
	ANISOU	6044	C	MSE	F	431	6111	8689	3637	-167	-1099	-1191	C
	ATOM	6045	O	MSE	F	431	23.151	-8.389	-57.249	1.00	46.67		O

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6045	O	MSE	F	431	5784	8310	3637	-162	-966	-1179	O
	ATOM	6046	N	HIS	F	432	22.022	-7.577	-59.025	1.00	50.21		N
	ANISOU	6046	N	HIS	F	432	6275	8987	3817	-152	-1351	-1142	N
	ATOM	6047	CA	HIS	F	432	20.939	-6.996	-58.216	1.00	50.13		C
5	ANISOU	6047	CA	HIS	F	432	6049	8909	4088	-120	-1466	-1100	C
	ATOM	6048	CB	HIS	F	432	20.214	-5.876	-58.970	1.00	52.12		C
	ANISOU	6048	CB	HIS	F	432	6294	9261	4248	-24	-1753	-971	C
	ATOM	6049	CG	HIS	F	432	21.028	-4.628	-59.064	1.00	53.16		C
	ANISOU	6049	CG	HIS	F	432	6589	9363	4245	57	-1703	-709	C
10	ATOM	6050	ND1	HIS	F	432	21.765	-4.303	-60.183	1.00	56.08		N
	ANISOU	6050	ND1	HIS	F	432	7218	9830	4259	47	-1719	-603	N
	ATOM	6051	CE1	HIS	F	432	22.416	-3.175	-59.964	1.00	55.82		C
	ANISOU	6051	CE1	HIS	F	432	7296	9724	4188	81	-1633	-377	C
	ATOM	6052	NE2	HIS	F	432	22.146	-2.768	-58.736	1.00	53.78		N
15	ANISOU	6052	NE2	HIS	F	432	6864	9325	4245	128	-1574	-342	N
	ATOM	6053	CD2	HIS	F	432	21.287	-3.664	-58.149	1.00	52.46		C
	ANISOU	6053	CD2	HIS	F	432	6466	9146	4318	116	-1604	-545	C
	ATOM	6054	C	HIS	F	432	19.976	-8.044	-57.680	1.00	50.25		C
	ANISOU	6054	C	HIS	F	432	5890	8868	4334	-223	-1472	-1325	C
20	ATOM	6055	O	HIS	F	432	19.291	-7.825	-56.678	1.00	49.54		O
	ANISOU	6055	O	HIS	F	432	5610	8692	4520	-230	-1440	-1330	O
	ATOM	6056	N	GLN	F	433	19.961	-9.185	-58.363	1.00	51.26		N
	ANISOU	6056	N	GLN	F	433	6103	9036	4336	-321	-1489	-1523	N
	ATOM	6057	CA	GLN	F	433	19.267	-10.386	-57.940	1.00	51.44		C
25	ANISOU	6057	CA	GLN	F	433	6036	8972	4537	-471	-1445	-1757	C
	ATOM	6058	CB	GLN	F	433	19.368	-11.415	-59.072	1.00	53.59		C
	ANISOU	6058	CB	GLN	F	433	6472	9312	4577	-558	-1515	-1959	C
	ATOM	6059	CG	GLN	F	433	18.243	-12.401	-59.174	1.00	56.54		C
	ANISOU	6059	CG	GLN	F	433	6733	9673	5078	-746	-1618	-2223	C
30	ATOM	6060	CD	GLN	F	433	16.932	-11.816	-59.689	1.00	59.82		C
	ANISOU	6060	CD	GLN	F	433	6898	10278	5554	-765	-1945	-2270	C
	ATOM	6061	OE1	GLN	F	433	15.859	-12.218	-59.245	1.00	61.27		O
	ANISOU	6061	OE1	GLN	F	433	6840	10449	5990	-910	-1990	-2434	O
	ATOM	6062	NE2	GLN	F	433	17.012	-10.890	-60.639	1.00	62.13		N
35	ANISOU	6062	NE2	GLN	F	433	7249	10744	5612	-622	-2176	-2135	N
	ATOM	6063	C	GLN	F	433	19.878	-10.921	-56.630	1.00	48.94		C
	ANISOU	6063	C	GLN	F	433	5764	8437	4393	-497	-1154	-1743	C
	ATOM	6064	O	GLN	F	433	19.161	-11.164	-55.657	1.00	48.75		O
	ANISOU	6064	O	GLN	F	433	5604	8301	4617	-588	-1080	-1799	O
40	ATOM	6065	N	LEU	F	434	21.204	-11.080	-56.605	1.00	47.33		N
	ANISOU	6065	N	LEU	F	434	5750	8183	4051	-415	-991	-1671	N
	ATOM	6066	CA	LEU	F	434	21.915	-11.611	-55.435	1.00	45.33		C
	ANISOU	6066	CA	LEU	F	434	5572	7729	3923	-399	-763	-1651	C
	ATOM	6067	CB	LEU	F	434	23.375	-11.926	-55.764	1.00	44.35		C
45	ANISOU	6067	CB	LEU	F	434	5621	7609	3622	-286	-638	-1633	C
	ATOM	6068	CG	LEU	F	434	23.737	-13.106	-56.671	1.00	46.26		C
	ANISOU	6068	CG	LEU	F	434	6031	7847	3701	-298	-613	-1839	C
	ATOM	6069	CD1	LEU	F	434	25.048	-12.834	-57.429	1.00	45.03		C
	ANISOU	6069	CD1	LEU	F	434	5961	7831	3320	-170	-529	-1797	C
50	ATOM	6070	CD2	LEU	F	434	23.811	-14.406	-55.887	1.00	45.64		C
	ANISOU	6070	CD2	LEU	F	434	6075	7510	3756	-328	-486	-1973	C
	ATOM	6071	C	LEU	F	434	21.877	-10.621	-54.289	1.00	43.61		C
	ANISOU	6071	C	LEU	F	434	5240	7453	3875	-350	-703	-1470	C
	ATOM	6072	O	LEU	F	434	21.795	-11.014	-53.136	1.00	42.36		O
55	ANISOU	6072	O	LEU	F	434	5094	7124	3877	-394	-569	-1478	O
	ATOM	6073	N	LEU	F	435	21.949	-9.337	-54.633	1.00	43.83		N
	ANISOU	6073	N	LEU	F	435	5202	7609	3845	-265	-801	-1307	N
	ATOM	6074	CA	LEU	F	435	21.877	-8.246	-53.682	1.00	42.80		C
	ANISOU	6074	CA	LEU	F	435	4980	7425	3858	-212	-765	-1145	C
60	ATOM	6075	CB	LEU	F	435	22.151	-6.916	-54.393	1.00	43.44		C
	ANISOU	6075	CB	LEU	F	435	5072	7627	3806	-118	-883	-969	C
	ATOM	6076	CG	LEU	F	435	22.046	-5.590	-53.631	1.00	43.35		C
	ANISOU	6076	CG	LEU	F	435	4998	7552	3919	-51	-879	-798	C
	ATOM	6077	CD1	LEU	F	435	23.280	-5.323	-52.808	1.00	40.78		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6077	CD1	LEU	F	435	4764	7145	3587	-39	-699	-695	C
	ATOM	6078	CD2	LEU	F	435	21.811	-4.465	-54.623	1.00	46.94		C
	ANISOU	6078	CD2	LEU	F	435	5485	8107	4244	28	-1070	-665	C
	ATOM	6079	C	LEU	F	435	20.548	-8.204	-52.917	1.00	43.61		C
5	ANISOU	6079	C	LEU	F	435	4899	7464	4207	-283	-781	-1217	C
	ATOM	6080	O	LEU	F	435	20.564	-8.107	-51.684	1.00	43.27		O
	ANISOU	6080	O	LEU	F	435	4845	7285	4311	-301	-630	-1181	O
	ATOM	6081	N	ARG	F	436	19.419	-8.281	-53.628	1.00	45.19		N
10	ANISOU	6081	N	ARG	F	436	4950	7774	4447	-327	-958	-1331	N
	ATOM	6082	CA	ARG	F	436	18.092	-8.308	-52.997	1.00	46.39		C
	ANISOU	6082	CA	ARG	F	436	4861	7907	4858	-409	-963	-1447	C
	ATOM	6083	CB	ARG	F	436	16.958	-8.209	-54.025	1.00	49.83		C
	ANISOU	6083	CB	ARG	F	436	5092	8525	5315	-416	-1236	-1567	C
	ATOM	6084	CG	ARG	F	436	16.930	-6.953	-54.854	1.00	52.80		C
15	ANISOU	6084	CG	ARG	F	436	5452	9031	5579	-222	-1482	-1411	C
	ATOM	6085	CD	ARG	F	436	16.008	-5.894	-54.293	1.00	58.94		C
	ANISOU	6085	CD	ARG	F	436	5980	9814	6599	-104	-1555	-1371	C
	ATOM	6086	NE	ARG	F	436	15.996	-4.730	-55.183	1.00	65.22		N
20	ANISOU	6086	NE	ARG	F	436	6825	10696	7261	100	-1823	-1207	N
	ATOM	6087	CZ	ARG	F	436	16.971	-3.816	-55.263	1.00	66.83		C
	ANISOU	6087	CZ	ARG	F	436	7266	10826	7300	211	-1789	-971	C
	ATOM	6088	NH1	ARG	F	436	18.065	-3.900	-54.498	1.00	64.44		N
	ANISOU	6088	NH1	ARG	F	436	7128	10393	6962	150	-1516	-886	N
	ATOM	6089	NH2	ARG	F	436	16.854	-2.803	-56.124	1.00	69.94		N
25	ANISOU	6089	NH2	ARG	F	436	7744	11271	7558	377	-2041	-820	N
	ATOM	6090	C	ARG	F	436	17.859	-9.557	-52.166	1.00	45.64		C
	ANISOU	6090	C	ARG	F	436	4800	7659	4881	-598	-758	-1602	C
	ATOM	6091	O	ARG	F	436	17.216	-9.476	-51.121	1.00	45.62		O
30	ANISOU	6091	O	ARG	F	436	4679	7574	5082	-674	-619	-1635	O
	ATOM	6092	N	HIS	F	437	18.342	-10.706	-52.646	1.00	45.31		N
	ANISOU	6092	N	HIS	F	437	4943	7568	4705	-678	-729	-1703	N
	ATOM	6093	CA	HIS	F	437	18.235	-11.973	-51.907	1.00	45.24		C
	ANISOU	6093	CA	HIS	F	437	5056	7358	4776	-856	-535	-1833	C
	ATOM	6094	CB	HIS	F	437	18.834	-13.126	-52.703	1.00	45.82		C
35	ANISOU	6094	CB	HIS	F	437	5355	7378	4675	-890	-550	-1948	C
	ATOM	6095	CG	HIS	F	437	18.890	-14.416	-51.941	1.00	46.87		C
	ANISOU	6095	CG	HIS	F	437	5698	7245	4866	-1039	-355	-2050	C
	ATOM	6096	ND1	HIS	F	437	17.806	-15.262	-51.828	1.00	50.23		N
40	ANISOU	6096	ND1	HIS	F	437	6073	7589	5423	-1302	-309	-2247	N
	ATOM	6097	CE1	HIS	F	437	18.145	-16.317	-51.107	1.00	49.92		C
	ANISOU	6097	CE1	HIS	F	437	6317	7264	5387	-1394	-120	-2277	C
	ATOM	6098	NE2	HIS	F	437	19.407	-16.186	-50.746	1.00	46.92		N
	ANISOU	6098	NE2	HIS	F	437	6143	6795	4890	-1170	-71	-2113	N
	ATOM	6099	CD2	HIS	F	437	19.897	-15.006	-51.253	1.00	45.46		C
45	ANISOU	6099	CD2	HIS	F	437	5796	6848	4628	-964	-203	-1979	C
	ATOM	6100	C	HIS	F	437	18.888	-11.907	-50.513	1.00	43.18		C
	ANISOU	6100	C	HIS	F	437	4945	6899	4562	-822	-311	-1700	C
	ATOM	6101	O	HIS	F	437	18.278	-12.279	-49.506	1.00	43.17		O
50	ANISOU	6101	O	HIS	F	437	4939	6759	4706	-972	-145	-1753	O
	ATOM	6102	N	PHE	F	438	20.125	-11.420	-50.468	1.00	41.26		N
	ANISOU	6102	N	PHE	F	438	4837	6655	4185	-641	-309	-1536	N
	ATOM	6103	CA	PHE	F	438	20.852	-11.273	-49.206	1.00	39.83		C
	ANISOU	6103	CA	PHE	F	438	4798	6315	4020	-587	-153	-1408	C
	ATOM	6104	CB	PHE	F	438	22.361	-11.316	-49.455	1.00	37.85		C
55	ANISOU	6104	CB	PHE	F	438	4709	6069	3602	-417	-169	-1313	C
	ATOM	6105	CG	PHE	F	438	22.829	-12.660	-49.947	1.00	39.60		C
	ANISOU	6105	CG	PHE	F	438	5116	6198	3733	-418	-151	-1439	C
	ATOM	6106	CD1	PHE	F	438	22.572	-13.808	-49.195	1.00	40.19		C
60	ANISOU	6106	CD1	PHE	F	438	5380	6026	3864	-522	-35	-1520	C
	ATOM	6107	CE1	PHE	F	438	22.977	-15.070	-49.651	1.00	41.92		C
	ANISOU	6107	CE1	PHE	F	438	5806	6113	4007	-509	-21	-1646	C
	ATOM	6108	CZ	PHE	F	438	23.645	-15.183	-50.862	1.00	41.42		C
	ANISOU	6108	CZ	PHE	F	438	5733	6193	3811	-388	-107	-1710	C
	ATOM	6109	CE2	PHE	F	438	23.898	-14.046	-51.625	1.00	40.68		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6109	CE2	PHE	F	438	5446	6370	3640	-307	-203	-1629	C
	ATOM	6110	CD2	PHE	F	438	23.490	-12.793	-51.171	1.00	37.92		C
	ANISOU	6110	CD2	PHE	F	438	4917	6123	3367	-324	-234	-1485	C
	ATOM	6111	C	PHE	F	438	20.402	-10.089	-48.336	1.00	39.24		C
5	ANISOU	6111	C	PHE	F	438	4583	6259	4070	-568	-108	-1305	C
	ATOM	6112	O	PHE	F	438	20.540	-10.130	-47.106	1.00	39.25		O
	ANISOU	6112	O	PHE	F	438	4694	6107	4112	-601	45	-1255	O
	ATOM	6113	N	GLN	F	439	19.858	-9.049	-48.967	1.00	39.55		N
10	ANISOU	6113	N	GLN	F	439	4408	6467	4154	-505	-247	-1277	N
	ATOM	6114	CA	GLN	F	439	19.215	-7.958	-48.236	1.00	40.07		C
	ANISOU	6114	CA	GLN	F	439	4319	6538	4370	-476	-210	-1224	C
	ATOM	6115	CB	GLN	F	439	18.927	-6.776	-49.172	1.00	40.77		C
	ANISOU	6115	CB	GLN	F	439	4244	6792	4456	-335	-421	-1156	C
	ATOM	6116	CG	GLN	F	439	20.154	-5.878	-49.485	1.00	38.76		C
15	ANISOU	6116	CG	GLN	F	439	4134	6557	4035	-195	-480	-960	C
	ATOM	6117	CD	GLN	F	439	19.884	-4.831	-50.591	1.00	40.21		C
	ANISOU	6117	CD	GLN	F	439	4240	6875	4164	-74	-700	-876	C
	ATOM	6118	OE1	GLN	F	439	18.910	-4.924	-51.358	1.00	40.53		O
20	ANISOU	6118	OE1	GLN	F	439	4129	7024	4247	-65	-866	-967	O
	ATOM	6119	NE2	GLN	F	439	20.765	-3.840	-50.676	1.00	38.72		N
	ANISOU	6119	NE2	GLN	F	439	4173	6671	3869	12	-714	-700	N
	ATOM	6120	C	GLN	F	439	17.937	-8.415	-47.506	1.00	41.99		C
	ANISOU	6120	C	GLN	F	439	4418	6725	4813	-648	-69	-1382	C
	ATOM	6121	O	GLN	F	439	17.606	-7.892	-46.434	1.00	42.49		O
25	ANISOU	6121	O	GLN	F	439	4446	6713	4984	-664	82	-1362	O
	ATOM	6122	N	LYS	F	440	17.235	-9.393	-48.079	1.00	43.71		N
	ANISOU	6122	N	LYS	F	440	4556	6978	5073	-798	-100	-1554	N
	ATOM	6123	CA	LYS	F	440	16.025	-9.948	-47.471	1.00	45.70		C
30	ANISOU	6123	CA	LYS	F	440	4653	7190	5520	-1019	59	-1732	C
	ATOM	6124	CB	LYS	F	440	15.193	-10.701	-48.516	1.00	47.97		C
	ANISOU	6124	CB	LYS	F	440	4765	7600	5862	-1159	-81	-1933	C
	ATOM	6125	CG	LYS	F	440	13.730	-10.810	-48.165	1.00	52.65		C
	ANISOU	6125	CG	LYS	F	440	5024	8266	6716	-1355	10	-2138	C
	ATOM	6126	CD	LYS	F	440	13.005	-11.813	-49.037	1.00	57.78		C
35	ANISOU	6126	CD	LYS	F	440	5548	8998	7410	-1567	-98	-2366	C
	ATOM	6127	CE	LYS	F	440	11.613	-12.094	-48.466	1.00	63.15		C
	ANISOU	6127	CE	LYS	F	440	5897	9727	8371	-1834	73	-2594	C
	ATOM	6128	NZ	LYS	F	440	10.726	-12.860	-49.401	1.00	67.40		N
40	ANISOU	6128	NZ	LYS	F	440	6202	10408	8999	-2047	-88	-2852	N
	ATOM	6129	C	LYS	F	440	16.343	-10.851	-46.265	1.00	45.04		C
	ANISOU	6129	C	LYS	F	440	4857	6858	5399	-1184	337	-1726	C
	ATOM	6130	O	LYS	F	440	15.665	-10.779	-45.235	1.00	45.28		O
	ANISOU	6130	O	LYS	F	440	4834	6818	5553	-1319	556	-1776	O
45	ATOM	6131	N	ASP	F	441	17.363	-11.702	-46.407	1.00	44.15		N
	ANISOU	6131	N	ASP	F	441	5059	6609	5107	-1164	329	-1670	N
	ATOM	6132	CA	ASP	F	441	17.851	-12.542	-45.301	1.00	44.37		C
	ANISOU	6132	CA	ASP	F	441	5434	6370	5057	-1258	537	-1623	C
	ATOM	6133	CB	ASP	F	441	17.083	-13.877	-45.220	1.00	47.39		C
50	ANISOU	6133	CB	ASP	F	441	5912	6599	5494	-1550	681	-1796	C
	ATOM	6134	CG	ASP	F	441	17.580	-14.785	-44.081	1.00	49.62		C
	ANISOU	6134	CG	ASP	F	441	6630	6558	5663	-1643	885	-1723	C
	ATOM	6135	OD1	ASP	F	441	17.900	-14.261	-42.985	1.00	47.18		O
	ANISOU	6135	OD1	ASP	F	441	6449	6174	5305	-1586	997	-1590	O
55	ATOM	6136	OD2	ASP	F	441	17.647	-16.033	-44.294	1.00	53.67		O
	ANISOU	6136	OD2	ASP	F	441	7391	6878	6124	-1769	920	-1801	O
	ATOM	6137	C	ASP	F	441	19.354	-12.779	-45.422	1.00	42.20		C
	ANISOU	6137	C	ASP	F	441	5438	6011	4585	-1054	445	-1484	C
	ATOM	6138	O	ASP	F	441	19.809	-13.476	-46.344	1.00	42.70		O
60	ANISOU	6138	O	ASP	F	441	5580	6080	4565	-1008	336	-1539	O
	ATOM	6139	N	ALA	F	442	20.119	-12.200	-44.490	1.00	39.94		N
	ANISOU	6139	N	ALA	F	442	5287	5659	4228	-932	490	-1327	N
	ATOM	6140	CA	ALA	F	442	21.587	-12.254	-44.552	1.00	37.88		C
	ANISOU	6140	CA	ALA	F	442	5212	5367	3812	-718	385	-1206	C
	ATOM	6141	CB	ALA	F	442	22.194	-10.935	-44.070	1.00	35.76		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6141	CB	ALA	F	442	4870	5197	3522	-576	341	-1061	C
	ATOM	6142	C	ALA	F	442	22.206	-13.431	-43.786	1.00	38.27		C
	ANISOU	6142	C	ALA	F	442	5637	5147	3758	-720	460	-1181	C
	ATOM	6143	O	ALA	F	442	23.427	-13.627	-43.815	1.00	37.55		O
5	ANISOU	6143	O	ALA	F	442	5683	5026	3559	-521	361	-1107	O
	ATOM	6144	N	LYS	F	443	21.364	-14.209	-43.117	1.00	39.15		N
	ANISOU	6144	N	LYS	F	443	5911	5060	3903	-941	634	-1246	N
	ATOM	6145	CA	LYS	F	443	21.830	-15.168	-42.119	1.00	40.19		C
10	ANISOU	6145	CA	LYS	F	443	6467	4887	3916	-956	722	-1181	C
	ATOM	6146	CB	LYS	F	443	20.647	-15.777	-41.368	1.00	42.67		C
	ANISOU	6146	CB	LYS	F	443	6926	5010	4276	-1279	972	-1253	C
	ATOM	6147	CG	LYS	F	443	20.361	-15.115	-40.038	1.00	42.60		C
	ANISOU	6147	CG	LYS	F	443	7000	4958	4230	-1361	1138	-1163	C
	ATOM	6148	CD	LYS	F	443	19.175	-15.766	-39.380	1.00	45.79		C
15	ANISOU	6148	CD	LYS	F	443	7535	5190	4676	-1716	1431	-1256	C
	ATOM	6149	CE	LYS	F	443	17.886	-15.276	-40.009	1.00	47.38		C
	ANISOU	6149	CE	LYS	F	443	7261	5629	5111	-1902	1514	-1439	C
	ATOM	6150	NZ	LYS	F	443	17.018	-16.416	-40.328	1.00	51.45		N
20	ANISOU	6150	NZ	LYS	F	443	7824	6016	5707	-2211	1655	-1602	N
	ATOM	6151	C	LYS	F	443	22.727	-16.272	-42.669	1.00	40.29		C
	ANISOU	6151	C	LYS	F	443	6714	4754	3841	-804	609	-1201	C
	ATOM	6152	O	LYS	F	443	23.776	-16.559	-42.095	1.00	39.70		O
	ANISOU	6152	O	LYS	F	443	6892	4543	3650	-607	536	-1092	O
	ATOM	6153	N	VAL	F	444	22.306	-16.894	-43.771	1.00	40.93		N
25	ANISOU	6153	N	VAL	F	444	6708	4865	3980	-884	583	-1356	N
	ATOM	6154	CA	VAL	F	444	23.106	-17.948	-44.424	1.00	41.02		C
	ANISOU	6154	CA	VAL	F	444	6929	4738	3917	-730	491	-1416	C
	ATOM	6155	CB	VAL	F	444	22.315	-18.633	-45.563	1.00	42.70		C
30	ANISOU	6155	CB	VAL	F	444	7062	4969	4193	-911	498	-1626	C
	ATOM	6156	CG1	VAL	F	444	23.094	-19.832	-46.148	1.00	43.29		C
	ANISOU	6156	CG1	VAL	F	444	7417	4842	4187	-760	438	-1715	C
	ATOM	6157	CG2	VAL	F	444	20.936	-19.073	-45.051	1.00	44.72		C
	ANISOU	6157	CG2	VAL	F	444	7368	5079	4545	-1289	687	-1713	C
35	ATOM	6158	C	VAL	F	444	24.422	-17.346	-44.942	1.00	38.71		C
	ANISOU	6158	C	VAL	F	444	6494	4651	3563	-400	317	-1349	C
	ATOM	6159	O	VAL	F	444	25.494	-17.944	-44.813	1.00	39.03		O
	ANISOU	6159	O	VAL	F	444	6739	4560	3529	-169	245	-1320	O
	ATOM	6160	N	LEU	F	445	24.333	-16.142	-45.489	1.00	36.36		N
40	ANISOU	6160	N	LEU	F	445	5845	4667	3303	-380	255	-1326	N
	ATOM	6161	CA	LEU	F	445	25.508	-15.420	-45.967	1.00	34.90		C
	ANISOU	6161	CA	LEU	F	445	5500	4697	3063	-133	131	-1260	C
	ATOM	6162	CB	LEU	F	445	25.098	-14.069	-46.554	1.00	32.55		C
	ANISOU	6162	CB	LEU	F	445	4867	4693	2805	-184	89	-1227	C
45	ATOM	6163	CG	LEU	F	445	26.226	-13.137	-46.999	1.00	31.63		C
	ANISOU	6163	CG	LEU	F	445	4587	4801	2630	0	-2	-1143	C
	ATOM	6164	CD1	LEU	F	445	26.905	-13.645	-48.265	1.00	30.39		C
	ANISOU	6164	CD1	LEU	F	445	4401	4755	2391	115	-50	-1248	C
	ATOM	6165	CD2	LEU	F	445	25.692	-11.704	-47.173	1.00	30.43		C
50	ANISOU	6165	CD2	LEU	F	445	4199	4843	2521	-73	-28	-1062	C
	ATOM	6166	C	LEU	F	445	26.542	-15.233	-44.853	1.00	35.09		C
	ANISOU	6166	C	LEU	F	445	5661	4635	3035	44	94	-1119	C
	ATOM	6167	O	LEU	F	445	27.710	-15.627	-44.999	1.00	35.50		O
	ANISOU	6167	O	LEU	F	445	5772	4680	3036	277	8	-1121	O
55	ATOM	6168	N	PHE	F	446	26.090	-14.642	-43.743	1.00	35.06		N
	ANISOU	6168	N	PHE	F	446	5700	4578	3045	-65	157	-1016	N
	ATOM	6169	CA	PHE	F	446	26.937	-14.316	-42.610	1.00	35.44		C
	ANISOU	6169	CA	PHE	F	446	5879	4565	3023	66	102	-884	C
	ATOM	6170	CB	PHE	F	446	26.155	-13.442	-41.604	1.00	33.86		C
60	ANISOU	6170	CB	PHE	F	446	5673	4356	2836	-109	206	-808	C
	ATOM	6171	CG	PHE	F	446	26.103	-11.980	-41.978	1.00	30.18		C
	ANISOU	6171	CG	PHE	F	446	4878	4157	2434	-115	174	-779	C
	ATOM	6172	CD1	PHE	F	446	26.572	-11.539	-43.229	1.00	28.69		C
	ANISOU	6172	CD1	PHE	F	446	4433	4194	2273	-20	77	-809	C
	ATOM	6173	CE1	PHE	F	446	26.527	-10.181	-43.583	1.00	26.71		C

ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6173	CE1	PHE	F	446	3939	4146	2063	-34	47	-761	C
	ATOM	6174	CZ	PHE	F	446	25.987	-9.247	-42.674	1.00	27.01		C
	ANISOU	6174	CZ	PHE	F	446	3967	4156	2138	-123	111	-702	C
	ATOM	6175	CE2	PHE	F	446	25.498	-9.688	-41.439	1.00	24.47		C
5	ANISOU	6175	CE2	PHE	F	446	3871	3634	1792	-215	223	-696	C
	ATOM	6176	CD2	PHE	F	446	25.556	-11.045	-41.101	1.00	28.12		C
	ANISOU	6176	CD2	PHE	F	446	4595	3899	2192	-223	257	-724	C
	ATOM	6177	C	PHE	F	446	27.501	-15.562	-41.943	1.00	38.56		C
	ANISOU	6177	C	PHE	F	446	6654	4667	3332	191	66	-864	C
10	ATOM	6178	O	PHE	F	446	28.671	-15.593	-41.562	1.00	39.82		O
	ANISOU	6178	O	PHE	F	446	6870	4828	3433	430	-77	-804	O
	ATOM	6179	N	GLN	F	447	26.677	-16.596	-41.820	1.00	41.56		N
	ANISOU	6179	N	GLN	F	447	7294	4789	3708	31	185	-921	N
	ATOM	6180	CA	GLN	F	447	27.057	-17.775	-41.044	1.00	45.64		C
15	ANISOU	6180	CA	GLN	F	447	8264	4954	4124	121	165	-873	C
	ATOM	6181	CB	GLN	F	447	25.815	-18.492	-40.478	1.00	47.48		C
	ANISOU	6181	CB	GLN	F	447	8800	4901	4339	-200	378	-890	C
	ATOM	6182	CG	GLN	F	447	25.073	-17.727	-39.352	1.00	48.48		C
	ANISOU	6182	CG	GLN	F	447	8957	5035	4427	-424	529	-798	C
20	ATOM	6183	CD	GLN	F	447	23.680	-18.313	-39.041	1.00	50.68		C
	ANISOU	6183	CD	GLN	F	447	9403	5119	4735	-807	800	-867	C
	ATOM	6184	OE1	GLN	F	447	23.423	-19.504	-39.267	1.00	54.85		O
	ANISOU	6184	OE1	GLN	F	447	10205	5382	5253	-905	862	-931	O
	ATOM	6185	NE2	GLN	F	447	22.781	-17.469	-38.526	1.00	51.31		N
25	ANISOU	6185	NE2	GLN	F	447	9309	5325	4860	-1031	975	-872	N
	ATOM	6186	C	GLN	F	447	27.949	-18.752	-41.824	1.00	47.16		C
	ANISOU	6186	C	GLN	F	447	8540	5061	4318	384	43	-961	C
	ATOM	6187	O	GLN	F	447	28.431	-19.731	-41.252	1.00	49.81		O
	ANISOU	6187	O	GLN	F	447	9258	5091	4576	537	-19	-919	O
30	ATOM	6188	N	ASN	F	448	28.178	-18.487	-43.112	1.00	46.16		N
	ANISOU	6188	N	ASN	F	448	8083	5190	4265	451	9	-1083	N
	ATOM	6189	CA	ASN	F	448	29.028	-19.362	-43.933	1.00	47.96		C
	ANISOU	6189	CA	ASN	F	448	8359	5368	4497	707	-74	-1202	C
	ATOM	6190	CB	ASN	F	448	28.210	-20.041	-45.037	1.00	48.76		C
35	ANISOU	6190	CB	ASN	F	448	8474	5419	4635	530	28	-1384	C
	ATOM	6191	CG	ASN	F	448	27.331	-21.142	-44.506	1.00	51.36		C
	ANISOU	6191	CG	ASN	F	448	9217	5346	4949	321	138	-1405	C
	ATOM	6192	OD1	ASN	F	448	27.684	-22.318	-44.583	1.00	56.22		O
	ANISOU	6192	OD1	ASN	F	448	10163	5660	5540	452	119	-1474	O
40	ATOM	6193	ND2	ASN	F	448	26.186	-20.775	-43.948	1.00	51.17		N
	ANISOU	6193	ND2	ASN	F	448	9191	5303	4948	-10	270	-1356	N
	ATOM	6194	C	ASN	F	448	30.261	-18.680	-44.526	1.00	47.16		C
	ANISOU	6194	C	ASN	F	448	7915	5590	4414	975	-193	-1223	C
	ATOM	6195	O	ASN	F	448	31.074	-19.318	-45.229	1.00	48.80		O
45	ANISOU	6195	O	ASN	F	448	8107	5803	4633	1217	-243	-1344	O
	ATOM	6196	N	TRP	F	449	30.404	-17.396	-44.214	1.00	44.74		N
	ANISOU	6196	N	TRP	F	449	7344	5542	4115	923	-220	-1118	N
	ATOM	6197	CA	TRP	F	449	31.462	-16.558	-44.749	1.00	43.75		C
	ANISOU	6197	CA	TRP	F	449	6866	5746	4011	1087	-296	-1130	C
50	ATOM	6198	CB	TRP	F	449	31.109	-15.093	-44.514	1.00	40.74		C
	ANISOU	6198	CB	TRP	F	449	6250	5589	3640	899	-272	-1021	C
	ATOM	6199	CG	TRP	F	449	32.099	-14.109	-45.064	1.00	39.18		C
	ANISOU	6199	CG	TRP	F	449	5708	5720	3459	989	-319	-1021	C
	ATOM	6200	CD1	TRP	F	449	33.122	-13.516	-44.388	1.00	38.41		C
55	ANISOU	6200	CD1	TRP	F	449	5492	5733	3368	1111	-427	-956	C
	ATOM	6201	NE1	TRP	F	449	33.798	-12.649	-45.215	1.00	37.76		N
	ANISOU	6201	NE1	TRP	F	449	5082	5959	3306	1105	-405	-988	N
	ATOM	6202	CE2	TRP	F	449	33.212	-12.668	-46.456	1.00	38.35		C
	ANISOU	6202	CE2	TRP	F	449	5092	6121	3360	997	-290	-1060	C
60	ATOM	6203	CD2	TRP	F	449	32.132	-13.577	-46.398	1.00	38.04		C
	ANISOU	6203	CD2	TRP	F	449	5310	5833	3311	927	-251	-1092	C
	ATOM	6204	CE3	TRP	F	449	31.347	-13.773	-47.545	1.00	37.88		C
	ANISOU	6204	CE3	TRP	F	449	5272	5859	3262	804	-169	-1181	C
	ATOM	6205	CZ3	TRP	F	449	31.668	-13.069	-48.703	1.00	37.87		C



# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6205	CZ3	TRP	F	449	5043	6135	3213	771	-130	-1214	C
	ATOM	6206	CH2	TRP	F	449	32.756	-12.173	-48.731	1.00	37.69		C
	ANISOU	6206	CH2	TRP	F	449	4797	6336	3188	831	-137	-1165	C
	ATOM	6207	CZ2	TRP	F	449	33.536	-11.958	-47.622	1.00	37.45		C
5	ANISOU	6207	CZ2	TRP	F	449	4735	6279	3216	935	-216	-1098	C
	ATOM	6208	C	TRP	F	449	32.844	-16.878	-44.167	1.00	45.96		C
	ANISOU	6208	C	TRP	F	449	7170	6002	4289	1417	-454	-1113	C
	ATOM	6209	O	TRP	F	449	33.846	-16.885	-44.895	1.00	46.57		O
	ANISOU	6209	O	TRP	F	449	7011	6277	4406	1622	-492	-1216	O
10	ATOM	6210	N	GLY	F	450	32.904	-17.119	-42.858	1.00	47.36		N
	ANISOU	6210	N	GLY	F	450	7622	5957	4416	1470	-550	-991	N
	ATOM	6211	CA	GLY	F	450	34.169	-17.491	-42.226	1.00	50.09		C
	ANISOU	6211	CA	GLY	F	450	8014	6263	4756	1812	-756	-972	C
	ATOM	6212	C	GLY	F	450	34.684	-16.523	-41.180	1.00	49.91		C
15	ANISOU	6212	C	GLY	F	450	7895	6373	4695	1820	-896	-845	C
	ATOM	6213	O	GLY	F	450	34.711	-15.310	-41.382	1.00	47.96		O
	ANISOU	6213	O	GLY	F	450	7334	6410	4479	1663	-853	-827	O
	ATOM	6214	N	ILE	F	451	35.112	-17.089	-40.061	1.00	52.64		N
	ANISOU	6214	N	ILE	F	451	8549	6492	4958	2009	-1079	-759	N
20	ATOM	6215	CA	ILE	F	451	35.602	-16.346	-38.912	1.00	53.25		C
	ANISOU	6215	CA	ILE	F	451	8628	6646	4959	2031	-1254	-644	C
	ATOM	6216	CB	ILE	F	451	35.053	-16.971	-37.603	1.00	54.82		C
	ANISOU	6216	CB	ILE	F	451	9395	6461	4973	1996	-1306	-493	C
	ATOM	6217	CG1	ILE	F	451	33.541	-17.196	-37.695	1.00	53.93		C
25	ANISOU	6217	CG1	ILE	F	451	9533	6138	4820	1646	-1016	-464	C
	ATOM	6218	CD1	ILE	F	451	32.730	-15.935	-37.885	1.00	50.90		C
	ANISOU	6218	CD1	ILE	F	451	8876	5986	4479	1312	-825	-462	C
	ATOM	6219	CG2	ILE	F	451	35.374	-16.122	-36.407	1.00	55.21		C
	ANISOU	6219	CG2	ILE	F	451	9489	6589	4899	1957	-1461	-380	C
30	ATOM	6220	C	ILE	F	451	37.132	-16.370	-38.907	1.00	55.90		C
	ANISOU	6220	C	ILE	F	451	8691	7179	5368	2392	-1514	-716	C
	ATOM	6221	O	ILE	F	451	37.752	-17.379	-39.291	1.00	58.65		O
	ANISOU	6221	O	ILE	F	451	9074	7433	5779	2709	-1607	-809	O
	ATOM	6222	N	GLU	F	452	37.737	-15.263	-38.480	1.00	55.67		N
35	ANISOU	6222	N	GLU	F	452	8380	7424	5347	2344	-1628	-694	N
	ATOM	6223	CA	GLU	F	452	39.200	-15.177	-38.353	1.00	58.58		C
	ANISOU	6223	CA	GLU	F	452	8434	8023	5801	2651	-1892	-778	C
	ATOM	6224	CB	GLU	F	452	39.802	-14.454	-39.564	1.00	57.37		C
	ANISOU	6224	CB	GLU	F	452	7708	8270	5820	2597	-1761	-932	C
40	ATOM	6225	CG	GLU	F	452	39.359	-12.995	-39.696	1.00	53.46		C
	ANISOU	6225	CG	GLU	F	452	7007	7989	5316	2209	-1603	-881	C
	ATOM	6226	CD	GLU	F	452	40.063	-12.246	-40.809	1.00	54.15		C
	ANISOU	6226	CD	GLU	F	452	6579	8455	5541	2140	-1483	-1012	C
	ATOM	6227	OE1	GLU	F	452	40.983	-12.807	-41.443	1.00	57.04		O
45	ANISOU	6227	OE1	GLU	F	452	6687	8967	6017	2391	-1514	-1163	O
	ATOM	6228	OE2	GLU	F	452	39.690	-11.080	-41.056	1.00	52.63		O
	ANISOU	6228	OE2	GLU	F	452	6251	8404	5340	1830	-1342	-966	O
	ATOM	6229	C	GLU	F	452	39.607	-14.457	-37.070	1.00	59.73		C
	ANISOU	6229	C	GLU	F	452	8632	8226	5839	2623	-2130	-681	C
50	ATOM	6230	O	GLU	F	452	38.882	-13.574	-36.594	1.00	57.59		O
	ANISOU	6230	O	GLU	F	452	8458	7952	5471	2304	-2021	-587	O
	ATOM	6231	N	AHIS	F	453	40.760	-14.833	-36.519	0.50	63.60		N
	ANISOU	6231	N	AHIS	F	453	9051	8768	6344	2968	-2465	-719	N
	ATOM	6232	N	BHIS	F	453	40.754	-14.846	-36.516	0.50	63.68		N
55	ANISOU	6232	N	BHIS	F	453	9067	8774	6353	2970	-2465	-718	N
	ATOM	6233	CA	AHIS	F	453	41.336	-14.158	-35.351	0.50	65.33		C
	ANISOU	6233	CA	AHIS	F	453	9270	9092	6462	2971	-2752	-662	C
	ATOM	6234	CA	BHIS	F	453	41.340	-14.156	-35.367	0.50	65.46		C
	ANISOU	6234	CA	BHIS	F	453	9280	9111	6481	2971	-2750	-664	C
60	ATOM	6235	CB	AHIS	F	453	42.466	-15.006	-34.739	0.50	70.02		C
	ANISOU	6235	CB	AHIS	F	453	9906	9644	7055	3446	-3172	-693	C
	ATOM	6236	CB	BHIS	F	453	42.520	-14.952	-34.789	0.50	70.22		C
	ANISOU	6236	CB	BHIS	F	453	9888	9698	7095	3444	-3170	-705	C
	ATOM	6237	CG	AHIS	F	453	42.950	-14.519	-33.405	0.50	71.64		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6237	CG AHIS	F 453	10237	9889	7094	3472	-3522	-618	C
	ATOM	6238	CG BHIS	F 453	42.131	-16.251	-34.150	0.50	72.40		C
	ANISOU	6238	CG BHIS	F 453	10795	9514	7199	3687	-3298	-573	C
	ATOM	6239	ND1AHIS	F 453	44.132	-13.826	-33.248	0.50	73.20		N
5	ANISOU	6239	ND1AHIS	F 453	9938	10466	7409	3561	-3786	-748	N
	ATOM	6240	ND1BHIS	F 453	41.800	-16.354	-32.815	0.50	73.75		N
	ANISOU	6240	ND1BHIS	F 453	11506	9424	7089	3657	-3486	-390	N
	ATOM	6241	CE1AHIS	F 453	44.303	-13.532	-31.971	0.50	74.77		C
10	ANISOU	6241	CE1AHIS	F 453	10403	10611	7394	3557	-4093	-655	C
	ATOM	6242	CE1BHIS	F 453	41.511	-17.612	-32.531	0.50	76.18		C
	ANISOU	6242	CE1BHIS	F 453	12349	9316	7280	3883	-3551	-290	C
	ATOM	6243	NE2AHIS	F 453	43.277	-14.013	-31.292	0.50	73.86		N
	ANISOU	6243	NE2AHIS	F 453	10957	10092	7013	3469	-4011	-461	N
	ATOM	6244	NE2BHIS	F 453	41.648	-18.329	-33.632	0.50	76.34		N
15	ANISOU	6244	NE2BHIS	F 453	12183	9314	7510	4069	-3421	-416	N
	ATOM	6245	CD2AHIS	F 453	42.418	-14.639	-32.164	0.50	71.98		C
	ANISOU	6245	CD2AHIS	F 453	10857	9646	6844	3407	-3652	-438	C
	ATOM	6246	CD2BHIS	F 453	42.038	-17.502	-34.658	0.50	73.83		C
20	ANISOU	6246	CD2BHIS	F 453	11192	9429	7433	3954	-3259	-597	C
	ATOM	6247	C AHIS	F 453	41.856	-12.786	-35.785	0.50	64.34		C
	ANISOU	6247	C AHIS	F 453	8588	9388	6470	2743	-2688	-765	C
	ATOM	6248	C BHIS	F 453	41.815	-12.774	-35.816	0.50	64.27		C
	ANISOU	6248	C BHIS	F 453	8581	9378	6462	2731	-2673	-764	C
25	ATOM	6249	O AHIS	F 453	42.515	-12.669	-36.821	0.50	64.49		O
	ANISOU	6249	O AHIS	F 453	8133	9680	6690	2808	-2604	-919	O
	ATOM	6250	O BHIS	F 453	42.409	-12.638	-36.887	0.50	64.21		O
	ANISOU	6250	O BHIS	F 453	8108	9637	6652	2778	-2569	-914	O
	ATOM	6251	N ILE	F 454	41.544	-11.752	-35.009	1.00	63.53		N
30	ANISOU	6251	N ILE	F 454	8571	9322	6247	2459	-2702	-686	N
	ATOM	6252	CA ILE	F 454	41.980	-10.396	-35.349	1.00	63.62		C
	ANISOU	6252	CA ILE	F 454	8126	9678	6370	2202	-2634	-772	C
	ATOM	6253	CB ILE	F 454	40.800	-9.375	-35.410	1.00	59.86		C
	ANISOU	6253	CB ILE	F 454	7791	9130	5822	1781	-2331	-683	C
35	ATOM	6254	CG1 ILE	F 454	40.225	-9.077	-34.026	1.00	59.78		C
	ANISOU	6254	CG1 ILE	F 454	8229	8907	5579	1656	-2428	-563	C
	ATOM	6255	CD1 ILE	F 454	38.978	-8.221	-34.069	1.00	56.89		C
	ANISOU	6255	CD1 ILE	F 454	8015	8437	5162	1302	-2116	-495	C
	ATOM	6256	CG2 ILE	F 454	39.713	-9.882	-36.346	1.00	57.55		C
40	ANISOU	6256	CG2 ILE	F 454	7631	8673	5561	1711	-2013	-646	C
	ATOM	6257	C ILE	F 454	43.171	-9.893	-34.513	1.00	67.95		C
	ANISOU	6257	C ILE	F 454	8445	10453	6920	2290	-2997	-844	C
	ATOM	6258	O ILE	F 454	43.466	-10.413	-33.431	1.00	70.35		O
	ANISOU	6258	O ILE	F 454	9035	10620	7074	2507	-3324	-789	O
45	ATOM	6259	N ASP	F 455	43.850	-8.885	-35.059	1.00	69.56		N
	ANISOU	6259	N ASP	F 455	8140	11002	7287	2108	-2939	-971	N
	ATOM	6260	CA ASP	F 455	45.062	-8.311	-34.481	1.00	74.25		C
	ANISOU	6260	CA ASP	F 455	8389	11882	7940	2136	-3255	-1090	C
	ATOM	6261	CB ASP	F 455	45.985	-7.824	-35.605	1.00	75.13		C
50	ANISOU	6261	CB ASP	F 455	7842	12386	8318	2063	-3120	-1280	C
	ATOM	6262	CG ASP	F 455	46.888	-8.925	-36.144	1.00	78.46		C
	ANISOU	6262	CG ASP	F 455	7952	12945	8915	2492	-3242	-1425	C
	ATOM	6263	OD1 ASP	F 455	47.431	-9.720	-35.339	1.00	82.36		O
	ANISOU	6263	OD1 ASP	F 455	8541	13377	9374	2866	-3625	-1440	O
55	ATOM	6264	OD2 ASP	F 455	47.073	-8.983	-37.376	1.00	77.63		O
	ANISOU	6264	OD2 ASP	F 455	7515	13007	8974	2469	-2960	-1531	O
	ATOM	6265	C ASP	F 455	44.811	-7.167	-33.493	1.00	74.78		C
	ANISOU	6265	C ASP	F 455	8634	11930	7848	1812	-3331	-1036	C
	ATOM	6266	O ASP	F 455	45.644	-6.915	-32.603	1.00	78.03		O
60	ANISOU	6266	O ASP	F 455	8955	12477	8215	1872	-3689	-1103	O
	ATOM	6267	N ASN	F 456	43.670	-6.484	-33.647	1.00	72.42		N
	ANISOU	6267	N ASN	F 456	8584	11465	7468	1486	-3010	-931	N
	ATOM	6268	CA ASN	F 456	43.375	-5.246	-32.898	1.00	72.87		C
	ANISOU	6268	CA ASN	F 456	8779	11502	7406	1147	-3004	-908	C
	ATOM	6269	CB ASN	F 456	43.194	-5.502	-31.383	1.00	74.89		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6269	CB	ASN	F	456	9517	11553	7382	1230	-3287	-830	C
	ATOM	6270	CG	ASN	F	456	41.742	-5.352	-30.921	1.00	73.35		C
	ANISOU	6270	CG	ASN	F	456	9857	11028	6986	1044	-3027	-684	C
	ATOM	6271	OD1	ASN	F	456	40.804	-5.294	-31.734	1.00	71.27		O
5	ANISOU	6271	OD1	ASN	F	456	9614	10661	6803	923	-2671	-632	O
	ATOM	6272	ND2	ASN	F	456	41.555	-5.287	-29.604	1.00	75.14		N
	ANISOU	6272	ND2	ASN	F	456	10508	11099	6942	1020	-3208	-632	N
	ATOM	6273	C	ASN	F	456	44.415	-4.143	-33.156	1.00	74.75		C
	ANISOU	6273	C	ASN	F	456	8515	12082	7807	933	-3067	-1065	C
10	ATOM	6274	O	ASN	F	456	45.187	-3.760	-32.261	1.00	77.82		O
	ANISOU	6274	O	ASN	F	456	8830	12596	8142	912	-3384	-1148	O
	ATOM	6275	N	VAL	F	457	44.445	-3.683	-34.408	1.00	73.51		N
	ANISOU	6275	N	VAL	F	457	8021	12072	7836	767	-2766	-1110	N
	ATOM	6276	CA	VAL	F	457	45.134	-2.453	-34.786	1.00	74.40		C
15	ANISOU	6276	CA	VAL	F	457	7745	12439	8083	443	-2695	-1225	C
	ATOM	6277	CB	VAL	F	457	45.522	-2.397	-36.298	1.00	73.96		C
	ANISOU	6277	CB	VAL	F	457	7258	12607	8237	380	-2410	-1296	C
	ATOM	6278	CG1	VAL	F	457	46.942	-2.910	-36.505	1.00	77.90		C
	ANISOU	6278	CG1	VAL	F	457	7228	13455	8917	586	-2608	-1493	C
20	ATOM	6279	CG2	VAL	F	457	44.528	-3.164	-37.166	1.00	71.21		C
	ANISOU	6279	CG2	VAL	F	457	7123	12070	7862	520	-2146	-1181	C
	ATOM	6280	C	VAL	F	457	44.230	-1.295	-34.377	1.00	72.20		C
	ANISOU	6280	C	VAL	F	457	7797	11953	7683	96	-2535	-1135	C
	ATOM	6281	O	VAL	F	457	43.123	-1.523	-33.872	1.00	69.99		O
25	ANISOU	6281	O	VAL	F	457	7977	11379	7238	134	-2467	-1004	O
	ATOM	6282	N	MSE	F	458	44.696	-0.064	-34.577	1.00	73.06		N
	ANISOU	6282	N	MSE	F	458	7679	12203	7878	-244	-2463	-1216	N
	ATOM	6283	CA	MSE	F	458	44.062	1.090	-33.940	1.00	72.35		C
	ANISOU	6283	CA	MSE	F	458	7904	11914	7672	-546	-2395	-1172	C
30	ATOM	6284	CB	MSE	F	458	44.941	2.335	-34.025	1.00	74.88		C
	ANISOU	6284	CB	MSE	F	458	7928	12422	8101	-907	-2406	-1306	C
	ATOM	6285	CG	MSE	F	458	44.687	3.283	-32.866	1.00	77.18		C
	ANISOU	6285	CG	MSE	F	458	8543	12541	8241	-1133	-2523	-1331	C
	ATOM	6286	SE	MSE	F	458	44.951	5.167	-33.288	0.90	80.31		SE
35	ANISOU	6286	SE	MSE	F	458	8839	12926	8747	-1693	-2306	-1407	SE
	ATOM	6287	CE	MSE	F	458	45.046	5.835	-31.442	1.00	81.22		C
	ANISOU	6287	CE	MSE	F	458	9312	12907	8640	-1838	-2642	-1526	C
	ATOM	6288	C	MSE	F	458	42.672	1.407	-34.465	1.00	66.67		C
	ANISOU	6288	C	MSE	F	458	7502	10919	6910	-636	-2053	-1019	C
40	ATOM	6289	O	MSE	F	458	42.496	1.655	-35.655	1.00	65.37		O
	ANISOU	6289	O	MSE	F	458	7177	10798	6862	-727	-1796	-981	O
	ATOM	6290	N	GLY	F	459	41.699	1.395	-33.554	1.00	63.85		N
	ANISOU	6290	N	GLY	F	459	7594	10290	6378	-606	-2058	-941	N
	ATOM	6291	CA	GLY	F	459	40.324	1.802	-33.851	1.00	58.57		C
45	ANISOU	6291	CA	GLY	F	459	7217	9360	5679	-691	-1761	-826	C
	ATOM	6292	C	GLY	F	459	39.477	0.783	-34.594	1.00	54.89		C
	ANISOU	6292	C	GLY	F	459	6812	8810	5236	-479	-1592	-722	C
	ATOM	6293	O	GLY	F	459	38.386	1.107	-35.066	1.00	52.95		O
	ANISOU	6293	O	GLY	F	459	6711	8400	5008	-543	-1352	-643	O
50	ATOM	6294	N	AMSE	F	460	39.968	-0.449	-34.693	0.50	54.86		N
	ANISOU	6294	N	AMSE	F	460	6699	8908	5236	-220	-1732	-735	N
	ATOM	6295	N	BMSE	F	460	39.971	-0.452	-34.680	0.50	54.79		N
	ANISOU	6295	N	BMSE	F	460	6693	8900	5227	-219	-1735	-736	N
	ATOM	6296	CA	AMSE	F	460	39.261	-1.491	-35.431	0.50	51.87		C
55	ANISOU	6296	CA	AMSE	F	460	6376	8449	4883	-31	-1585	-662	C
	ATOM	6297	CA	BMSE	F	460	39.302	-1.517	-35.430	0.50	51.83		C
	ANISOU	6297	CA	BMSE	F	460	6363	8450	4879	-25	-1593	-665	C
	ATOM	6298	CB	AMSE	F	460	40.169	-2.121	-36.484	0.50	52.65		C
	ANISOU	6298	CB	AMSE	F	460	6093	8789	5123	111	-1605	-728	C
60	ATOM	6299	CB	BMSE	F	460	40.281	-2.170	-36.413	0.50	52.63		C
	ANISOU	6299	CB	BMSE	F	460	6078	8800	5119	127	-1634	-737	C
	ATOM	6300	CG	AMSE	F	460	40.769	-1.118	-37.435	0.50	52.90		C
	ANISOU	6300	CG	AMSE	F	460	5781	9031	5286	-116	-1474	-781	C
	ATOM	6301	CG	BMSE	F	460	40.942	-1.184	-37.354	0.50	52.67		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6301	CG	BMSE	F	460	5723	9028	5261	-97	-1512	-797	C
	ATOM	6302	SE	AMSE	F	460	40.983	-1.865	-39.199	0.45	52.53		SE
	ANISOU	6302	SE	AMSE	F	460	5430	9166	5364	3	-1264	-808	SE
	ATOM	6303	SE	BMSE	F	460	39.627	-0.349	-38.511	0.45	48.23		SE
5	ANISOU	6303	SE	BMSE	F	460	5294	8313	4718	-315	-1143	-673	SE
	ATOM	6304	CE	AMSE	F	460	42.271	-0.575	-39.921	0.50	54.18		C
	ANISOU	6304	CE	AMSE	F	460	5186	9698	5701	-319	-1174	-914	C
	ATOM	6305	CE	BMSE	F	460	40.149	1.530	-38.358	0.50	49.90		C
	ANISOU	6305	CE	BMSE	F	460	5422	8568	4968	-714	-1105	-700	C
10	ATOM	6306	C	AMSE	F	460	38.707	-2.567	-34.517	0.50	51.44		C
	ANISOU	6306	C	AMSE	F	460	6684	8191	4671	169	-1681	-606	C
	ATOM	6307	C	BMSE	F	460	38.711	-2.576	-34.510	0.50	51.37		C
	ANISOU	6307	C	BMSE	F	460	6676	8181	4661	171	-1683	-606	C
	ATOM	6308	O	AMSE	F	460	39.431	-3.139	-33.701	0.50	54.01		O
15	ANISOU	6308	O	AMSE	F	460	7068	8548	4908	330	-1952	-636	O
	ATOM	6309	O	BMSE	F	460	39.417	-3.146	-33.677	0.50	53.95		O
	ANISOU	6309	O	BMSE	F	460	7068	8534	4895	330	-1953	-635	O
	ATOM	6310	N	VAL	F	461	37.413	-2.830	-34.656	1.00	48.69		N
	ANISOU	6310	N	VAL	F	461	6584	7631	4285	151	-1461	-525	N
20	ATOM	6311	CA	VAL	F	461	36.770	-3.939	-33.955	1.00	47.45		C
	ANISOU	6311	CA	VAL	F	461	6786	7259	3984	298	-1478	-464	C
	ATOM	6312	CB	VAL	F	461	35.734	-3.470	-32.897	1.00	47.00		C
	ANISOU	6312	CB	VAL	F	461	7111	6980	3768	144	-1360	-424	C
	ATOM	6313	CG1	VAL	F	461	36.434	-2.715	-31.786	1.00	49.19		C
25	ANISOU	6313	CG1	VAL	F	461	7483	7296	3912	62	-1566	-471	C
	ATOM	6314	CG2	VAL	F	461	34.645	-2.627	-33.519	1.00	44.93		C
	ANISOU	6314	CG2	VAL	F	461	6793	6661	3616	-36	-1068	-416	C
	ATOM	6315	C	VAL	F	461	36.194	-4.970	-34.930	1.00	45.12		C
	ANISOU	6315	C	VAL	F	461	6467	6905	3770	421	-1327	-434	C
30	ATOM	6316	O	VAL	F	461	35.935	-4.679	-36.100	1.00	43.35		O
	ANISOU	6316	O	VAL	F	461	6011	6774	3686	357	-1162	-447	O
	ATOM	6317	N	GLY	F	462	36.044	-6.197	-34.453	1.00	45.10		N
	ANISOU	6317	N	GLY	F	462	6732	6740	3664	596	-1399	-395	N
	ATOM	6318	CA	GLY	F	462	35.452	-7.240	-35.259	1.00	42.67		C
35	ANISOU	6318	CA	GLY	F	462	6463	6335	3417	690	-1260	-382	C
	ATOM	6319	C	GLY	F	462	33.953	-7.209	-35.132	1.00	40.00		C
	ANISOU	6319	C	GLY	F	462	6361	5797	3042	512	-999	-335	C
	ATOM	6320	O	GLY	F	462	33.413	-6.646	-34.174	1.00	40.52		O
	ANISOU	6320	O	GLY	F	462	6646	5756	2995	370	-939	-306	O
40	ATOM	6321	N	VAL	F	463	33.287	-7.800	-36.113	1.00	37.67		N
	ANISOU	6321	N	VAL	F	463	6002	5468	2845	514	-838	-350	N
	ATOM	6322	CA	VAL	F	463	31.848	-8.005	-36.073	1.00	35.82		C
	ANISOU	6322	CA	VAL	F	463	5947	5057	2604	360	-600	-333	C
	ATOM	6323	CB	VAL	F	463	31.095	-7.040	-37.020	1.00	33.67		C
45	ANISOU	6323	CB	VAL	F	463	5405	4907	2481	210	-430	-364	C
	ATOM	6324	CG1	VAL	F	463	31.567	-7.173	-38.489	1.00	32.45		C
	ANISOU	6324	CG1	VAL	F	463	4944	4937	2447	292	-457	-406	C
	ATOM	6325	CG2	VAL	F	463	29.608	-7.232	-36.898	1.00	33.01		C
	ANISOU	6325	CG2	VAL	F	463	5453	4672	2418	63	-204	-375	C
50	ATOM	6326	C	VAL	F	463	31.552	-9.483	-36.370	1.00	36.17		C
	ANISOU	6326	C	VAL	F	463	6172	4936	2636	457	-567	-337	C
	ATOM	6327	O	VAL	F	463	32.101	-10.045	-37.313	1.00	36.03		O
	ANISOU	6327	O	VAL	F	463	5987	5003	2702	603	-633	-384	O
	ATOM	6328	N	LEU	F	464	30.720	-10.110	-35.536	1.00	36.36		N
55	ANISOU	6328	N	LEU	F	464	6560	4711	2543	365	-452	-297	N
	ATOM	6329	CA	LEU	F	464	30.401	-11.533	-35.679	1.00	37.09		C
	ANISOU	6329	CA	LEU	F	464	6903	4585	2604	418	-409	-295	C
	ATOM	6330	CB	LEU	F	464	30.195	-12.174	-34.286	1.00	39.07		C
	ANISOU	6330	CB	LEU	F	464	7666	4549	2628	385	-405	-204	C
60	ATOM	6331	CG	LEU	F	464	31.419	-12.196	-33.354	1.00	40.94		C
	ANISOU	6331	CG	LEU	F	464	8086	4773	2696	599	-705	-130	C
	ATOM	6332	CD1	LEU	F	464	31.091	-12.743	-31.939	1.00	43.14		C
	ANISOU	6332	CD1	LEU	F	464	8942	4755	2695	535	-688	-20	C
	ATOM	6333	CD2	LEU	F	464	32.590	-12.974	-33.978	1.00	41.49		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6333	CD2	LEU	F	464	8040	4887	2837	924	-961	-154	C
	ATOM	6334	C	LEU	F	464	29.185	-11.752	-36.603	1.00	35.79		C
	ANISOU	6334	C	LEU	F	464	6614	4407	2578	242	-171	-368	C
	ATOM	6335	O	LEU	F	464	28.472	-10.801	-36.896	1.00	33.02		O
5	ANISOU	6335	O	LEU	F	464	6037	4188	2322	87	-41	-402	O
	ATOM	6336	N	PRO	F	465	28.971	-12.999	-37.096	1.00	37.43		N
	ANISOU	6336	N	PRO	F	465	6964	4455	2802	278	-137	-405	N
	ATOM	6337	CA	PRO	F	465	27.800	-13.306	-37.943	1.00	37.58		C
	ANISOU	6337	CA	PRO	F	465	6875	4460	2944	89	62	-496	C
10	ATOM	6338	CB	PRO	F	465	27.950	-14.814	-38.211	1.00	39.80		C
	ANISOU	6338	CB	PRO	F	465	7426	4504	3193	175	38	-526	C
	ATOM	6339	CG	PRO	F	465	29.420	-15.040	-38.140	1.00	39.49		C
	ANISOU	6339	CG	PRO	F	465	7412	4494	3099	501	-217	-486	C
	ATOM	6340	CD	PRO	F	465	29.850	-14.180	-36.969	1.00	39.01		C
15	ANISOU	6340	CD	PRO	F	465	7417	4482	2924	517	-307	-380	C
	ATOM	6341	C	PRO	F	465	26.410	-12.985	-37.360	1.00	38.58		C
	ANISOU	6341	C	PRO	F	465	7067	4510	3081	-204	314	-511	C
	ATOM	6342	O	PRO	F	465	25.432	-12.960	-38.117	1.00	38.80		O
	ANISOU	6342	O	PRO	F	465	6890	4606	3248	-359	449	-608	O
20	ATOM	6343	N	ASP	F	466	26.316	-12.749	-36.047	1.00	39.71		N
	ANISOU	6343	N	ASP	F	466	7482	4529	3078	-278	375	-433	N
	ATOM	6344	CA	ASP	F	466	25.076	-12.246	-35.431	1.00	39.99		C
	ANISOU	6344	CA	ASP	F	466	7530	4535	3128	-543	642	-469	C
	ATOM	6345	CB	ASP	F	466	24.733	-13.040	-34.157	1.00	42.38		C
25	ANISOU	6345	CB	ASP	F	466	8343	4540	3221	-688	795	-405	C
	ATOM	6346	CG	ASP	F	466	25.745	-12.838	-33.026	1.00	43.25		C
	ANISOU	6346	CG	ASP	F	466	8774	4573	3086	-539	618	-276	C
	ATOM	6347	OD1	ASP	F	466	26.686	-12.035	-33.161	1.00	40.47		O
	ANISOU	6347	OD1	ASP	F	466	8215	4411	2751	-348	390	-255	O
30	ATOM	6348	OD2	ASP	F	466	25.589	-13.493	-31.976	1.00	46.27		O
	ANISOU	6348	OD2	ASP	F	466	9636	4699	3245	-632	706	-198	O
	ATOM	6349	C	ASP	F	466	25.070	-10.709	-35.183	1.00	38.76		C
	ANISOU	6349	C	ASP	F	466	7126	4585	3017	-543	641	-473	C
	ATOM	6350	O	ASP	F	466	24.221	-10.195	-34.450	1.00	39.42		O
35	ANISOU	6350	O	ASP	F	466	7256	4637	3087	-715	852	-505	O
	ATOM	6351	N	MSE	F	467	26.016	-10.007	-35.819	1.00	37.33		N
	ANISOU	6351	N	MSE	F	467	6690	4601	2894	-358	423	-453	N
	ATOM	6352	CA	MSE	F	467	26.170	-8.534	-35.809	1.00	35.96		C
	ANISOU	6352	CA	MSE	F	467	6277	4607	2779	-345	387	-455	C
40	ATOM	6353	CB	MSE	F	467	24.899	-7.811	-36.252	1.00	35.73		C
	ANISOU	6353	CB	MSE	F	467	5992	4658	2926	-482	577	-541	C
	ATOM	6354	CG	MSE	F	467	24.737	-7.701	-37.761	1.00	34.64		C
	ANISOU	6354	CG	MSE	F	467	5513	4688	2961	-427	503	-584	C
	ATOM	6355	SE	MSE	F	467	26.345	-7.142	-38.729	0.90	36.20		SE
45	ANISOU	6355	SE	MSE	F	467	5518	5088	3149	-218	224	-515	SE
	ATOM	6356	CE	MSE	F	467	26.525	-5.301	-38.059	1.00	32.31		C
	ANISOU	6356	CE	MSE	F	467	4958	4657	2664	-246	217	-475	C
	ATOM	6357	C	MSE	F	467	26.703	-7.992	-34.476	1.00	37.22		C
	ANISOU	6357	C	MSE	F	467	6683	4702	2756	-343	341	-397	C
50	ATOM	6358	O	MSE	F	467	26.687	-6.785	-34.186	1.00	35.87		O
	ANISOU	6358	O	MSE	F	467	6406	4617	2608	-377	355	-413	O
	ATOM	6359	N	THR	F	468	27.215	-8.919	-33.687	1.00	39.05		N
	ANISOU	6359	N	THR	F	468	7274	4768	2795	-291	262	-331	N
	ATOM	6360	CA	THR	F	468	27.716	-8.634	-32.358	1.00	40.94		C
55	ANISOU	6360	CA	THR	F	468	7827	4923	2805	-287	187	-272	C
	ATOM	6361	CB	THR	F	468	27.372	-9.857	-31.476	1.00	43.19		C
	ANISOU	6361	CB	THR	F	468	8602	4931	2878	-353	280	-210	C
	ATOM	6362	OG1	THR	F	468	26.274	-9.513	-30.624	1.00	44.16		O
	ANISOU	6362	OG1	THR	F	468	8907	4957	2915	-594	586	-247	O
60	ATOM	6363	CG2	THR	F	468	28.546	-10.408	-30.685	1.00	46.31		C
	ANISOU	6363	CG2	THR	F	468	9341	5221	3032	-165	-11	-103	C
	ATOM	6364	C	THR	F	468	29.201	-8.251	-32.487	1.00	40.62		C
	ANISOU	6364	C	THR	F	468	7654	5035	2745	-81	-147	-239	C
	ATOM	6365	O	THR	F	468	29.894	-8.776	-33.364	1.00	40.74		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6365	O	THR	F	468	7490	5133	2857	84	-302	-238	O
	ATOM	6366	N	PRO	F	469	29.679	-7.295	-31.671	1.00	41.09		N
	ANISOU	6366	N	PRO	F	469	7766	5150	2694	-102	-242	-236	N
	ATOM	6367	CA	PRO	F	469	31.083	-6.882	-31.768	1.00	41.16		C
5	ANISOU	6367	CA	PRO	F	469	7605	5330	2704	54	-555	-230	C
	ATOM	6368	CB	PRO	F	469	31.077	-5.503	-31.123	1.00	40.81		C
	ANISOU	6368	CB	PRO	F	469	7543	5347	2614	-81	-534	-273	C
	ATOM	6369	CG	PRO	F	469	30.006	-5.598	-30.079	1.00	42.91		C
	ANISOU	6369	CG	PRO	F	469	8187	5411	2707	-237	-295	-271	C
10	ATOM	6370	CD	PRO	F	469	28.964	-6.555	-30.615	1.00	42.09		C
	ANISOU	6370	CD	PRO	F	469	8108	5193	2693	-283	-58	-262	C
	ATOM	6371	C	PRO	F	469	32.038	-7.820	-30.998	1.00	43.78		C
	ANISOU	6371	C	PRO	F	469	8232	5571	2832	239	-831	-163	C
	ATOM	6372	O	PRO	F	469	31.609	-8.515	-30.066	1.00	45.55		O
15	ANISOU	6372	O	PRO	F	469	8901	5569	2839	206	-778	-99	O
	ATOM	6373	N	SER	F	470	33.313	-7.825	-31.394	1.00	43.90		N
	ANISOU	6373	N	SER	F	470	8000	5762	2916	433	-1119	-181	N
	ATOM	6374	CA	SER	F	470	34.346	-8.639	-30.751	1.00	46.64		C
	ANISOU	6374	CA	SER	F	470	8551	6062	3110	671	-1446	-135	C
20	ATOM	6375	CB	SER	F	470	34.315	-10.073	-31.297	1.00	47.59		C
	ANISOU	6375	CB	SER	F	470	8779	6031	3271	863	-1454	-97	C
	ATOM	6376	OG	SER	F	470	35.473	-10.807	-30.918	1.00	49.69		O
	ANISOU	6376	OG	SER	F	470	9140	6283	3454	1168	-1812	-71	O
	ATOM	6377	C	SER	F	470	35.752	-8.045	-30.913	1.00	47.35		C
25	ANISOU	6377	C	SER	F	470	8278	6429	3286	805	-1756	-203	C
	ATOM	6378	O	SER	F	470	36.105	-7.528	-31.963	1.00	45.73		O
	ANISOU	6378	O	SER	F	470	7626	6442	3306	790	-1714	-278	O
	ATOM	6379	N	THR	F	471	36.553	-8.143	-29.862	1.00	50.52		N
	ANISOU	6379	N	THR	F	471	8881	6821	3494	925	-2070	-182	N
30	ATOM	6380	CA	THR	F	471	37.935	-7.704	-29.919	1.00	52.23		C
	ANISOU	6380	CA	THR	F	471	8738	7311	3795	1058	-2399	-268	C
	ATOM	6381	CB	THR	F	471	38.370	-7.063	-28.571	1.00	54.64		C
	ANISOU	6381	CB	THR	F	471	9275	7631	3857	989	-2649	-274	C
	ATOM	6382	OG1	THR	F	471	38.127	-7.985	-27.503	1.00	57.14		O
35	ANISOU	6382	OG1	THR	F	471	10164	7680	3867	1111	-2776	-156	O
	ATOM	6383	CG2	THR	F	471	37.604	-5.758	-28.297	1.00	51.68		C
	ANISOU	6383	CG2	THR	F	471	8940	7250	3448	642	-2391	-311	C
	ATOM	6384	C	THR	F	471	38.872	-8.866	-30.315	1.00	54.76		C
	ANISOU	6384	C	THR	F	471	8937	7670	4198	1425	-2659	-278	C
40	ATOM	6385	O	THR	F	471	40.081	-8.673	-30.459	1.00	56.74		O
	ANISOU	6385	O	THR	F	471	8822	8174	4560	1580	-2936	-374	O
	ATOM	6386	N	GLU	F	472	38.310	-10.061	-30.502	1.00	55.20		N
	ANISOU	6386	N	GLU	F	472	9286	7473	4215	1560	-2559	-198	N
	ATOM	6387	CA	GLU	F	472	39.103	-11.273	-30.764	1.00	58.61		C
45	ANISOU	6387	CA	GLU	F	472	9708	7861	4701	1944	-2804	-203	C
	ATOM	6388	CB	GLU	F	472	38.944	-12.273	-29.615	1.00	61.64		C
	ANISOU	6388	CB	GLU	F	472	10735	7900	4787	2108	-2991	-57	C
	ATOM	6389	CG	GLU	F	472	39.602	-11.834	-28.294	1.00	66.05		C
	ANISOU	6389	CG	GLU	F	472	11497	8504	5096	2156	-3355	-23	C
50	ATOM	6390	CD	GLU	F	472	39.044	-12.577	-27.088	1.00	68.99		C
	ANISOU	6390	CD	GLU	F	472	12632	8493	5089	2173	-3414	155	C
	ATOM	6391	OE1	GLU	F	472	39.536	-12.355	-25.958	1.00	74.88		O
	ANISOU	6391	OE1	GLU	F	472	13642	9238	5571	2229	-3734	199	O
	ATOM	6392	OE2	GLU	F	472	38.110	-13.393	-27.270	1.00	70.96		O
55	ANISOU	6392	OE2	GLU	F	472	13234	8438	5289	2110	-3138	248	O
	ATOM	6393	C	GLU	F	472	38.814	-11.965	-32.106	1.00	56.75		C
	ANISOU	6393	C	GLU	F	472	9268	7606	4689	2022	-2575	-253	C
	ATOM	6394	O	GLU	F	472	39.740	-12.338	-32.826	0.50	57.96		O
	ANISOU	6394	O	GLU	F	472	9067	7930	5026	2279	-2713	-356	O
60	ATOM	6395	N	AMSE	F	473	37.538	-12.106	-32.442	0.50	54.05		N
	ANISOU	6395	N	AMSE	F	473	9129	7077	4333	1792	-2225	-203	N
	ATOM	6396	N	BMSE	F	473	37.527	-12.152	-32.413	0.50	54.67		N
	ANISOU	6396	N	BMSE	F	473	9227	7140	4403	1798	-2228	-198	N
	ATOM	6397	CA	AMSE	F	473	37.154	-12.767	-33.686	0.50	52.38		C

