

Supplementary Material:

Figure Sup1. Definition for the atomic local orthogonal axes system (**X,Y,Z**) exemplified in the case of a water oxygen atom.

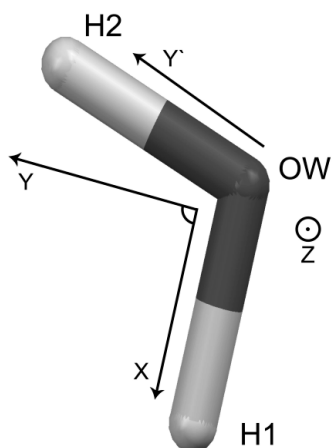


Table Sup1 Coefficients α and n_i of the radial Slater functions used for the multipoles definition (dipole, quadrupole, octapole, hexadecapole) of the different atoms.

| Atom | α (Bohr ⁻¹) | n_1 | n_2 | n_3 | n_4 |
|------|--------------------------------|-------|-------|-------|-------|
| H | 2.26 | 1 | / | / | / |
| C | 3.00 | 2 | 2 | 3 | 4 |
| N | 3.80 | 2 | 2 | 3 | 4 |
| O | 4.50 | 2 | 2 | 3 | 4 |
| S | 4.10 | 4 | 4 | 6 | 8 |

Table Sup2

Real spherical harmonic functions used to model the multipolar atom up to hexadecapole level.

x , y and z are the direction cosines. The normalization constants are the same as in Hansen & Coppens (1978).

| Y_{lm} | Abreviation | Function | |
|-----------|------------------|--|------------------------|
| y_{10} | P_x | z | <i>3 dipoles</i> |
| y_{11+} | P_y | x | |
| y_{11-} | P_z | y | |
| y_{20} | P_z^2 | $2z^2 - (x^2+y^2)$ | <i>5 quadrupoles</i> |
| y_{21+} | P_{xz} | xz | |
| y_{21-} | P_{yz} | yz | |
| y_{22+} | $P_{x^2-y^2}$ | $(x^2 - y^2)/2$ | |
| y_{22-} | P_{xy} | xy | |
| y_{30} | P_z^3 | $2z^3 - 3z(x^2 + y^2)$ | <i>7 octapoles</i> |
| y_{31+} | P_{xz^2} | $x(4z^2 - (x^2 + y^2))$ | |
| y_{31-} | P_{yz^2} | $y(4z^2 - (x^2 + y^2))$ | |
| y_{32+} | $P_{z(x^2-y^2)}$ | $z(x^2 - y^2)$ | |
| y_{32-} | P_{xyz} | $2xyz$ | |
| y_{33+} | P_x^3 | $x^3 - 3xy^2$ | |
| y_{33-} | P_y^3 | $y^3 - 3yx^2$ | |
| y_{40} | | $8z^4 - 24z^2(x^2 + y^2) + 3(x^2 + y^2)^2$ | <i>9 hexadecapoles</i> |
| y_{41} | | $x[4z^3 - 3z(x^2 + y^2)]$ | |
| y_{41-} | | $y[4z^3 - 3z(x^2 + y^2)]$ | |
| y_{42} | | $(x^2 - y^2)[6z^2 - (x^2 + y^2)]$ | |
| y_{42-} | | $2xy[6z^2 - (x^2 + y^2)]$ | |
| y_{43} | | $z(x^3 - 3xy^2)$ | |
| y_{43-} | | $z(y^3 - 3yx^2)$ | |
| y_{44} | | $x^4 - 6x^2y^2 + y^4$ | |
| y_{44-} | | $4x^3y - 4xy^3$ | |

Table Sup3.

The library of charge density parameters for all amino acids found in proteins.

| Residue_Name | Number_of_atom | residue_charge | Neutral/Charged |
|--------------|----------------|-------------------|-----------------|
| Atom_Name | X-axis | Atom_Name | Y-axis |
| Pval | P00 | 3 dipoles | 5 quadrupoles |
| | | 7 octapoles | |
| | | (9 hexadecapoles) | |

+N refers to atom N of residue n+1. (for local axes definition)