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6397	CA	AMSE	F	473	8771	6831	4299	1830	-2013	-259	C
	ATOM	6398	CA	BMSE	F	473	37.061	-12.837	-33.638	0.50	53.57		C
	ANISOU	6398	CA	BMSE	F	473	8970	6950	4436	1823	-2000	-249	C
	ATOM	6399	CB	AMSE	F	473	36.349	-14.042	-33.398	0.50	53.56		C
5	ANISOU	6399	CB	AMSE	F	473	9451	6579	4320	1866	-1917	-167	C
	ATOM	6400	CB	BMSE	F	473	36.126	-14.020	-33.278	0.50	54.56		C
	ANISOU	6400	CB	BMSE	F	473	9648	6665	4417	1812	-1876	-149	C
	ATOM	6401	CG	AMSE	F	473	37.019	-15.032	-32.430	0.50	57.16		C
10	ANISOU	6401	CG	AMSE	F	473	10331	6794	4594	2182	-2241	-77	C
	ATOM	6402	CG	BMSE	F	473	36.799	-15.413	-33.076	0.50	59.08		C
	ANISOU	6402	CG	BMSE	F	473	10512	7000	4934	2193	-2125	-118	C
	ATOM	6403	SE	AMSE	F	473	38.682	-15.802	-33.103	0.45	58.91		SE
	ANISOU	6403	SE	AMSE	F	473	10192	7173	5018	2733	-2611	-206	SE
	ATOM	6404	SE	BMSE	F	473	35.701	-16.903	-32.302	0.45	62.74		SE
15	ANISOU	6404	SE	BMSE	F	473	11838	6858	5142	2138	-1994	50	SE
	ATOM	6405	CE	AMSE	F	473	37.985	-17.029	-34.440	0.50	58.03		C
	ANISOU	6405	CE	AMSE	F	473	10158	6829	5063	2774	-2311	-279	C
	ATOM	6406	CE	BMSE	F	473	34.039	-16.732	-33.323	0.50	58.44		C
20	ANISOU	6406	CE	BMSE	F	473	11168	6293	4743	1680	-1460	-22	C
	ATOM	6407	C	AMSE	F	473	36.353	-11.826	-34.583	0.50	48.62		C
	ANISOU	6407	C	AMSE	F	473	7996	6515	3962	1519	-1691	-310	C
	ATOM	6408	C	BMSE	F	473	36.326	-11.854	-34.571	0.50	49.21		C
	ANISOU	6408	C	BMSE	F	473	8085	6580	4033	1518	-1688	-307	C
25	ATOM	6409	O	AMSE	F	473	35.756	-10.854	-34.118	0.50	46.99		O
	ANISOU	6409	O	AMSE	F	473	7827	6334	3694	1260	-1572	-275	O
	ATOM	6410	O	BMSE	F	473	35.750	-10.866	-34.112	0.50	47.60		O
	ANISOU	6410	O	BMSE	F	473	7908	6407	3769	1261	-1572	-274	O
	ATOM	6411	N	SER	F	474	36.355	-12.116	-35.876	1.00	47.59		N
30	ANISOU	6411	N	SER	F	474	7586	6486	4008	1564	-1563	-398	N
	ATOM	6412	CA	SER	F	474	35.584	-11.319	-36.852	1.00	44.33		C
	ANISOU	6412	CA	SER	F	474	6917	6214	3712	1304	-1290	-437	C
	ATOM	6413	CB	SER	F	474	36.392	-10.097	-37.301	1.00	43.46		C
	ANISOU	6413	CB	SER	F	474	6360	6443	3709	1243	-1335	-499	C
35	ATOM	6414	OG	SER	F	474	35.624	-9.222	-38.089	1.00	39.78		O
	ANISOU	6414	OG	SER	F	474	5726	6072	3317	997	-1104	-503	O
	ATOM	6415	C	SER	F	474	35.225	-12.160	-38.070	1.00	43.77		C
	ANISOU	6415	C	SER	F	474	6781	6105	3745	1359	-1143	-510	C
	ATOM	6416	O	SER	F	474	35.885	-13.164	-38.345	1.00	45.97		O
40	ANISOU	6416	O	SER	F	474	7084	6329	4052	1623	-1256	-566	O
	ATOM	6417	N	MSE	F	475	34.196	-11.754	-38.806	1.00	41.25		N
	ANISOU	6417	N	MSE	F	475	6380	5813	3480	1127	-909	-523	N
	ATOM	6418	CA	MSE	F	475	34.003	-12.291	-40.149	1.00	40.97		C
	ANISOU	6418	CA	MSE	F	475	6197	5831	3539	1157	-792	-619	C
45	ATOM	6419	CB	MSE	F	475	32.693	-11.806	-40.771	1.00	38.57		C
	ANISOU	6419	CB	MSE	F	475	5849	5536	3270	888	-576	-618	C
	ATOM	6420	CG	MSE	F	475	31.457	-12.502	-40.205	1.00	38.53		C
	ANISOU	6420	CG	MSE	F	475	6187	5241	3212	749	-456	-585	C
	ATOM	6421	SE	MSE	F	475	29.784	-11.880	-40.999	0.90	37.77		SE
50	ANISOU	6421	SE	MSE	F	475	5943	5203	3204	437	-222	-623	SE
	ATOM	6422	CE	MSE	F	475	29.784	-10.021	-40.369	1.00	34.50		C
	ANISOU	6422	CE	MSE	F	475	5347	4962	2799	318	-223	-536	C
	ATOM	6423	C	MSE	F	475	35.210	-11.913	-41.018	1.00	41.26		C
	ANISOU	6423	C	MSE	F	475	5836	6174	3668	1296	-861	-711	C
55	ATOM	6424	O	MSE	F	475	35.709	-10.786	-40.947	1.00	40.52		O
	ANISOU	6424	O	MSE	F	475	5499	6296	3600	1209	-892	-694	O
	ATOM	6425	N	ARG	F	476	35.662	-12.871	-41.825	1.00	42.54		N
	ANISOU	6425	N	ARG	F	476	5947	6338	3877	1494	-862	-821	N
	ATOM	6426	CA	ARG	F	476	36.908	-12.783	-42.592	1.00	43.25		C
60	ANISOU	6426	CA	ARG	F	476	5676	6704	4054	1670	-906	-942	C
	ATOM	6427	CB	ARG	F	476	37.047	-14.035	-43.462	1.00	44.93		C
	ANISOU	6427	CB	ARG	F	476	5941	6831	4299	1877	-855	-1078	C
	ATOM	6428	CG	ARG	F	476	38.089	-13.966	-44.568	1.00	47.16		C
	ANISOU	6428	CG	ARG	F	476	5839	7416	4664	2010	-797	-1241	C
	ATOM	6429	CD	ARG	F	476	38.138	-15.267	-45.379	1.00	48.80		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6429	CD	ARG	F	476	6156	7498	4889	2224	-733	-1397	C
	ATOM	6430	NE	ARG	F	476	36.829	-15.772	-45.815	1.00	48.30		N
	ANISOU	6430	NE	ARG	F	476	6394	7206	4752	2046	-602	-1383	N
	ATOM	6431	CZ	ARG	F	476	36.126	-15.297	-46.843	1.00	47.93		C
5	ANISOU	6431	CZ	ARG	F	476	6261	7289	4660	1803	-431	-1409	C
	ATOM	6432	NH1	ARG	F	476	36.574	-14.273	-47.565	1.00	48.79		N
	ANISOU	6432	NH1	ARG	F	476	6042	7730	4765	1693	-345	-1425	N
	ATOM	6433	NH2	ARG	F	476	34.962	-15.848	-47.154	1.00	46.79		N
	ANISOU	6433	NH2	ARG	F	476	6372	6939	4466	1657	-353	-1419	N
10	ATOM	6434	C	ARG	F	476	37.030	-11.498	-43.416	1.00	41.10		C
	ANISOU	6434	C	ARG	F	476	5060	6740	3817	1453	-777	-953	C
	ATOM	6435	O	ARG	F	476	36.182	-11.199	-44.258	1.00	39.12		O
	ANISOU	6435	O	ARG	F	476	4810	6511	3545	1266	-612	-945	O
	ATOM	6436	N	GLY	F	477	38.082	-10.733	-43.140	1.00	41.43		N
15	ANISOU	6436	N	GLY	F	477	4825	7009	3906	1471	-870	-969	N
	ATOM	6437	CA	GLY	F	477	38.354	-9.486	-43.850	1.00	40.53		C
	ANISOU	6437	CA	GLY	F	477	4413	7168	3820	1250	-748	-972	C
	ATOM	6438	C	GLY	F	477	37.457	-8.303	-43.526	1.00	37.97		C
	ANISOU	6438	C	GLY	F	477	4192	6789	3447	958	-686	-834	C
20	ATOM	6439	O	GLY	F	477	37.588	-7.235	-44.118	1.00	37.40		O
	ANISOU	6439	O	GLY	F	477	3939	6888	3383	765	-584	-814	O
	ATOM	6440	N	ILE	F	478	36.549	-8.489	-42.574	1.00	37.64		N
	ANISOU	6440	N	ILE	F	478	4456	6494	3350	927	-734	-743	N
	ATOM	6441	CA	ILE	F	478	35.552	-7.457	-42.189	1.00	35.63		C
25	ANISOU	6441	CA	ILE	F	478	4320	6155	3064	685	-661	-635	C
	ATOM	6442	CB	ILE	F	478	34.126	-8.080	-42.125	1.00	34.02		C
	ANISOU	6442	CB	ILE	F	478	4389	5711	2826	640	-565	-600	C
	ATOM	6443	CG1	ILE	F	478	33.806	-8.827	-43.435	1.00	33.55		C
	ANISOU	6443	CG1	ILE	F	478	4276	5687	2784	683	-466	-676	C
30	ATOM	6444	CD1	ILE	F	478	33.521	-7.945	-44.656	1.00	30.29		C
	ANISOU	6444	CD1	ILE	F	478	3677	5452	2378	537	-355	-670	C
	ATOM	6445	CG2	ILE	F	478	33.074	-7.027	-41.766	1.00	33.10		C
	ANISOU	6445	CG2	ILE	F	478	4345	5524	2706	427	-477	-518	C
	ATOM	6446	C	ILE	F	478	35.903	-6.782	-40.854	1.00	36.01		C
35	ANISOU	6446	C	ILE	F	478	4438	6165	3079	636	-794	-583	C
	ATOM	6447	O	ILE	F	478	35.986	-7.446	-39.812	1.00	37.11		O
	ANISOU	6447	O	ILE	F	478	4791	6153	3155	758	-925	-568	O
	ATOM	6448	N	ARG	F	479	36.123	-5.467	-40.889	1.00	35.61		N
	ANISOU	6448	N	ARG	F	479	4243	6236	3052	452	-766	-558	N
40	ATOM	6449	CA	ARG	F	479	36.358	-4.678	-39.648	1.00	35.25		C
	ANISOU	6449	CA	ARG	F	479	4285	6146	2962	361	-880	-526	C
	ATOM	6450	CB	ARG	F	479	37.771	-4.102	-39.604	1.00	37.00		C
	ANISOU	6450	CB	ARG	F	479	4220	6604	3234	340	-1006	-596	C
	ATOM	6451	CG	ARG	F	479	38.905	-5.105	-39.660	1.00	39.51		C
45	ANISOU	6451	CG	ARG	F	479	4354	7064	3594	589	-1165	-694	C
	ATOM	6452	CD	ARG	F	479	38.890	-6.113	-38.506	1.00	39.37		C
	ANISOU	6452	CD	ARG	F	479	4610	6863	3485	811	-1371	-676	C
	ATOM	6453	NE	ARG	F	479	39.992	-7.062	-38.667	1.00	43.02		N
	ANISOU	6453	NE	ARG	F	479	4879	7454	4013	1100	-1539	-778	N
50	ATOM	6454	CZ	ARG	F	479	39.943	-8.180	-39.394	1.00	42.54		C
	ANISOU	6454	CZ	ARG	F	479	4821	7349	3992	1310	-1482	-822	C
	ATOM	6455	NH1	ARG	F	479	38.836	-8.535	-40.045	1.00	39.17		N
	ANISOU	6455	NH1	ARG	F	479	4582	6764	3539	1240	-1271	-774	N
	ATOM	6456	NH2	ARG	F	479	41.014	-8.951	-39.460	1.00	44.32		N
55	ANISOU	6456	NH2	ARG	F	479	4855	7691	4295	1600	-1648	-933	N
	ATOM	6457	C	ARG	F	479	35.379	-3.518	-39.523	1.00	33.52		C
	ANISOU	6457	C	ARG	F	479	4176	5824	2735	141	-749	-457	C
	ATOM	6458	O	ARG	F	479	34.960	-2.946	-40.533	1.00	33.11		O
	ANISOU	6458	O	ARG	F	479	4023	5824	2735	39	-613	-431	O
60	ATOM	6459	N	VAL	F	480	35.010	-3.170	-38.293	1.00	33.05		N
	ANISOU	6459	N	VAL	F	480	4342	5614	2601	83	-794	-431	N
	ATOM	6460	CA	VAL	F	480	34.211	-1.973	-38.054	1.00	31.67		C
	ANISOU	6460	CA	VAL	F	480	4261	5340	2433	-100	-679	-394	C
	ATOM	6461	CB	VAL	F	480	32.975	-2.270	-37.150	1.00	31.19		C



## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6461	CB	VAL	F	480	4503	5047	2302	-107	-586	-373	C
	ATOM	6462	CG1	VAL	F	480	32.299	-0.976	-36.650	1.00	29.99		C
	ANISOU	6462	CG1	VAL	F	480	4449	4788	2157	-263	-483	-369	C
	ATOM	6463	CG2	VAL	F	480	31.966	-3.168	-37.871	1.00	30.56		C
5	ANISOU	6463	CG2	VAL	F	480	4439	4902	2268	-46	-452	-362	C
	ATOM	6464	C	VAL	F	480	35.128	-0.915	-37.429	1.00	32.95		C
	ANISOU	6464	C	VAL	F	480	4368	5575	2578	-225	-792	-424	C
	ATOM	6465	O	VAL	F	480	35.745	-1.151	-36.395	1.00	34.11		O
	ANISOU	6465	O	VAL	F	480	4604	5721	2637	-182	-961	-460	O
10	ATOM	6466	N	SER	F	481	35.233	0.241	-38.068	1.00	33.25		N
	ANISOU	6466	N	SER	F	481	4278	5667	2688	-388	-713	-411	N
	ATOM	6467	CA	SER	F	481	36.017	1.336	-37.502	1.00	35.24		C
	ANISOU	6467	CA	SER	F	481	4499	5958	2933	-559	-797	-452	C
	ATOM	6468	CB	SER	F	481	36.437	2.355	-38.572	1.00	35.71		C
15	ANISOU	6468	CB	SER	F	481	4370	6117	3082	-738	-702	-431	C
	ATOM	6469	OG	SER	F	481	37.145	3.457	-37.988	1.00	38.65		O
	ANISOU	6469	OG	SER	F	481	4738	6495	3454	-948	-769	-482	O
	ATOM	6470	C	SER	F	481	35.306	2.040	-36.341	1.00	35.43		C
20	ANISOU	6470	C	SER	F	481	4816	5766	2882	-645	-777	-459	C
	ATOM	6471	O	SER	F	481	34.117	2.366	-36.409	1.00	34.16		O
	ANISOU	6471	O	SER	F	481	4805	5434	2740	-653	-618	-419	O
	ATOM	6472	N	LYS	F	482	36.073	2.261	-35.283	1.00	37.40		N
	ANISOU	6472	N	LYS	F	482	5126	6040	3045	-702	-948	-528	N
	ATOM	6473	CA	LYS	F	482	35.676	3.070	-34.149	1.00	38.68		C
25	ANISOU	6473	CA	LYS	F	482	5562	6025	3110	-819	-945	-569	C
	ATOM	6474	CB	LYS	F	482	36.268	2.482	-32.863	1.00	40.92		C
	ANISOU	6474	CB	LYS	F	482	5998	6331	3219	-756	-1171	-627	C
	ATOM	6475	CG	LYS	F	482	35.631	1.192	-32.366	1.00	43.46		C
30	ANISOU	6475	CG	LYS	F	482	6540	6556	3418	-560	-1164	-577	C
	ATOM	6476	CD	LYS	F	482	34.408	1.466	-31.467	1.00	47.95		C
	ANISOU	6476	CD	LYS	F	482	7475	6881	3862	-619	-984	-579	C
	ATOM	6477	CE	LYS	F	482	33.121	1.568	-32.297	1.00	47.40		C
	ANISOU	6477	CE	LYS	F	482	7363	6708	3938	-612	-696	-534	C
	ATOM	6478	NZ	LYS	F	482	32.024	2.121	-31.458	1.00	48.36		N
35	ANISOU	6478	NZ	LYS	F	482	7761	6627	3987	-690	-499	-580	N
	ATOM	6479	C	LYS	F	482	36.172	4.524	-34.290	1.00	39.57		C
	ANISOU	6479	C	LYS	F	482	5613	6135	3288	-1061	-935	-613	C
	ATOM	6480	O	LYS	F	482	35.963	5.337	-33.378	1.00	40.79		O
40	ANISOU	6480	O	LYS	F	482	5995	6137	3367	-1181	-937	-673	O
	ATOM	6481	N	MSE	F	483	36.839	4.848	-35.404	1.00	38.62		N
	ANISOU	6481	N	MSE	F	483	5216	6167	3290	-1150	-910	-591	N
	ATOM	6482	CA	MSE	F	483	37.361	6.208	-35.607	1.00	39.11		C
	ANISOU	6482	CA	MSE	F	483	5242	6208	3412	-1419	-881	-623	C
	ATOM	6483	CB	MSE	F	483	38.321	6.273	-36.805	1.00	39.75		C
45	ANISOU	6483	CB	MSE	F	483	4987	6519	3599	-1525	-853	-609	C
	ATOM	6484	CG	MSE	F	483	39.626	5.497	-36.598	1.00	41.96		C
	ANISOU	6484	CG	MSE	F	483	4958	7098	3887	-1482	-1052	-714	C
	ATOM	6485	SE	MSE	F	483	40.539	5.770	-34.876	0.90	50.05		SE
50	ANISOU	6485	SE	MSE	F	483	6036	8169	4812	-1584	-1372	-884	SE
	ATOM	6486	CE	MSE	F	483	41.373	7.511	-35.168	1.00	48.50		C
	ANISOU	6486	CE	MSE	F	483	5726	7986	4714	-2058	-1303	-969	C
	ATOM	6487	C	MSE	F	483	36.227	7.226	-35.749	1.00	37.49		C
	ANISOU	6487	C	MSE	F	483	5289	5719	3238	-1481	-693	-566	C
	ATOM	6488	O	MSE	F	483	35.094	6.823	-36.053	1.00	35.28		O
55	ANISOU	6488	O	MSE	F	483	5099	5332	2975	-1307	-572	-494	O
	ATOM	6489	OXT	MSE	F	483	36.389	8.431	-35.532	1.00	37.47		O
	ANISOU	6489	OXT	MSE	F	483	5406	5580	3252	-1689	-668	-602	O
	ATOM	6490	O2G	MGT	A	1	48.431	21.314	-32.822	1.00	51.34		O
	ANISOU	6490	O2G	MGT	A	1	5580	7344	6582	-151	662	268	O
60	ATOM	6491	PG	MGT	A	1	47.642	21.644	-31.468	1.00	49.83		P
	ANISOU	6491	PG	MGT	A	1	5455	6960	6518	-139	518	275	P
	ATOM	6492	O3G	MGT	A	1	46.906	20.295	-30.960	1.00	45.91		O
	ANISOU	6492	O3G	MGT	A	1	5042	6412	5989	23	408	176	O
	ATOM	6493	O1G	MGT	A	1	48.607	22.186	-30.469	1.00	50.23		O