-C refers to atom C of residue n-1 (for local axes definition)

```

RES  ALA      10 -0.0020  N
C      O      C      +N
  0.9980  0.9410  1.
  3.976  0.000  0.102  0.000  0.000-0.304  0.000  0.000  0.102  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.411  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
O      C      O      +N
  0.9770  0.9600  36.
  6.307  0.000-0.075  0.000  0.000-0.078  0.000  0.000-0.070  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.039  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
N      -C      N      CA
  0.9870  0.8670  51.
  5.312  0.000  0.000-0.072  0.000-0.050  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.260  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
CA     C      CA     N
  0.9930  0.9160  2.
  4.111  0.000  0.000-0.049  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000-0.171-0.261  0.000  0.000  0.260  0.057
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
CB     CA     CB     HB1
  0.9840  0.8830  5.
  4.295  0.000-0.093  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000-0.226-0.140  0.000  0.000  0.265  0.054
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
H0     N      H0     CA
  1.2080  1.0170  72.
  0.680  0.000  0.166  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
HA     CA     HA     C
  1.1820  1.0910  74.
  0.804  0.000  0.107  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
HB1    CB     HB1    HB2
  1.1260  1.0470  69.
  0.839  0.000  0.164  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000

```


| | | | | | | | | | | |
|--------|-------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------------|-------|-------|
| NH2 | CZ | NH2 | NH1 | | | | | | | |
| 0.9790 | 0.9190 | 61. | | | | | | | | |
| 5.535 | 0.000-0.038 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.061 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.222 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG1 | CG | HG1 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2 | CG | HG2 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HD1 | CD | HD1 | CG | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HD2 | CD | HD2 | CG | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HE | NE | HE | CD | | | | | | | |
| 1.2470 | 1.0880 | 82. | | | | | | | | |
| 0.691 | 0.000 | 0.176 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HH1A | NH1 | HH1AB | HH1B | | | | | | | |
| 1.2670 | 1.2560 | 83. | | | | | | | | |
| 0.631 | 0.000 | 0.110 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HH1B | NH1 | HH1B | HH1A | | | | | | | |
| 1.2670 | 1.2560 | 83. | | | | | | | | |
| 0.631 | 0.000 | 0.110 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HH2A | NH2 | HH2A | HH2B | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|
| 1.2670 | 1.2560 | 83. | | | | | | | | |
| 0.631 | 0.000 | 0.110 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HH2B | NH2 | HH2B | HH2A | | | | | | | |
| 1.2670 | 1.2560 | 83. | | | | | | | | |
| 0.631 | 0.000 | 0.110 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | ASH | 13 | -0.1670 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CG | CB | CG | OD1 | | | | | | | |
| 0.9820 | 1.0100 | 18. | | | | | | | | |
| 3.891 | 0.000 | 0.000 | 0.080 | 0.000 | -0.206 | 0.000 | -0.086 | 0.072 | -0.037 | |
| 0.052 | -0.035 | 0.068 | 0.038 | 0.000 | 0.277 | -0.059 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| OD1 | CG | OD1 | OD2 | | | | | | | |
| 0.9720 | 1.0240 | 42. | | | | | | | | |
| 6.311 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.032 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| OD2 | CG | OD2 | OD1 | | | | | | | |
| 0.9780 | 0.9770 | 39. | | | | | | | | |
| 6.294 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.105 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|--------|--------|-------|
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD | OD2 | HD | OD1 | | | | | | | |
| 1.2950 | 1.3660 | 80. | | | | | | | | |
| 0.648 | 0.000 | 0.072 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | ASN | 14 | 0.0180 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CB | CG | OD1 | | | | | | | |
| 0.9410 | 0.9590 | 19. | | | | | | | | |
| 4.292 | 0.000 | -0.068 | 0.000 | 0.000 | -0.289 | 0.000 | 0.000 | -0.108 | -0.046 | 0.000 |
| 0.044 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.059 | 0.429 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OD1 | CG | OD1 | ND2 | | | | | | | |
| 0.9680 | 0.8300 | 43. | | | | | | | | |
| 6.135 | 0.000 | -0.056 | 0.000 | -0.054 | -0.080 | 0.000 | 0.038 | -0.072 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | -0.058 | 0.000 | 0.000 | 0.060 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| ND2 | CG | ND2 | HD2A | | | | | | | |
| 0.9750 | 0.9960 | 54. | | | | | | | | |
| 5.172 | 0.000 | -0.089 | 0.031 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.071 | 0.000 | 0.000 |
| -0.042 | 0.044 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.186 | -0.049 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HD2A | ND2 | HD2A | HD2B | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HD2B | ND2 | HD2B | HD2A | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | ASP | 12 | -0.8430 | C | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CG | CB | CG | OD1 | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9270 | 17. | | | | | | | | |
| 4.112 | 0.000 | -0.063 | 0.000 | 0.000 | -0.309 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.454 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| OD1 | CG | OD1 | OD2 | | | | | | | |