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6493	O1G	MGT	A	1	5363	7007	6715	-196	508	226	O
	ATOM	6494	O3B	MGT	A	1	46.392	22.571	-31.946	1.00	49.90		O
	ANISOU	6494	O3B	MGT	A	1	5618	6851	6491	-212	497	434	O
	ATOM	6495	PB	MGT	A	1	46.500	23.966	-32.785	1.00	50.34		P
5	ANISOU	6495	PB	MGT	A	1	5693	6896	6537	-368	593	604	P
	ATOM	6496	O2B	MGT	A	1	46.307	23.569	-34.337	1.00	50.62		O
	ANISOU	6496	O2B	MGT	A	1	5793	7073	6368	-354	675	667	O
	ATOM	6497	O1B	MGT	A	1	47.806	24.652	-32.528	1.00	51.47		O
	ANISOU	6497	O1B	MGT	A	1	5686	7087	6785	-486	681	592	O
10	ATOM	6498	O3A	MGT	A	1	45.229	24.838	-32.232	1.00	49.00		O
	ANISOU	6498	O3A	MGT	A	1	5651	6519	6447	-386	490	701	O
	ATOM	6499	PA	MGT	A	1	43.722	24.280	-31.756	1.00	44.78		P
	ANISOU	6499	PA	MGT	A	1	5239	5880	5896	-269	352	675	P
	ATOM	6500	O2A	MGT	A	1	43.564	22.796	-32.345	1.00	45.17		O
15	ANISOU	6500	O2A	MGT	A	1	5307	6056	5798	-157	346	583	O
	ATOM	6501	O1A	MGT	A	1	42.713	25.256	-32.229	1.00	46.58		O
	ANISOU	6501	O1A	MGT	A	1	5577	6005	6118	-305	327	828	O
	ATOM	6502	O5*	MGT	A	1	43.626	24.206	-30.136	1.00	42.80		O
	ANISOU	6502	O5*	MGT	A	1	4955	5516	5792	-234	258	568	O
20	ATOM	6503	C5*	MGT	A	1	43.771	25.451	-29.389	1.00	38.57		C
	ANISOU	6503	C5*	MGT	A	1	4398	4855	5403	-327	250	603	C
	ATOM	6504	C4*	MGT	A	1	44.860	25.368	-28.297	1.00	34.92		C
	ANISOU	6504	C4*	MGT	A	1	3808	4419	5042	-349	242	478	C
	ATOM	6505	O4*	MGT	A	1	44.641	24.152	-27.533	1.00	33.27		O
25	ANISOU	6505	O4*	MGT	A	1	3599	4240	4800	-224	161	362	O
	ATOM	6506	C3*	MGT	A	1	46.295	25.288	-28.821	1.00	34.19		C
	ANISOU	6506	C3*	MGT	A	1	3578	4475	4937	-411	343	453	C
	ATOM	6507	O3*	MGT	A	1	47.120	26.048	-27.945	1.00	35.75		O
	ANISOU	6507	O3*	MGT	A	1	3669	4640	5274	-506	342	399	O
30	ATOM	6508	C2*	MGT	A	1	46.671	23.831	-28.682	1.00	33.94		C
	ANISOU	6508	C2*	MGT	A	1	3496	4568	4833	-279	318	333	C
	ATOM	6509	O2*	MGT	A	1	48.079	23.737	-28.438	1.00	37.14		O
	ANISOU	6509	O2*	MGT	A	1	3729	5093	5289	-308	364	248	O
	ATOM	6510	C1*	MGT	A	1	45.936	23.471	-27.403	1.00	30.89		C
35	ANISOU	6510	C1*	MGT	A	1	3166	4076	4495	-198	191	266	C
	ATOM	6511	N9	MGT	A	1	45.522	22.046	-27.080	1.00	29.66		N
	ANISOU	6511	N9	MGT	A	1	3059	3943	4269	-51	124	187	N
	ATOM	6512	C8	MGT	A	1	44.505	21.434	-27.715	1.00	27.88		C
	ANISOU	6512	C8	MGT	A	1	2948	3695	3949	8	112	221	C
40	ATOM	6513	N7	MGT	A	1	44.411	20.228	-27.155	1.00	27.01		N
	ANISOU	6513	N7	MGT	A	1	2858	3589	3815	120	53	134	N
	ATOM	6514	CM7	MGT	A	1	43.375	19.249	-27.561	1.00	25.30		C
	ANISOU	6514	CM7	MGT	A	1	2758	3341	3512	194	23	127	C
	ATOM	6515	C5	MGT	A	1	45.336	20.071	-26.191	1.00	27.24		C
45	ANISOU	6515	C5	MGT	A	1	2792	3648	3910	147	21	59	C
	ATOM	6516	C4	MGT	A	1	46.053	21.249	-26.149	1.00	27.82		C
	ANISOU	6516	C4	MGT	A	1	2769	3743	4059	34	64	84	C
	ATOM	6517	N3	MGT	A	1	47.061	21.426	-25.271	1.00	27.51		N
	ANISOU	6517	N3	MGT	A	1	2607	3751	4096	24	36	11	N
50	ATOM	6518	C2	MGT	A	1	47.423	20.471	-24.405	1.00	28.78		C
	ANISOU	6518	C2	MGT	A	1	2738	3945	4254	139	-41	-75	C
	ATOM	6519	N2	MGT	A	1	48.443	20.701	-23.575	1.00	29.71		N
	ANISOU	6519	N2	MGT	A	1	2722	4129	4439	129	-80	-146	N
	ATOM	6520	N1	MGT	A	1	46.712	19.246	-24.380	1.00	27.51		N
55	ANISOU	6520	N1	MGT	A	1	2690	3743	4019	264	-84	-86	N
	ATOM	6521	C6	MGT	A	1	45.678	19.057	-25.295	1.00	26.68		C
	ANISOU	6521	C6	MGT	A	1	2705	3587	3846	258	-48	-26	C
	ATOM	6522	O6	MGT	A	1	45.070	17.997	-25.311	1.00	27.25		O
	ANISOU	6522	O6	MGT	A	1	2870	3620	3863	348	-80	-46	O
60	ATOM	6523	O2G	MGT	B	1	8.911	7.379	-30.815	1.00	52.96		O
	ANISOU	6523	O2G	MGT	B	1	6523	7405	6194	480	-1101	341	O
	ATOM	6524	PG	MGT	B	1	8.686	7.207	-29.221	1.00	49.79		P
	ANISOU	6524	PG	MGT	B	1	5992	6928	5999	504	-1012	247	P
	ATOM	6525	O3G	MGT	B	1	10.111	6.727	-28.566	1.00	47.34		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6525	O3G	MGT	B	1	5764	6484	5738	339	-851	158	O
	ATOM	6526	O1G	MGT	B	1	8.184	8.475	-28.631	1.00	50.87		O
	ANISOU	6526	O1G	MGT	B	1	6159	6948	6223	702	-1015	339	O
	ATOM	6527	O3B	MGT	B	1	7.735	5.911	-29.048	1.00	49.75		O
5	ANISOU	6527	O3B	MGT	B	1	5755	7120	6027	437	-1075	126	O
	ATOM	6528	PB	MGT	B	1	6.305	5.749	-29.792	1.00	51.97		P
	ANISOU	6528	PB	MGT	B	1	5864	7633	6251	512	-1261	156	P
	ATOM	6529	O2B	MGT	B	1	6.621	5.123	-31.256	1.00	52.42		O
	ANISOU	6529	O2B	MGT	B	1	6011	7805	6099	381	-1353	144	O
10	ATOM	6530	O1B	MGT	B	1	5.596	7.053	-29.893	1.00	53.94		O
	ANISOU	6530	O1B	MGT	B	1	6111	7869	6514	750	-1339	301	O
	ATOM	6531	O3A	MGT	B	1	5.465	4.683	-28.886	1.00	50.43		O
	ANISOU	6531	O3A	MGT	B	1	5422	7553	6185	435	-1246	27	O
	ATOM	6532	PA	MGT	B	1	5.986	3.318	-28.093	1.00	45.51		P
15	ANISOU	6532	PA	MGT	B	1	4771	6888	5634	227	-1122	-129	P
	ATOM	6533	O2A	MGT	B	1	7.298	2.764	-28.782	1.00	43.17		O
	ANISOU	6533	O2A	MGT	B	1	4672	6508	5222	84	-1068	-175	O
	ATOM	6534	O1A	MGT	B	1	4.876	2.329	-28.139	1.00	43.87		O
	ANISOU	6534	O1A	MGT	B	1	4348	6870	5450	131	-1206	-207	O
20	ATOM	6535	O5*	MGT	B	1	6.408	3.771	-26.568	1.00	42.04		O
	ANISOU	6535	O5*	MGT	B	1	4356	6273	5345	294	-960	-138	O
	ATOM	6536	C5*	MGT	B	1	5.376	4.024	-25.569	1.00	40.75		C
	ANISOU	6536	C5*	MGT	B	1	4018	6158	5306	403	-935	-137	C
	ATOM	6537	C4*	MGT	B	1	5.580	5.362	-24.810	1.00	38.17		C
25	ANISOU	6537	C4*	MGT	B	1	3791	5670	5043	591	-859	-67	C
	ATOM	6538	O4*	MGT	B	1	6.866	5.317	-24.120	1.00	33.12		O
	ANISOU	6538	O4*	MGT	B	1	3324	4841	4420	503	-736	-111	O
	ATOM	6539	C3*	MGT	B	1	5.606	6.610	-25.719	1.00	38.56		C
	ANISOU	6539	C3*	MGT	B	1	3962	5672	5018	750	-947	64	C
30	ATOM	6540	O3*	MGT	B	1	4.951	7.705	-25.060	1.00	39.09		O
	ANISOU	6540	O3*	MGT	B	1	4007	5678	5169	978	-922	122	O
	ATOM	6541	C2*	MGT	B	1	7.108	6.900	-25.892	1.00	36.08		C
	ANISOU	6541	C2*	MGT	B	1	3897	5166	4648	655	-875	76	C
	ATOM	6542	O2*	MGT	B	1	7.314	8.312	-26.089	1.00	40.76		O
35	ANISOU	6542	O2*	MGT	B	1	4655	5608	5223	807	-882	193	O
	ATOM	6543	C1*	MGT	B	1	7.650	6.495	-24.540	1.00	30.98		C
	ANISOU	6543	C1*	MGT	B	1	3257	4415	4100	578	-738	-22	C
	ATOM	6544	N9	MGT	B	1	9.078	6.082	-24.348	1.00	28.02		N
	ANISOU	6544	N9	MGT	B	1	3017	3924	3707	418	-654	-71	N
40	ATOM	6545	C8	MGT	B	1	9.633	4.953	-24.839	1.00	26.32		C
	ANISOU	6545	C8	MGT	B	1	2789	3772	3439	259	-650	-132	C
	ATOM	6546	N7	MGT	B	1	10.913	4.962	-24.399	1.00	26.18		N
	ANISOU	6546	N7	MGT	B	1	2885	3627	3435	179	-562	-155	N
	ATOM	6547	CM7	MGT	B	1	11.908	3.911	-24.712	1.00	23.88		C
45	ANISOU	6547	CM7	MGT	B	1	2618	3350	3106	33	-517	-218	C
	ATOM	6548	C5	MGT	B	1	11.150	6.053	-23.649	1.00	26.92		C
	ANISOU	6548	C5	MGT	B	1	3066	3581	3583	257	-521	-117	C
	ATOM	6549	C4	MGT	B	1	9.951	6.759	-23.616	1.00	26.32		C
	ANISOU	6549	C4	MGT	B	1	2937	3533	3529	418	-573	-67	C
50	ATOM	6550	N3	MGT	B	1	9.832	7.907	-22.934	1.00	26.49		N
	ANISOU	6550	N3	MGT	B	1	3046	3417	3601	542	-541	-32	N
	ATOM	6551	C2	MGT	B	1	10.866	8.432	-22.259	1.00	27.34		C
	ANISOU	6551	C2	MGT	B	1	3301	3354	3732	486	-471	-49	C
	ATOM	6552	N2	MGT	B	1	10.701	9.584	-21.612	1.00	27.16		N
55	ANISOU	6552	N2	MGT	B	1	3394	3178	3749	604	-444	-27	N
	ATOM	6553	N1	MGT	B	1	12.111	7.743	-22.231	1.00	25.77		N
	ANISOU	6553	N1	MGT	B	1	3131	3144	3516	307	-431	-94	N
	ATOM	6554	C6	MGT	B	1	12.248	6.556	-22.934	1.00	25.10		C
	ANISOU	6554	C6	MGT	B	1	2952	3198	3385	209	-450	-125	C
60	ATOM	6555	O6	MGT	B	1	13.319	5.964	-22.921	1.00	23.93		O
	ANISOU	6555	O6	MGT	B	1	2823	3040	3228	85	-407	-162	O
	ATOM	6556	O2G	MGT	D	1	61.475	-17.770	-25.548	1.00	67.38		O
	ANISOU	6556	O2G	MGT	D	1	9188	7995	8420	107	942	-1582	O
	ATOM	6557	PG	MGT	D	1	62.375	-16.755	-24.687	1.00	63.67		P

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6557	PG	MGT	D	1	8522	7594	8077	197	990	-1352	P
	ATOM	6558	O3G	MGT	D	1	61.503	-15.362	-24.545	1.00	60.97		O
	ANISOU	6558	O3G	MGT	D	1	8082	7476	7609	96	876	-1228	O
	ATOM	6559	O1G	MGT	D	1	62.653	-17.429	-23.397	1.00	61.93		O
5	ANISOU	6559	O1G	MGT	D	1	8255	7184	8089	201	946	-1268	O
	ATOM	6560	O3B	MGT	D	1	63.673	-16.536	-25.716	1.00	64.52		O
	ANISOU	6560	O3B	MGT	D	1	8633	7752	8130	376	1208	-1392	O
	ATOM	6561	PB	MGT	D	1	64.918	-15.449	-25.741	1.00	62.58		P
	ANISOU	6561	PB	MGT	D	1	8215	7622	7940	497	1355	-1237	P
10	ATOM	6562	O2B	MGT	D	1	65.139	-15.212	-27.321	1.00	64.91		O
	ANISOU	6562	O2B	MGT	D	1	8631	8045	7988	558	1524	-1348	O
	ATOM	6563	O1B	MGT	D	1	66.180	-15.970	-25.139	1.00	63.51		O
	ANISOU	6563	O1B	MGT	D	1	8220	7601	8311	635	1450	-1195	O
	ATOM	6564	O3A	MGT	D	1	64.421	-13.964	-25.210	1.00	59.32		O
15	ANISOU	6564	O3A	MGT	D	1	7676	7379	7485	401	1242	-1049	O
	ATOM	6565	PA	MGT	D	1	65.432	-12.750	-24.675	1.00	56.96		P
	ANISOU	6565	PA	MGT	D	1	7170	7154	7317	450	1303	-853	P
	ATOM	6566	O2A	MGT	D	1	64.807	-11.421	-25.326	1.00	57.92		O
	ANISOU	6566	O2A	MGT	D	1	7315	7462	7229	384	1286	-780	O
20	ATOM	6567	O1A	MGT	D	1	66.884	-12.915	-25.008	1.00	57.06		O
	ANISOU	6567	O1A	MGT	D	1	7089	7135	7457	589	1504	-851	O
	ATOM	6568	O5*	MGT	D	1	65.125	-12.590	-23.090	1.00	52.24		O
	ANISOU	6568	O5*	MGT	D	1	6467	6494	6888	382	1121	-735	O
	ATOM	6569	C5*	MGT	D	1	66.139	-12.982	-22.146	1.00	47.19		C
25	ANISOU	6569	C5*	MGT	D	1	5707	5738	6485	461	1122	-671	C
	ATOM	6570	C4*	MGT	D	1	65.571	-13.910	-21.075	1.00	41.42		C
	ANISOU	6570	C4*	MGT	D	1	5036	4863	5837	416	977	-675	C
	ATOM	6571	O4*	MGT	D	1	64.237	-13.425	-20.723	1.00	38.14		O
	ANISOU	6571	O4*	MGT	D	1	4670	4525	5297	270	847	-650	O
30	ATOM	6572	C3*	MGT	D	1	65.400	-15.351	-21.574	1.00	41.82		C
	ANISOU	6572	C3*	MGT	D	1	5242	4761	5887	450	1023	-828	C
	ATOM	6573	O3*	MGT	D	1	66.052	-16.225	-20.646	1.00	42.77		O
	ANISOU	6573	O3*	MGT	D	1	5339	4701	6212	533	987	-785	O
	ATOM	6574	C2*	MGT	D	1	63.880	-15.578	-21.583	1.00	38.52		C
35	ANISOU	6574	C2*	MGT	D	1	4952	4355	5329	288	909	-890	C
	ATOM	6575	O2*	MGT	D	1	63.571	-16.924	-21.181	1.00	41.39		O
	ANISOU	6575	O2*	MGT	D	1	5434	4513	5779	262	869	-960	O
	ATOM	6576	C1*	MGT	D	1	63.397	-14.606	-20.531	1.00	32.26		C
	ANISOU	6576	C1*	MGT	D	1	4058	3655	4544	202	787	-739	C
40	ATOM	6577	N9	MGT	D	1	61.985	-14.077	-20.575	1.00	30.62		N
	ANISOU	6577	N9	MGT	D	1	3877	3566	4190	57	691	-749	N
	ATOM	6578	C8	MGT	D	1	61.537	-13.152	-21.455	1.00	28.56		C
	ANISOU	6578	C8	MGT	D	1	3608	3474	3770	36	699	-767	C
	ATOM	6579	N7	MGT	D	1	60.245	-12.956	-21.135	1.00	28.87		N
45	ANISOU	6579	N7	MGT	D	1	3649	3576	3745	-86	585	-769	N
	ATOM	6580	CM7	MGT	D	1	59.372	-12.016	-21.848	1.00	27.27		C
	ANISOU	6580	CM7	MGT	D	1	3432	3551	3377	-125	533	-779	C
	ATOM	6581	C5	MGT	D	1	59.872	-13.721	-20.082	1.00	29.90		C
	ANISOU	6581	C5	MGT	D	1	3792	3586	3983	-156	529	-750	C
50	ATOM	6582	C4	MGT	D	1	61.017	-14.436	-19.739	1.00	29.44		C
	ANISOU	6582	C4	MGT	D	1	3754	3372	4059	-59	592	-730	C
	ATOM	6583	N3	MGT	D	1	61.004	-15.292	-18.702	1.00	29.19		N
	ANISOU	6583	N3	MGT	D	1	3760	3183	4146	-86	553	-685	N
	ATOM	6584	C2	MGT	D	1	59.915	-15.502	-17.954	1.00	28.05		C
55	ANISOU	6584	C2	MGT	D	1	3637	3026	3992	-223	481	-658	C
	ATOM	6585	N2	MGT	D	1	59.978	-16.375	-16.971	1.00	29.73		N
	ANISOU	6585	N2	MGT	D	1	3915	3072	4309	-246	463	-596	N
	ATOM	6586	N1	MGT	D	1	58.740	-14.829	-18.230	1.00	27.16		N
	ANISOU	6586	N1	MGT	D	1	3479	3073	3767	-332	434	-687	N
60	ATOM	6587	C6	MGT	D	1	58.701	-13.917	-19.293	1.00	28.79		C
	ANISOU	6587	C6	MGT	D	1	3642	3444	3853	-290	443	-733	C
	ATOM	6588	O6	MGT	D	1	57.638	-13.327	-19.502	1.00	27.71		O
	ANISOU	6588	O6	MGT	D	1	3458	3444	3626	-368	381	-750	O
	ATOM	6589	O2G	MGT	E	1	23.200	-31.391	-24.125	1.00	70.75		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6589	O2G	MGT	E	1	9036	8796	9051	-973	-263	-1625	O
	ATOM	6590	PG	MGT	E	1	23.830	-31.142	-22.645	1.00	68.95		P
	ANISOU	6590	PG	MGT	E	1	8848	8360	8991	-906	-117	-1455	P
	ATOM	6591	O3G	MGT	E	1	24.816	-29.813	-22.701	1.00	67.49		O
5	ANISOU	6591	O3G	MGT	E	1	8750	8226	8668	-768	-101	-1258	O
	ATOM	6592	O1G	MGT	E	1	22.748	-30.981	-21.631	1.00	68.11		O
	ANISOU	6592	O1G	MGT	E	1	8612	8217	9051	-935	-125	-1397	O
	ATOM	6593	O3B	MGT	E	1	24.889	-32.361	-22.338	1.00	67.54		O
	ANISOU	6593	O3B	MGT	E	1	8779	7972	8911	-938	27	-1554	O
10	ATOM	6594	PB	MGT	E	1	24.785	-33.870	-22.938	1.00	68.18		P
	ANISOU	6594	PB	MGT	E	1	8880	7968	9058	-1057	39	-1813	P
	ATOM	6595	O2B	MGT	E	1	25.148	-33.733	-24.532	1.00	69.37		O
	ANISOU	6595	O2B	MGT	E	1	9066	8338	8953	-1050	-28	-1961	O
	ATOM	6596	O1B	MGT	E	1	23.440	-34.487	-22.726	1.00	68.87		O
15	ANISOU	6596	O1B	MGT	E	1	8856	8032	9278	-1201	-15	-1906	O
	ATOM	6597	O3A	MGT	E	1	25.997	-34.776	-22.240	1.00	65.43		O
	ANISOU	6597	O3A	MGT	E	1	8646	7350	8863	-1017	183	-1825	O
	ATOM	6598	PA	MGT	E	1	27.307	-34.306	-21.288	1.00	59.20		P
	ANISOU	6598	PA	MGT	E	1	7934	6449	8110	-875	286	-1635	P
20	ATOM	6599	O2A	MGT	E	1	28.136	-33.197	-22.107	1.00	58.65		O
	ANISOU	6599	O2A	MGT	E	1	7884	6588	7811	-779	280	-1588	O
	ATOM	6600	O1A	MGT	E	1	28.129	-35.492	-20.942	1.00	59.66		O
	ANISOU	6600	O1A	MGT	E	1	8071	6268	8331	-854	365	-1720	O
	ATOM	6601	O5*	MGT	E	1	26.816	-33.620	-19.940	1.00	53.22		O
25	ANISOU	6601	O5*	MGT	E	1	7134	5651	7435	-863	299	-1411	O
	ATOM	6602	C5*	MGT	E	1	26.613	-34.401	-18.761	1.00	47.71		C
	ANISOU	6602	C5*	MGT	E	1	6458	4745	6925	-918	359	-1351	C
	ATOM	6603	C4*	MGT	E	1	25.456	-33.830	-17.966	1.00	43.86		C
	ANISOU	6603	C4*	MGT	E	1	5872	4324	6467	-983	346	-1240	C
30	ATOM	6604	O4*	MGT	E	1	25.786	-32.441	-17.660	1.00	39.94		O
	ANISOU	6604	O4*	MGT	E	1	5354	3955	5866	-865	338	-1094	O
	ATOM	6605	C3*	MGT	E	1	24.198	-33.807	-18.837	1.00	44.21		C
	ANISOU	6605	C3*	MGT	E	1	5798	4523	6477	-1082	252	-1373	C
	ATOM	6606	O3*	MGT	E	1	23.129	-34.318	-18.052	1.00	47.14		O
35	ANISOU	6606	O3*	MGT	E	1	6089	4833	6988	-1223	283	-1368	O
	ATOM	6607	C2*	MGT	E	1	23.967	-32.325	-19.118	1.00	42.11		C
	ANISOU	6607	C2*	MGT	E	1	5461	4470	6071	-979	178	-1280	C
	ATOM	6608	O2*	MGT	E	1	22.556	-32.080	-19.141	1.00	44.49		O
	ANISOU	6608	O2*	MGT	E	1	5604	4894	6405	-1051	104	-1318	O
40	ATOM	6609	C1*	MGT	E	1	24.614	-31.665	-17.889	1.00	36.11		C
	ANISOU	6609	C1*	MGT	E	1	4744	3637	5341	-890	263	-1094	C
	ATOM	6610	N9	MGT	E	1	25.074	-30.253	-17.973	1.00	33.69		N
	ANISOU	6610	N9	MGT	E	1	4442	3438	4921	-758	232	-977	N
	ATOM	6611	C8	MGT	E	1	26.143	-29.848	-18.690	1.00	32.33		C
45	ANISOU	6611	C8	MGT	E	1	4355	3300	4628	-678	226	-961	C
	ATOM	6612	N7	MGT	E	1	26.235	-28.515	-18.497	1.00	30.39		N
	ANISOU	6612	N7	MGT	E	1	4097	3125	4326	-592	200	-834	N
	ATOM	6613	CM7	MGT	E	1	27.291	-27.689	-19.147	1.00	30.36		C
	ANISOU	6613	CM7	MGT	E	1	4173	3175	4187	-519	196	-768	C
50	ATOM	6614	C5	MGT	E	1	25.270	-28.075	-17.684	1.00	30.41		C
	ANISOU	6614	C5	MGT	E	1	4001	3137	4414	-594	187	-790	C
	ATOM	6615	C4	MGT	E	1	24.528	-29.207	-17.348	1.00	33.54		C
	ANISOU	6615	C4	MGT	E	1	4345	3484	4915	-708	216	-881	C
	ATOM	6616	N3	MGT	E	1	23.454	-29.116	-16.532	1.00	32.74		N
55	ANISOU	6616	N3	MGT	E	1	4124	3405	4909	-756	232	-876	N
	ATOM	6617	C2	MGT	E	1	23.082	-27.949	-16.013	1.00	31.10		C
	ANISOU	6617	C2	MGT	E	1	3842	3265	4708	-674	218	-805	C
	ATOM	6618	N2	MGT	E	1	22.036	-27.912	-15.215	1.00	32.01		N
	ANISOU	6618	N2	MGT	E	1	3821	3423	4917	-724	252	-831	N
60	ATOM	6619	N1	MGT	E	1	23.783	-26.786	-16.310	1.00	30.29		N
	ANISOU	6619	N1	MGT	E	1	3801	3183	4526	-545	175	-716	N
	ATOM	6620	C6	MGT	E	1	24.887	-26.830	-17.148	1.00	31.43		C
	ANISOU	6620	C6	MGT	E	1	4072	3309	4562	-516	162	-696	C
	ATOM	6621	O6	MGT	E	1	25.482	-25.774	-17.398	1.00	30.00		O

## ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6621	O6	MGT	E	1	3944	3144	4312	-429	135	-607	O
	ATOM	6622	O2G	MGT	F	1	30.350	-3.944	-65.480	1.00	99.58		O
	ANISOU	6622	O2G	MGT	F	1	14031	16156	7647	-644	2	-439	O
	ATOM	6623	PG	MGT	F	1	28.875	-4.380	-64.937	1.00	97.98		P
5	ANISOU	6623	PG	MGT	F	1	13719	15816	7693	-487	-380	-489	P
	ATOM	6624	O3G	MGT	F	1	28.278	-5.473	-65.973	1.00	100.06		O
	ANISOU	6624	O3G	MGT	F	1	14125	16190	7703	-469	-516	-718	O
	ATOM	6625	O1G	MGT	F	1	28.966	-4.930	-63.549	1.00	93.98		O
	ANISOU	6625	O1G	MGT	F	1	12887	15191	7630	-397	-325	-595	O
10	ATOM	6626	O3B	MGT	F	1	27.926	-3.048	-65.157	1.00	97.20		O
	ANISOU	6626	O3B	MGT	F	1	13810	15616	7506	-472	-688	-195	O
	ATOM	6627	PB	MGT	F	1	26.314	-3.046	-64.848	1.00	94.58		P
	ANISOU	6627	PB	MGT	F	1	13385	15180	7372	-321	-1114	-191	P
	ATOM	6628	O2B	MGT	F	1	25.693	-3.980	-66.039	1.00	96.13		O
15	ANISOU	6628	O2B	MGT	F	1	13730	15529	7265	-323	-1304	-385	O
	ATOM	6629	O1B	MGT	F	1	25.707	-1.684	-64.850	1.00	95.46		O
	ANISOU	6629	O1B	MGT	F	1	13630	15170	7470	-262	-1343	89	O
	ATOM	6630	O3A	MGT	F	1	26.194	-3.836	-63.403	1.00	86.47		O
	ANISOU	6630	O3A	MGT	F	1	11980	14048	6828	-253	-1036	-362	O
20	ATOM	6631	PA	MGT	F	1	25.747	-3.160	-61.969	1.00	79.76		P
	ANISOU	6631	PA	MGT	F	1	10904	13006	6395	-173	-1093	-247	P
	ATOM	6632	O2A	MGT	F	1	25.428	-4.445	-61.045	1.00	77.01		O
	ANISOU	6632	O2A	MGT	F	1	10293	12609	6357	-138	-1050	-494	O
	ATOM	6633	O1A	MGT	F	1	24.575	-2.250	-62.103	1.00	81.05		O
25	ANISOU	6633	O1A	MGT	F	1	11113	13096	6587	-75	-1414	-96	O
	ATOM	6634	O5*	MGT	F	1	27.022	-2.434	-61.277	1.00	74.56		O
	ANISOU	6634	O5*	MGT	F	1	10228	12289	5813	-247	-803	-111	O
	ATOM	6635	C5*	MGT	F	1	27.118	-0.995	-61.342	1.00	70.02		C
	ANISOU	6635	C5*	MGT	F	1	9816	11623	5166	-279	-837	152	C
30	ATOM	6636	C4*	MGT	F	1	28.554	-0.539	-61.633	1.00	66.55		C
	ANISOU	6636	C4*	MGT	F	1	9491	11251	4545	-450	-529	235	C
	ATOM	6637	O4*	MGT	F	1	29.365	-1.421	-60.821	1.00	62.48		O
	ANISOU	6637	O4*	MGT	F	1	8711	10787	4243	-457	-310	45	O
	ATOM	6638	C3*	MGT	F	1	29.017	-0.716	-63.097	1.00	67.92		C
35	ANISOU	6638	C3*	MGT	F	1	9926	11602	4279	-559	-437	229	C
	ATOM	6639	O3*	MGT	F	1	29.464	0.547	-63.638	1.00	71.23		O
	ANISOU	6639	O3*	MGT	F	1	10633	11975	4455	-700	-363	483	O
	ATOM	6640	C2*	MGT	F	1	30.204	-1.684	-63.020	1.00	65.40		C
	ANISOU	6640	C2*	MGT	F	1	9433	11442	3975	-628	-112	11	C
40	ATOM	6641	O2*	MGT	F	1	31.280	-1.234	-63.872	1.00	65.11		O
	ANISOU	6641	O2*	MGT	F	1	9573	11538	3626	-817	163	74	O
	ATOM	6642	C1*	MGT	F	1	30.610	-1.563	-61.542	1.00	60.72		C
	ANISOU	6642	C1*	MGT	F	1	8551	10736	3784	-595	-29	0	C
	ATOM	6643	N9	MGT	F	1	31.361	-2.695	-60.897	1.00	58.13		N
45	ANISOU	6643	N9	MGT	F	1	7951	10481	3654	-540	147	-237	N
	ATOM	6644	C8	MGT	F	1	30.774	-3.809	-60.424	1.00	56.15		C
	ANISOU	6644	C8	MGT	F	1	7571	10180	3582	-396	36	-414	C
	ATOM	6645	N7	MGT	F	1	31.776	-4.546	-59.912	1.00	55.98		N
	ANISOU	6645	N7	MGT	F	1	7360	10216	3694	-359	232	-573	N
50	ATOM	6646	CM7	MGT	F	1	31.556	-5.890	-59.278	1.00	54.61		C
	ANISOU	6646	CM7	MGT	F	1	7057	9970	3722	-208	191	-783	C
	ATOM	6647	C5	MGT	F	1	32.960	-3.927	-60.039	1.00	57.17		C
	ANISOU	6647	C5	MGT	F	1	7463	10481	3778	-476	459	-522	C
	ATOM	6648	C4	MGT	F	1	32.671	-2.722	-60.675	1.00	58.35		C
55	ANISOU	6648	C4	MGT	F	1	7834	10615	3719	-617	418	-299	C
	ATOM	6649	N3	MGT	F	1	33.637	-1.831	-60.974	1.00	59.84		N
	ANISOU	6649	N3	MGT	F	1	8063	10888	3784	-804	632	-191	N
	ATOM	6650	C2	MGT	F	1	34.924	-2.053	-60.665	1.00	60.72		C
	ANISOU	6650	C2	MGT	F	1	7940	11139	3992	-862	890	-315	C
60	ATOM	6651	N2	MGT	F	1	35.834	-1.129	-60.973	1.00	62.34		N
	ANISOU	6651	N2	MGT	F	1	8169	11434	4084	-1091	1115	-218	N
	ATOM	6652	N1	MGT	F	1	35.287	-3.254	-60.011	1.00	59.54		N
	ANISOU	6652	N1	MGT	F	1	7525	11029	4067	-680	912	-549	N
	ATOM	6653	C6	MGT	F	1	34.299	-4.207	-59.684	1.00	57.63		C

# ES 2 454 773 T3

	ANISOU	6653	C6	MGT	F	1	7300	10661	3935	-485	696	-642	C
	ATOM	6654	O6	MGT	F	1	34.635	-5.252	-59.114	1.00	55.72		O
	ANISOU	6654	O6	MGT	F	1	6882	10416	3874	-329	718	-828	O
5	ATOM	6655	OH2	WAT	Z	1	22.010	-17.664	-4.923	1.00	24.01		O
	ATOM	6656	OH2	WAT	Z	2	35.587	-15.501	-13.579	1.00	25.92		O
	ATOM	6657	OH2	WAT	Z	3	24.874	18.972	-29.481	1.00	17.82		O
	ATOM	6658	OH2	WAT	Z	4	22.669	-1.536	-24.962	1.00	13.35		O
	ATOM	6659	OH2	WAT	Z	5	52.591	-14.211	-5.902	1.00	21.48		O
	ATOM	6660	OH2	WAT	Z	7	13.160	0.537	1.189	1.00	23.18		O
10	ATOM	6661	OH2	WAT	Z	8	25.007	17.823	-32.038	1.00	17.76		O
	ATOM	6662	OH2	WAT	Z	9	57.764	0.177	-1.188	1.00	25.56		O
	ATOM	6663	OH2	WAT	Z	10	22.557	-2.907	-16.078	1.00	29.94		O
	ATOM	6664	OH2	WAT	Z	11	0.415	-4.929	-12.849	1.00	25.54		O
	ATOM	6665	OH2	WAT	Z	12	21.159	3.266	-9.320	1.00	33.91		O
15	ATOM	6666	OH2	WAT	Z	13	29.894	16.381	-39.221	1.00	27.21		O
	ATOM	6667	OH2	WAT	Z	14	48.790	14.910	-10.474	1.00	28.71		O
	ATOM	6668	OH2	WAT	Z	15	51.978	-20.700	-11.448	1.00	26.98		O
	ATOM	6669	OH2	WAT	Z	16	52.522	8.682	-31.531	1.00	27.48		O
	ATOM	6670	OH2	WAT	Z	17	71.301	-1.768	-14.451	1.00	22.48		O
20	ATOM	6671	OH2	WAT	Z	18	27.320	-22.307	-20.123	1.00	19.55		O
	ATOM	6672	OH2	WAT	Z	19	34.964	21.944	-4.871	1.00	23.06		O
	ATOM	6673	OH2	WAT	Z	21	23.902	-22.328	-16.923	1.00	23.97		O
	ATOM	6674	OH2	WAT	Z	22	48.357	-2.830	-15.780	1.00	34.81		O
	ATOM	6675	OH2	WAT	Z	23	58.588	5.961	-27.382	1.00	19.01		O
25	ATOM	6676	OH2	WAT	Z	24	18.628	15.589	-17.793	1.00	30.46		O
	ATOM	6677	OH2	WAT	Z	25	19.270	-18.539	-13.641	1.00	21.85		O
	ATOM	6678	OH2	WAT	Z	26	43.558	13.915	-26.424	1.00	17.33		O
	ATOM	6679	OH2	WAT	Z	27	26.542	-12.581	-16.266	1.00	26.41		O
	ATOM	6680	OH2	WAT	Z	28	34.875	33.272	-20.697	1.00	21.41		O
30	ATOM	6681	OH2	WAT	Z	29	13.457	-11.350	-34.721	1.00	35.91		O
	ATOM	6682	OH2	WAT	Z	30	25.564	10.236	-30.803	1.00	24.48		O
	ATOM	6683	OH2	WAT	Z	31	45.958	-26.847	-21.485	1.00	27.96		O
	ATOM	6684	OH2	WAT	Z	32	35.988	-22.594	2.913	1.00	21.42		O
	ATOM	6685	OH2	WAT	Z	33	54.562	-14.794	-17.888	1.00	22.27		O
35	ATOM	6686	OH2	WAT	Z	34	22.529	2.193	-30.694	1.00	27.64		O
	ATOM	6687	OH2	WAT	Z	35	25.635	-4.794	-32.881	1.00	28.73		O
	ATOM	6688	OH2	WAT	Z	36	27.823	20.133	-0.039	1.00	36.81		O
	ATOM	6689	OH2	WAT	Z	37	20.246	12.658	-31.810	1.00	24.61		O
	ATOM	6690	OH2	WAT	Z	38	28.300	-37.005	-18.759	1.00	51.31		O
40	ATOM	6691	OH2	WAT	Z	39	53.886	-12.268	-21.629	1.00	17.36		O
	ATOM	6692	OH2	WAT	Z	40	48.741	-7.083	-24.282	1.00	24.97		O
	ATOM	6693	OH2	WAT	Z	41	56.501	-23.941	-22.749	1.00	33.42		O
	ATOM	6694	OH2	WAT	Z	42	70.436	0.347	-12.882	1.00	19.32		O
	ATOM	6695	OH2	WAT	Z	43	25.679	6.098	-19.237	1.00	22.39		O
45	ATOM	6696	OH2	WAT	Z	44	32.839	32.448	-18.714	1.00	35.80		O
	ATOM	6697	OH2	WAT	Z	45	13.259	-14.963	-26.829	1.00	23.85		O
	ATOM	6698	OH2	WAT	Z	46	45.572	-27.223	-24.539	1.00	26.82		O
	ATOM	6699	OH2	WAT	Z	47	18.892	12.226	-9.507	1.00	24.12		O
	ATOM	6700	OH2	WAT	Z	48	15.179	-6.957	4.889	1.00	33.18		O
50	ATOM	6701	OH2	WAT	Z	49	28.351	4.517	-12.106	1.00	29.12		O
	ATOM	6702	OH2	WAT	Z	50	69.753	-7.784	-22.150	1.00	24.16		O
	ATOM	6703	OH2	WAT	Z	51	51.484	-18.920	-13.213	1.00	25.28		O
	ATOM	6704	OH2	WAT	Z	52	30.860	13.483	-5.891	1.00	23.31		O
	ATOM	6705	OH2	WAT	Z	53	30.542	-37.628	-17.641	1.00	34.32		O
55	ATOM	6706	OH2	WAT	Z	54	17.077	-19.149	-12.084	1.00	24.17		O
	ATOM	6707	OH2	WAT	Z	55	31.540	-38.915	-14.093	1.00	29.25		O
	ATOM	6708	OH2	WAT	Z	56	32.031	10.317	-7.068	1.00	23.87		O
	ATOM	6709	OH2	WAT	Z	57	63.159	-12.048	-28.694	1.00	38.66		O
	ATOM	6710	OH2	WAT	Z	60	32.626	-17.204	-22.492	1.00	28.77		O
60	ATOM	6711	OH2	WAT	Z	61	13.024	-14.857	-24.008	1.00	21.66		O
	ATOM	6712	OH2	WAT	Z	62	16.501	7.671	-21.877	1.00	22.39		O
	ATOM	6713	OH2	WAT	Z	63	26.459	8.287	-33.540	1.00	44.16		O
	ATOM	6714	OH2	WAT	Z	64	51.383	-16.236	-0.275	1.00	35.25		O
	ATOM	6715	OH2	WAT	Z	65	55.449	4.737	-37.070	1.00	38.33		O

## ES 2 454 773 T3

	ATOM	6716	OH2	WAT	Z	66	18.627	-7.775	-42.508	1.00	43.11	O
	ATOM	6717	OH2	WAT	Z	67	25.172	-1.387	-16.895	1.00	32.89	O
	ATOM	6718	OH2	WAT	Z	68	63.541	6.400	3.498	1.00	39.85	O
	ATOM	6719	OH2	WAT	Z	69	58.234	5.010	-30.073	1.00	27.73	O
5	ATOM	6720	OH2	WAT	Z	70	40.724	12.891	-10.774	1.00	30.83	O
	ATOM	6721	OH2	WAT	Z	71	24.900	12.576	-19.843	1.00	20.19	O
	ATOM	6722	OH2	WAT	Z	72	49.784	-6.304	-7.577	1.00	31.08	O
	ATOM	6723	OH2	WAT	Z	73	27.087	40.698	-13.760	1.00	41.38	O
	ATOM	6724	OH2	WAT	Z	74	76.962	7.731	-7.980	1.00	33.08	O
10	ATOM	6725	OH2	WAT	Z	75	23.651	14.328	-38.716	1.00	32.75	O
	ATOM	6726	OH2	WAT	Z	76	11.075	7.898	-8.738	1.00	37.62	O
	ATOM	6727	OH2	WAT	Z	77	17.338	4.404	-24.665	1.00	17.00	O
	ATOM	6728	OH2	WAT	Z	78	16.077	-25.529	-23.013	1.00	30.89	O
	ATOM	6729	OH2	WAT	Z	79	53.527	14.001	-17.979	1.00	27.27	O
15	ATOM	6730	OH2	WAT	Z	80	34.264	14.194	-45.137	1.00	32.07	O
	ATOM	6731	OH2	WAT	Z	82	42.478	-8.305	-9.650	1.00	29.55	O
	ATOM	6732	OH2	WAT	Z	83	15.985	-6.541	-42.463	1.00	28.85	O
	ATOM	6733	OH2	WAT	Z	84	34.516	8.340	-25.756	1.00	25.94	O
	ATOM	6734	OH2	WAT	Z	85	58.379	-1.510	-36.376	1.00	38.41	O
20	ATOM	6735	OH2	WAT	Z	86	37.811	8.922	-27.105	1.00	22.11	O
	ATOM	6736	OH2	WAT	Z	87	-0.391	-3.769	-14.739	1.00	35.30	O
	ATOM	6737	OH2	WAT	Z	88	43.490	14.702	-6.036	1.00	32.76	O
	ATOM	6738	OH2	WAT	Z	89	66.881	0.967	-35.813	1.00	29.64	O
	ATOM	6739	OH2	WAT	Z	90	50.228	23.440	-23.336	1.00	25.56	O
25	ATOM	6740	OH2	WAT	Z	91	18.346	-19.140	-26.919	1.00	38.45	O
	ATOM	6741	OH2	WAT	Z	93	33.957	31.768	-27.497	1.00	34.70	O
	ATOM	6742	OH2	WAT	Z	94	15.782	16.563	-13.960	1.00	25.91	O
	ATOM	6743	OH2	WAT	Z	95	48.925	4.506	4.193	1.00	30.06	O
	ATOM	6744	OH2	WAT	Z	96	55.094	8.303	2.407	1.00	32.94	O
30	ATOM	6745	OH2	WAT	Z	97	23.845	23.584	-12.034	1.00	27.82	O
	ATOM	6746	OH2	WAT	Z	98	19.282	13.117	-18.942	1.00	28.06	O
	ATOM	6747	OH2	WAT	Z	99	21.689	-13.748	-35.649	1.00	30.66	O
	ATOM	6748	OH2	WAT	Z	100	30.856	27.498	-24.106	1.00	31.84	O
	ATOM	6749	OH2	WAT	Z	101	46.475	15.139	-23.225	1.00	30.44	O
35	ATOM	6750	OH2	WAT	Z	102	75.808	3.111	-8.446	1.00	33.80	O
	ATOM	6751	OH2	WAT	Z	103	22.117	-4.088	-48.032	1.00	47.28	O
	ATOM	6752	OH2	WAT	Z	104	19.417	-9.956	-43.103	1.00	37.00	O
	ATOM	6753	OH2	WAT	Z	105	50.959	14.958	-6.038	1.00	28.24	O
	ATOM	6754	OH2	WAT	Z	106	12.824	-14.262	-55.184	1.00	53.76	O
40	ATOM	6755	OH2	WAT	Z	107	24.243	-15.291	-17.663	1.00	39.66	O
	ATOM	6756	OH2	WAT	Z	108	42.270	21.564	-34.734	1.00	24.55	O
	ATOM	6757	OH2	WAT	Z	109	16.713	-20.968	-7.090	1.00	27.98	O
	ATOM	6758	OH2	WAT	Z	110	36.477	-16.419	-21.410	1.00	48.83	O
	ATOM	6759	OH2	WAT	Z	111	35.351	16.445	-10.062	1.00	50.87	O
45	ATOM	6760	OH2	WAT	Z	112	24.841	-4.261	-4.666	1.00	30.33	O
	ATOM	6761	OH2	WAT	Z	113	4.786	-8.000	-18.626	1.00	35.35	O
	ATOM	6762	OH2	WAT	Z	114	10.306	-1.689	-38.133	1.00	26.41	O
	ATOM	6763	OH2	WAT	Z	115	42.924	-19.244	-23.456	1.00	34.89	O
	ATOM	6764	OH2	WAT	Z	116	42.206	12.907	-6.861	1.00	25.28	O
50	ATOM	6765	OH2	WAT	Z	117	51.605	13.100	-19.296	1.00	31.95	O
	ATOM	6766	OH2	WAT	Z	118	16.469	13.514	-8.427	1.00	45.86	O
	ATOM	6767	OH2	WAT	Z	119	50.036	4.161	-29.744	1.00	25.55	O
	ATOM	6768	OH2	WAT	Z	120	16.233	10.887	-35.555	1.00	41.62	O
	ATOM	6769	OH2	WAT	Z	121	22.532	0.490	-33.852	1.00	27.81	O
55	ATOM	6770	OH2	WAT	Z	123	19.367	-19.611	-56.734	1.00	31.09	O
	ATOM	6771	OH2	WAT	Z	124	46.548	-25.852	-32.207	1.00	41.02	O
	ATOM	6772	OH2	WAT	Z	125	27.102	-32.879	-5.267	1.00	28.86	O
	ATOM	6773	OH2	WAT	Z	126	49.465	4.075	-4.211	1.00	29.62	O
	ATOM	6774	OH2	WAT	Z	127	68.660	-0.401	-18.608	1.00	38.81	O
60	ATOM	6775	OH2	WAT	Z	128	28.488	-14.653	-2.031	1.00	33.34	O
	ATOM	6776	OH2	WAT	Z	129	38.691	29.556	-29.045	1.00	27.56	O
	ATOM	6777	OH2	WAT	Z	130	20.046	14.970	-5.630	1.00	35.59	O
	ATOM	6778	OH2	WAT	Z	131	21.161	-5.035	-2.609	1.00	24.94	O
	ATOM	6779	OH2	WAT	Z	132	39.421	-26.828	9.622	1.00	57.63	O



## ES 2 454 773 T3

	ATOM	6780	OH2	WAT	Z	133	30.273	-15.692	-5.914	1.00	26.45	O
	ATOM	6781	OH2	WAT	Z	134	40.038	-33.801	-13.906	1.00	35.26	O
	ATOM	6782	OH2	WAT	Z	135	50.389	2.298	-27.656	1.00	26.52	O
	ATOM	6783	OH2	WAT	Z	136	42.086	7.582	-31.511	1.00	36.58	O
5	ATOM	6784	OH2	WAT	Z	137	50.049	-21.915	-25.630	1.00	29.44	O
	ATOM	6785	OH2	WAT	Z	138	54.096	17.394	-14.365	1.00	26.83	O
	ATOM	6786	OH2	WAT	Z	139	53.457	22.759	-18.096	1.00	29.22	O
	ATOM	6787	OH2	WAT	Z	140	47.276	-14.555	-17.579	1.00	28.30	O
	ATOM	6788	OH2	WAT	Z	141	29.621	27.139	-8.722	1.00	19.74	O
10	ATOM	6789	OH2	WAT	Z	142	21.551	-15.531	-46.177	1.00	37.12	O
	ATOM	6790	OH2	WAT	Z	143	0.081	-2.053	-6.723	1.00	35.12	O
	ATOM	6791	OH2	WAT	Z	145	2.708	-6.704	-12.288	1.00	29.20	O
	ATOM	6792	OH2	WAT	Z	146	48.187	-3.807	-23.913	1.00	39.45	O
	ATOM	6793	OH2	WAT	Z	147	35.518	-9.414	-58.946	1.00	49.19	O
15	ATOM	6794	OH2	WAT	Z	149	50.661	6.651	-2.459	1.00	31.55	O
	ATOM	6795	OH2	WAT	Z	150	6.977	-4.292	5.382	1.00	33.62	O
	ATOM	6796	OH2	WAT	Z	151	70.053	-2.697	-21.777	1.00	35.37	O
	ATOM	6797	OH2	WAT	Z	152	26.405	-25.745	-56.037	1.00	54.31	O
	ATOM	6798	OH2	WAT	Z	153	21.807	-11.348	-34.300	1.00	36.00	O
20	ATOM	6799	OH2	WAT	Z	155	61.988	12.944	-9.997	1.00	37.17	O
	ATOM	6800	OH2	WAT	Z	156	48.957	-7.172	-3.666	1.00	35.39	O
	ATOM	6801	OH2	WAT	Z	157	9.240	15.496	-16.665	1.00	37.22	O
	ATOM	6802	OH2	WAT	Z	158	22.966	-4.323	-23.838	1.00	42.19	O
	ATOM	6803	OH2	WAT	Z	159	4.714	-15.721	-5.172	1.00	39.15	O
25	ATOM	6804	OH2	WAT	Z	160	23.677	12.223	-38.115	1.00	37.72	O
	ATOM	6805	OH2	WAT	Z	161	40.873	-28.484	-31.719	1.00	49.84	O
	ATOM	6806	OH2	WAT	Z	162	20.764	-17.215	-48.256	1.00	30.64	O
	ATOM	6807	OH2	WAT	Z	163	46.257	2.134	-5.934	1.00	28.45	O
	ATOM	6808	OH2	WAT	Z	164	1.102	-0.339	-23.846	1.00	33.06	O
30	ATOM	6809	OH2	WAT	Z	165	56.153	-23.889	-11.833	1.00	51.89	O
	ATOM	6810	OH2	WAT	Z	166	46.513	-37.594	-25.306	1.00	42.87	O
	ATOM	6811	OH2	WAT	Z	167	31.205	-31.346	-33.201	1.00	37.47	O
	ATOM	6812	OH2	WAT	Z	168	46.736	-32.410	-16.066	1.00	48.36	O
	ATOM	6813	OH2	WAT	Z	169	16.920	-25.816	-15.401	1.00	43.16	O
35	ATOM	6814	OH2	WAT	Z	170	40.084	28.332	-35.998	1.00	31.80	O
	ATOM	6815	OH2	WAT	Z	171	43.734	19.350	-33.881	1.00	29.51	O
	ATOM	6816	OH2	WAT	Z	172	26.493	-8.330	-14.753	1.00	32.62	O
	ATOM	6817	OH2	WAT	Z	173	33.748	4.983	-37.285	1.00	33.47	O
	ATOM	6818	OH2	WAT	Z	175	56.484	-13.704	-3.695	1.00	32.87	O
40	ATOM	6819	OH2	WAT	Z	176	27.269	-8.161	-63.691	1.00	43.49	O
	ATOM	6820	OH2	WAT	Z	177	50.087	-8.525	-2.162	1.00	26.01	O
	ATOM	6821	OH2	WAT	Z	179	36.074	-14.083	-7.400	1.00	33.95	O
	ATOM	6822	OH2	WAT	Z	180	21.712	-14.738	-31.372	1.00	41.69	O
	ATOM	6823	OH2	WAT	Z	181	66.636	-9.970	-8.729	1.00	30.38	O
45	ATOM	6824	OH2	WAT	Z	182	65.403	-12.027	-5.047	1.00	39.48	O
	ATOM	6825	OH2	WAT	Z	183	25.708	11.169	-43.671	1.00	35.61	O
	ATOM	6826	OH2	WAT	Z	184	51.471	-10.298	-38.366	1.00	45.24	O
	ATOM	6827	OH2	WAT	Z	185	13.816	14.588	-29.069	1.00	30.39	O
	ATOM	6828	OH2	WAT	Z	186	25.401	24.637	0.808	1.00	42.63	O
50	ATOM	6829	OH2	WAT	Z	187	24.141	3.660	-9.953	1.00	41.40	O
	ATOM	6830	OH2	WAT	Z	188	50.530	-7.054	-30.104	1.00	37.25	O
	ATOM	6831	OH2	WAT	Z	189	17.307	-28.578	-8.340	1.00	37.35	O
	ATOM	6832	OH2	WAT	Z	190	23.215	-2.485	-9.503	1.00	34.35	O
	ATOM	6833	OH2	WAT	Z	191	25.409	-36.972	-21.377	1.00	28.84	O
55	ATOM	6834	OH2	WAT	Z	192	32.293	9.056	-52.850	1.00	53.81	O
	ATOM	6835	OH2	WAT	Z	194	9.854	-20.178	-8.716	1.00	47.33	O
	ATOM	6836	OH2	WAT	Z	195	45.448	7.502	-21.691	1.00	37.17	O
	ATOM	6837	OH2	WAT	Z	196	41.211	-41.959	-28.245	1.00	48.32	O
	ATOM	6838	OH2	WAT	Z	197	35.027	-38.234	-17.129	1.00	46.15	O
60	ATOM	6839	OH2	WAT	Z	198	30.945	3.849	-33.630	1.00	38.01	O
	ATOM	6840	OH2	WAT	Z	199	10.582	3.216	-30.915	1.00	30.78	O
	ATOM	6841	OH2	WAT	Z	200	38.611	-12.140	-47.412	1.00	34.67	O
	ATOM	6842	OH2	WAT	Z	201	17.623	19.014	-29.499	1.00	56.25	O
	ATOM	6843	OH2	WAT	Z	202	48.293	17.619	-42.569	1.00	39.31	O

## ES 2 454 773 T3

	ATOM	6844	OH2	WAT	Z	203	28.384	15.063	-3.883	1.00	41.61	O
	ATOM	6845	OH2	WAT	Z	204	35.579	3.773	-42.257	1.00	44.44	O
	ATOM	6846	OH2	WAT	Z	205	20.437	-13.266	-15.586	1.00	23.67	O
	ATOM	6847	OH2	WAT	Z	206	38.154	5.184	-40.233	1.00	49.51	O
5	ATOM	6848	OH2	WAT	Z	207	45.198	22.725	-11.680	1.00	41.39	O
	ATOM	6849	OH2	WAT	Z	208	36.171	-18.123	-57.255	1.00	45.32	O
	ATOM	6850	OH2	WAT	Z	209	20.057	7.547	-4.988	1.00	40.68	O
	ATOM	6851	OH2	WAT	Z	210	40.148	3.860	-50.600	1.00	35.38	O
	ATOM	6852	OH2	WAT	Z	211	45.636	-6.474	-29.807	1.00	52.09	O
10	ATOM	6853	OH2	WAT	Z	212	45.277	22.770	-9.176	1.00	24.03	O
	ATOM	6854	OH2	WAT	Z	213	33.172	4.773	-32.693	1.00	35.71	O
	ATOM	6855	OH2	WAT	Z	214	33.650	-19.496	-30.848	1.00	39.27	O
	ATOM	6856	OH2	WAT	Z	215	46.592	-5.388	-49.721	1.00	39.74	O
	ATOM	6857	OH2	WAT	Z	216	35.963	-38.228	-8.201	1.00	32.99	O
15	ATOM	6858	OH2	WAT	Z	217	42.449	-15.437	1.419	1.00	33.54	O
	ATOM	6859	OH2	WAT	Z	218	17.500	-25.027	-8.417	1.00	31.46	O
	ATOM	6860	OH2	WAT	Z	219	24.656	-8.332	-63.244	1.00	41.72	O
	ATOM	6861	OH2	WAT	Z	220	30.837	2.476	-36.522	1.00	34.45	O
	ATOM	6862	OH2	WAT	Z	221	54.803	-22.398	-30.205	1.00	48.05	O
20	ATOM	6863	OH2	WAT	Z	222	46.624	-6.685	-7.840	1.00	45.14	O
	ATOM	6864	OH2	WAT	Z	223	69.977	0.204	-6.062	1.00	29.12	O
	ATOM	6865	OH2	WAT	Z	224	27.484	9.235	-45.269	1.00	41.47	O
	ATOM	6866	OH2	WAT	Z	225	39.053	12.272	-7.273	1.00	35.61	O
	ATOM	6867	OH2	WAT	Z	226	33.654	-11.620	-71.645	1.00	32.99	O
25	ATOM	6868	OH2	WAT	Z	227	37.763	-36.609	-6.731	1.00	39.13	O
	ATOM	6869	OH2	WAT	Z	228	43.789	-6.817	-64.285	1.00	35.87	O
	ATOM	6870	OH2	WAT	Z	229	15.841	7.668	-39.846	1.00	42.57	O
	ATOM	6871	OH2	WAT	Z	230	49.470	-7.674	-32.876	1.00	39.94	O
	ATOM	6872	OH2	WAT	Z	231	73.132	-6.437	-11.485	1.00	43.64	O
30	ATOM	6873	OH2	WAT	Z	232	69.189	-10.890	-8.124	1.00	43.10	O
	ATOM	6874	OH2	WAT	Z	233	68.220	1.931	-4.425	1.00	35.19	O
	ATOM	6875	OH2	WAT	Z	234	-0.117	0.428	-21.467	1.00	53.29	O
	ATOM	6876	OH2	WAT	Z	235	22.121	-3.444	6.017	1.00	34.04	O
	ATOM	6877	OH2	WAT	Z	236	12.296	14.675	-22.643	1.00	46.28	O
35	ATOM	6878	OH2	WAT	Z	237	14.515	13.822	-6.990	1.00	44.07	O
	ATOM	6879	OH2	WAT	Z	238	8.264	1.618	-31.428	1.00	31.10	O
	ATOM	6880	OH2	WAT	Z	239	18.004	15.205	-9.508	1.00	43.87	O
	ATOM	6881	OH2	WAT	Z	240	26.138	-4.555	-6.867	1.00	38.79	O
	ATOM	6882	OH2	WAT	Z	241	44.614	6.587	-19.546	1.00	22.31	O
40	ATOM	6883	OH2	WAT	Z	242	42.232	28.400	-29.247	1.00	39.83	O
	ATOM	6884	OH2	WAT	Z	243	35.090	10.219	-18.144	1.00	42.61	O
	ATOM	6885	OH2	WAT	Z	244	42.707	7.488	-22.667	1.00	26.48	O
	ATOM	6886	OH2	WAT	Z	245	5.481	-13.489	-33.682	1.00	42.88	O
	ATOM	6887	OH2	WAT	Z	246	24.380	4.187	-32.955	1.00	35.24	O
45	ATOM	6888	OH2	WAT	Z	247	57.349	26.834	-15.600	1.00	57.46	O
	ATOM	6889	OH2	WAT	Z	248	36.055	-30.582	3.645	1.00	49.07	O
	ATOM	6890	OH2	WAT	Z	249	34.660	-36.210	-0.590	1.00	38.86	O
	ATOM	6891	OH2	WAT	Z	250	44.202	2.988	-16.631	1.00	34.41	O
	ATOM	6892	OH2	WAT	Z	251	28.312	-18.014	-27.408	1.00	47.07	O
50	ATOM	6893	OH2	WAT	Z	252	43.871	7.890	-38.332	1.00	39.41	O
	ATOM	6894	OH2	WAT	Z	254	35.217	-18.557	-4.263	1.00	39.96	O
	ATOM	6895	OH2	WAT	Z	256	10.973	15.666	-13.469	1.00	51.73	O
	ATOM	6896	OH2	WAT	Z	257	63.806	8.757	-23.338	1.00	49.41	O
	ATOM	6897	OH2	WAT	Z	258	30.195	19.858	-45.928	1.00	40.05	O
55	ATOM	6898	OH2	WAT	Z	259	45.473	-17.828	-14.547	1.00	34.13	O
	ATOM	6899	OH2	WAT	Z	261	32.026	-1.032	-32.780	1.00	55.96	O
	ATOM	6900	OH2	WAT	Z	263	11.334	-21.951	-13.454	1.00	54.94	O
	ATOM	6901	OH2	WAT	Z	264	34.852	11.262	-11.695	1.00	56.14	O
	ATOM	6902	OH2	WAT	Z	265	50.631	-23.856	-26.444	1.00	33.63	O
60	ATOM	6903	OH2	WAT	Z	266	28.803	-8.481	0.380	1.00	46.99	O
	ATOM	6904	OH2	WAT	Z	268	60.910	-11.529	-36.250	1.00	42.92	O
	ATOM	6905	OH2	WAT	Z	269	29.242	24.796	-47.351	1.00	47.76	O
	ATOM	6906	OH2	WAT	Z	270	25.353	-10.071	-20.464	1.00	44.62	O
	ATOM	6907	OH2	WAT	Z	271	21.773	-15.534	-15.644	1.00	27.98	O

# ES 2 454 773 T3

	ATOM	6908	OH2	WAT	Z	272	43.832	29.110	-16.193	1.00	29.32	O
	ATOM	6909	OH2	WAT	Z	274	24.253	7.923	-25.411	1.00	52.09	O
	ATOM	6910	OH2	WAT	Z	275	41.167	-6.372	-42.144	1.00	44.79	O
5	ATOM	6911	OH2	WAT	Z	276	51.558	-15.128	-4.442	1.00	26.03	O
	ATOM	6912	OH2	WAT	Z	277	27.750	-30.861	-21.049	1.00	38.16	O
	ATOM	6913	OH2	WAT	Z	278	54.407	4.151	7.215	1.00	52.58	O
	ATOM	6914	OH2	WAT	Z	279	34.111	20.624	-3.191	1.00	50.26	O
	ATOM	6915	OH2	WAT	Z	280	47.178	7.039	-25.319	1.00	49.30	O
10	ATOM	6916	OH2	WAT	Z	281	47.157	-37.019	-13.327	1.00	40.78	O
	ATOM	6917	OH2	WAT	Z	282	39.719	-34.762	-7.503	1.00	35.67	O
	ATOM	6918	OH2	WAT	Z	283	22.466	-13.541	-17.364	1.00	61.73	O
	ATOM	6919	OH2	WAT	Z	284	46.118	-4.589	-17.951	1.00	44.94	O
	ATOM	6920	OH2	WAT	Z	285	20.024	-16.482	-0.472	1.00	35.25	O
	ATOM	6921	OH2	WAT	Z	286	20.617	-3.221	-30.981	1.00	26.80	O
15	ATOM	6922	OH2	WAT	Z	287	14.396	11.159	-7.209	1.00	48.86	O
	ATOM	6923	OH2	WAT	Z	288	1.963	6.454	-25.094	1.00	54.37	O
	ATOM	6924	OH2	WAT	Z	290	27.856	10.495	-28.946	1.00	31.74	O
	ATOM	6925	OH2	WAT	Z	291	20.937	-11.628	-24.894	1.00	33.25	O
20	ATOM	6926	OH2	WAT	Z	293	29.682	29.704	-7.204	1.00	42.07	O
	END											