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | -0.034 | 0.000 | 0.000 | -0.042 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| OD2 | CG | OD2 | OD1 | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|-------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------|-------|-------------|-------|-------|
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000-0.067 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.034 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.042 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HO | N | HO | CA | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | CYS | 11 | 0.1130 | N | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000-0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000-0.075 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.078 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000-0.072 | 0.000 | 0.000-0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000-0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000-0.171-0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | SG | | | | | | |
| 0.9570 | 0.9550 | 22. | | | | | | | |
| 4.592 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.048 | 0.000 | 0.000 | 0.049 | 0.000 | 0.086 | |
| 0.000-0.177-0.246 | 0.039 | 0.000 | 0.263 | 0.000 | | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| SG | CB | SG | HG | | | | | | |
| 1.0050 | 1.0940 | 98. | | | | | | | |
| 5.907 | 0.000-0.062 | 0.000 | 0.000 | 0.145 | 0.000 | 0.000 | 0.000-0.047 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000-0.085 | 0.000 | 0.000 | 0.119 | 0.100 | | | | |
| 0.113-0.031 | 0.000 | 0.000 | 0.037 | 0.067 | 0.000 | 0.094 | 0.062 | | |
| HO | N | HO | CA | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG | SG | HG | CB | | | | | | | |
| 1.2370 | 1.1730 | 95. | | | | | | | | |
| 0.550 | 0.000 | 0.194 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | CYT | 10 | 0.0700 | | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | SG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| SG | CB | SG | HG | | | | | | | |
| 1.0050 | 1.0940 | 98. | | | | | | | | |
| 5.907 | 0.000 | -0.062 | 0.000 | 0.000 | 0.145 | 0.000 | 0.000 | -0.047 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | -0.085 | 0.000 | 0.000 | 0.119 | 0.100 | | | | |
| 0.113 | -0.031 | 0.000 | 0.000 | 0.037 | 0.067 | 0.000 | 0.094 | 0.062 | | |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|--------|--------|-------|
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | GLN | 17 | 0.1850 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CB | CG | CD | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD | CG | CD | OE1 | | | | | | | |
| 0.9410 | 0.9590 | 19. | | | | | | | | |
| 4.292 | 0.000 | -0.068 | 0.000 | 0.000 | -0.289 | 0.000 | 0.000 | -0.108 | -0.046 | 0.000 |
| 0.044 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.059 | 0.429 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OE1 | CD | OE1 | NE2 | | | | | | | |
| 0.9680 | 0.8300 | 43. | | | | | | | | |
| 6.135 | 0.000 | -0.056 | 0.000 | -0.054 | -0.080 | 0.000 | 0.038 | -0.072 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | -0.058 | 0.000 | 0.000 | 0.060 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| NE2 | CD | NE2 | HE2A | | | | | | | |
| 0.9750 | 0.9960 | 54. | | | | | | | | |
| 5.172 | 0.000 | -0.089 | 0.031 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.071 | 0.000 | 0.000 |
| -0.042 | 0.044 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.186 | -0.049 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG1 | CG | HG1 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2 | CG | HG2 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HE2A | NE2 | HE2A | HE2B | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HE2B | NE2 | HE2B | HE2 | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | GLH | 16 | 0.0000 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CG | CB | CG | CD | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|-------------------|-------------|-------|---------|-------------|-------------|-------------|-------|-------|-------|-------|
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000-0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000-0.165-0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD | CG | CD | OE1 | | | | | | | |
| 0.9820 | 1.0100 | 18. | | | | | | | | |
| 3.891 | 0.000 | 0.000 | 0.080 | 0.000-0.206 | 0.000-0.086 | 0.072-0.037 | | | | |
| 0.052-0.035 | 0.068 | 0.038 | 0.000 | 0.277-0.059 | | | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OE1 | CD | OE1 | OE2 | | | | | | | |
| 0.9720 | 1.0240 | 42. | | | | | | | | |
| 6.311 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.032 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OE2 | CD | OE2 | OE1 | | | | | | | |
| 0.9780 | 0.9770 | 39. | | | | | | | | |
| 6.294 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.105 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG1 | CG | HG1 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG2 | CG | HG2 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE | OE2 | HD | OE1 | | | | | | | |
| 1.2950 | 1.3660 | 80. | | | | | | | | |
| 0.648 | 0.000 | 0.072 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | GLU | 15 | -0.6760 | C | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000-0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CB | CG | CD | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD | CG | CD | OE1 | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9270 | 17. | | | | | | | |
| 4.112 | 0.000 | -0.063 | 0.000 | 0.000 | -0.309 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.454 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OE1 | CD | OE1 | OE2 | | | | | | |
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | -0.034 | 0.000 | 0.000 | -0.042 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OE2 | CD | OE2 | OE1 | | | | | | |
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | -0.034 | 0.000 | 0.000 | -0.042 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG1 | CG | HG1 | CB | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2 | CG | HG2 | CB | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | GLY | 7 | -0.0970 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9910 | 0.9470 | 3. | | | | | | | | |
| 4.224 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.035 | 0.000 | |
| 0.000 | -0.170 | -0.215 | 0.000 | 0.000 | 0.243 | 0.064 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA1 | CA | HA1 | C | | | | | | | |
| 1.1770 | 1.0010 | 75. | | | | | | | | |
| 0.799 | 0.000 | 0.116 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA2 | CA | HA2 | C | | | | | | | |
| 1.1770 | 1.0010 | 75. | | | | | | | | |
| 0.799 | 0.000 | 0.116 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | HID | 17 | -0.3980 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|--------|
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CD2 | CG | ND1 | | | | | | |
| 1.0210 | 0.9680 | 25. | | | | | | | |
| 4.028 | 0.000 | 0.068 | -0.034 | 0.000 | -0.066 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.063 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.241 | 0.103 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| ND1 | CG | ND1 | CE1 | | | | | | |
| 0.9730 | 0.9510 | 62. | | | | | | | |
| 5.525 | 0.000 | -0.069 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.082 | -0.048 |
| 0.000 | 0.000 | -0.071 | 0.000 | 0.000 | 0.185 | 0.082 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD2 | CG | CD2 | NE2 | | | | | | |
| 1.0210 | 0.9680 | 26. | | | | | | | |
| 4.028 | 0.000 | 0.068 | -0.034 | 0.000 | -0.066 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.063 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.241 | 0.103 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CE1 | ND1 | CE1 | NE2 | | | | | | |
| 1.0350 | 1.0730 | 27. | | | | | | | |
| 3.933 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.125 | 0.000 | 0.000 | -0.073 | 0.083 |
| 0.000 | -0.040 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.283 | 0.085 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| NE2 | CD2 | NE2 | CE1 | | | | | | |
| 0.9930 | 0.8460 | 63. | | | | | | | |
| 5.255 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.048 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.256 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD1 | ND1 | HD1 | CG | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 87. | | | | | | | |
| 0.818 | 0.000 | 0.217 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD2 | CD2 | HD2 | CG | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 84. | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|--------|
| 0.894 | 0.000 | 0.160 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE1 | CE1 | HE1 | CG | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 86. | | | | | | | |
| 0.894 | 0.000 | 0.160 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | HIE | 17 | -0.3980 | C | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CD2 | CG | ND1 | | | | | | |
| 1.0210 | 0.9680 | 25. | | | | | | | |
| 4.028 | 0.000 | 0.068 | -0.034 | 0.000 | -0.066 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.063 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.241 | 0.103 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| ND1 | CG | ND1 | CE1 | | | | | | |
| 0.9730 | 0.9510 | 62. | | | | | | | |
| 5.525 | 0.000 | -0.069 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.082 | -0.048 |
| 0.000 | 0.000 | -0.071 | 0.000 | 0.000 | 0.185 | 0.082 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD2 | CG | CD2 | NE2 | | | | | | |
| 1.0210 | 0.9680 | 26. | | | | | | | |
| 4.028 | 0.000 | 0.068 | -0.034 | 0.000 | -0.066 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.063 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.241 | 0.103 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CE1 | ND1 | CE1 | NE2 | | | | | | |
| 1.0350 | 1.0730 | 27. | | | | | | | |
| 3.933 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.125 | 0.000 | 0.000 | -0.073 | 0.083 |
| 0.000 | -0.040 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.283 | 0.085 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| NE2 | CD2 | NE2 | CE1 | | | | | | |
| 0.9930 | 0.8460 | 63. | | | | | | | |
| 5.255 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.048 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.256 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD2 | CD2 | HD2 | CG | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 84. | | | | | | | |
| 0.894 | 0.000 | 0.160 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE1 | CE1 | HE1 | ND1 | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 86. | | | | | | | |
| 0.894 | 0.000 | 0.160 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE2 | CE2 | HE2 | ND1 | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 87. | | | | | | | |
| 0.818 | 0.000 | 0.217 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | HIP | 18 | 0.6530 | C | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CD2 | CG | ND1 | | | | | | |
| 1.0450 | 0.9940 | 28. | | | | | | | |

RES MET 17 -0.1050 N
C O C +N
0.9980 0.9410 1.
3.976 0.000 0.102 0.000 0.000-0.304 0.000 0.000 0.102 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.411 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

O C O +N
0.9770 0.9600 36.
6.307 0.000-0.075 0.000 0.000-0.078 0.000 0.000-0.070 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.039 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

N -C N CA
0.9870 0.8670 51.
5.312 0.000 0.000-0.072 0.000-0.050 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.260 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

CA C CA N
0.9930 0.9160 2.
4.111 0.000 0.000-0.049 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000-0.171-0.261 0.000 0.000 0.260 0.057
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

CB CA CB CG
0.9890 0.9110 7.
4.185 0.000-0.053 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000-0.165-0.226 0.000 0.000 0.242 0.065
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

CG CB CG SD
0.9570 0.9550 22.
4.592 0.000 0.000 0.000-0.048 0.000 0.000 0.049 0.000 0.086
0.000-0.177-0.246 0.039 0.000 0.263 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

SD CG SD CE
1.0020 1.0630 96.
6.030 0.055 0.000 0.000 0.063 0.110 0.031 0.056-0.085 0.077
-0.030-0.087-0.072-0.042 0.038 0.162 0.140
0.078-0.031 0.000 0.000 0.000-0.043 0.038 0.138 0.000

CE SD CE HE1
0.9840 0.8830 5.
4.295 0.000-0.093 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000-0.226-0.140 0.000 0.000 0.265 0.054
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

H0 N H0 C
1.2080 1.0170 72.
0.680 0.000 0.166 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

HA CA HA C
1.1820 1.0910 74.
0.804 0.000 0.107 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

HB1 CB HB1 CA
1.1800 1.0860 70.
0.824 0.000 0.126 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

HB2 CB HB2 CA
1.1800 1.0860 70.
0.824 0.000 0.126 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|-------|-------|-------|
| CD2 | CE1 | CD2 | CE2 | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CE1 | CD2 | CE1 | CD1 | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CE2 | CD1 | CE2 | CZ | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CZ | CG | CZ | CE1 | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H0 | N | H0 | C | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD1 | CD1 | HD1 | CE1 | | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD2 | CD2 | HD2 | CG | | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE1 | CE1 | HE1 | CZ | | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HE2 | CE2 | HE2 | CD2 | | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HZ | CZ | HZ | CE2 | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | PRO | 14 | 0.0800 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 1.0010 | 0.9070 | 52. | | | | | | | | |
| 5.252 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.058 | 0.045 | -0.061 | 0.000 | -0.103 | 0.000 | 0.000 |
| 0.056 | 0.000 | 0.000 | 0.034 | -0.049 | 0.170 | 0.067 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 1.0120 | 0.9820 | 4. | | | | | | | | |
| 3.992 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | 0.000 | 0.052 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.049 | 0.000 |
| 0.000 | -0.178 | -0.152 | 0.000 | -0.032 | 0.187 | 0.064 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CB | CG | CD | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD | CG | CD | N | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1600 | 1.0000 | 76. | | | | | | | | |
| 0.894 | 0.000 | 0.160 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB1 | CB | HB1 | HB2 | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HB2 | CB | HB2 | HB1 | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD1 | CD | HD1 | HD2 | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HD2 | CD | HD2 | HD1 | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1800 | 1.0860 | 70. | | | | | | | | |
| 0.824 | 0.000 | 0.126 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG | OG | HG | CB | | | | | | | |
| 1.1880 | 1.1000 | 79. | | | | | | | | |
| 0.657 | 0.000 | 0.099 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | THR | 14 | -0.1640 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | OG1 | | | | | | | |
| 0.9920 | 0.9290 | 8. | | | | | | | | |
| 4.097 | 0.000 | -0.079 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.193 | -0.231 | 0.000 | 0.000 | 0.206 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| OG1 | CB | OG1 | HG1 | | | | | | | |
| 0.9720 | 0.9310 | 37. | | | | | | | | |
| 6.589 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.109 | 0.000 | 0.000 | -0.082 | 0.000 | |
| 0.000 | -0.041 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.096 | 0.053 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CG2 | CB | CG2 | HG2A | | | | | | | |
| 0.9840 | 0.8830 | 5. | | | | | | | | |
| 4.295 | 0.000 | -0.093 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.226 | -0.140 | 0.000 | 0.000 | 0.265 | 0.054 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| H0 | N | H0 | CA | | | | | | | |
| 1.2080 | 1.0170 | 72. | | | | | | | | |
| 0.680 | 0.000 | 0.166 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HA | CA | HA | C | | | | | | | |
| 1.1820 | 1.0910 | 74. | | | | | | | | |
| 0.804 | 0.000 | 0.107 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HB | CB | HB | CA | | | | | | | |
| 1.1800 | 1.0690 | 71. | | | | | | | | |
| 0.819 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG1 | OG1 | HG1 | CB | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|
| 1.1880 | 1.1000 | 79. | | | | | | | | |
| 0.657 | 0.000 | 0.099 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2A | CG2 | HG2A | HG2B | | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2B | CG2 | HG2B | HG2C | | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| HG2C | CG2 | HG2C | HG2B | | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| RES | TRP | 24 | 0.1110 | N | | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| O | C | O | +N | | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| N | -C | N | CA | | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CA | C | CA | N | | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CB | CA | CB | CB | | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CG | CB | CG | CD2 | | | | | | | |
| 0.9950 | 0.8030 | 31. | | | | | | | | |
| 4.367 | 0.000 | 0.138 | 0.044 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.059 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.372 | 0.187 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CD1 | CG | CD1 | NE1 | | | | | | | |
| 1.0080 | 1.0410 | 32. | | | | | | | | |
| 4.038 | 0.000 | -0.054 | 0.000 | 0.000 | -0.193 | 0.000 | 0.000 | 0.031 | 0.064 | |
| 0.000 | 0.069 | -0.060 | 0.000 | 0.000 | 0.227 | 0.053 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| NE1 | CD1 | NE1 | CE2 | | | | | | | |
| 0.9960 | 0.7790 | 66. | | | | | | | | |
| 5.333 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | 0.000 | -0.124 | 0.000 | 0.000 | -0.059 | 0.091 | |
| 0.000 | 0.030 | 0.031 | 0.000 | 0.000 | 0.294 | 0.000 | | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | |
| CD2 | CH2 | CD2 | CE3 | | | | | | | |

0.9970 0.8760 33.
 3.864 0.000-0.036-0.054 0.000-0.193 0.000 0.000 0.000-0.096
 0.000-0.041 0.000 0.000 0.000 0.374 0.037
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 CE2 CD2 CE2 CZ2
 1.0020 0.7090 34.
 4.113 0.000 0.133 0.183 0.000-0.333 0.000 0.000 0.103 0.000
 0.000-0.083-0.050 0.000 0.000 0.483-0.294
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 CE3 CZ2 CE3 CZ3
 0.9940 0.9260 12.
 4.040 0.000 0.000 0.000 0.000-0.246 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000-0.329 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 CZ2 CE3 CZ2 CE2
 0.9890 0.9290 11.
 4.155 0.000 0.000 0.000 0.000-0.247 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000-0.334 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 CZ3 CE2 CZ3 CH2
 0.9890 0.9290 11.
 4.155 0.000 0.000 0.000 0.000-0.247 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000-0.334 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 CH2 CD2 CH2 CZ2
 0.9890 0.9290 11.
 4.155 0.000 0.000 0.000 0.000-0.247 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000-0.334 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 H0 N H0 CA
 1.2080 1.0170 72.
 0.680 0.000 0.166 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HA CA HA C
 1.1820 1.0910 74.
 0.804 0.000 0.107 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HB1 CB HB1 CA
 1.1800 1.0860 70.
 0.824 0.000 0.126 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HB2 CB HB2 CA
 1.1800 1.0860 70.
 0.824 0.000 0.126 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HD1 CD1 HD1 CG
 1.0760 1.0790 92.
 0.732 0.000 0.116 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HE1 NE1 HE1 CD1
 1.0350 0.7250 93.
 0.594 0.000 0.230 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
 HE3 CE3 HE3 CD2
 1.1070 0.9660 78.

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HZ2 | CZ2 | HZ2 | CE2 | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HZ3 | CZ3 | HZ3 | CE3 | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HH2 | CH2 | HH2 | CZ2 | | | | | | |
| 1.1070 | 0.9660 | 78. | | | | | | | |
| 0.830 | 0.000 | 0.175 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | TYR | 21 | -0.0220 | N | | | | | |
| C | O | C | +N | | | | | | |
| 0.9980 | 0.9410 | 1. | | | | | | | |
| 3.976 | 0.000 | 0.102 | 0.000 | 0.000 | -0.304 | 0.000 | 0.000 | 0.102 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.411 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| O | C | O | +N | | | | | | |
| 0.9770 | 0.9600 | 36. | | | | | | | |
| 6.307 | 0.000 | -0.075 | 0.000 | 0.000 | -0.078 | 0.000 | 0.000 | -0.070 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.039 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| N | -C | N | CA | | | | | | |
| 0.9870 | 0.8670 | 51. | | | | | | | |
| 5.312 | 0.000 | 0.000 | -0.072 | 0.000 | -0.050 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CA | C | CA | N | | | | | | |
| 0.9930 | 0.9160 | 2. | | | | | | | |
| 4.111 | 0.000 | 0.000 | -0.049 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.171 | -0.261 | 0.000 | 0.000 | 0.260 | 0.057 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CB | CA | CB | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9110 | 7. | | | | | | | |
| 4.185 | 0.000 | -0.053 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.165 | -0.226 | 0.000 | 0.000 | 0.242 | 0.065 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CG | CZ | CG | CD2 | | | | | | |
| 0.9940 | 0.9260 | 12. | | | | | | | |
| 4.040 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.246 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.329 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD1 | CE2 | CD1 | CG | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CD2 | CE1 | CD2 | CE2 | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | |
| 4.155 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.247 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -0.334 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| CE1 | CD2 | CE1 | CD1 | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9290 | 11. | | | | | | | |

| | | | | | | | | | |
|--------|--------|--------|---------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG1C | CG1 | HG1C | HG1B | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG2A | CG2 | HG2A | HG2B | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG2B | CG2 | HG2B | HG2C | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| HG2C | CG2 | HG2C | HG2B | | | | | | |
| 1.1260 | 1.0470 | 69. | | | | | | | |
| 0.839 | 0.000 | 0.164 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | CO2 | 3 | -0.8200 | N | | | | | |
| CT | CA | CT | OT2 | | | | | | |
| 0.9890 | 0.9270 | 17. | | | | | | | |
| 4.112 | 0.000 | -0.063 | 0.000 | 0.000 | -0.309 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.454 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OT1 | CT | OT1 | OT2 | | | | | | |
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | -0.034 | 0.000 | 0.000 | -0.042 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| OT2 | CT | OT2 | OT1 | | | | | | |
| 0.9750 | 0.8430 | 41. | | | | | | | |
| 6.354 | 0.000 | -0.067 | 0.000 | 0.000 | -0.034 | 0.000 | 0.000 | -0.042 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.057 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | NH3 | 4 | 0.6670 | C | | | | | |
| NT | CA | NT | H1 | | | | | | |
| 0.9800 | 0.8370 | 53. | | | | | | | |
| 5.560 | 0.000 | -0.079 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | -0.162 | -0.201 | 0.000 | 0.000 | 0.197 | 0.051 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H1 | NT | H1 | H2 | | | | | | |
| 1.2810 | 1.1370 | 73. | | | | | | | |
| 0.591 | 0.000 | 0.115 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H2 | NT | H2 | H3 | | | | | | |
| 1.2810 | 1.1370 | 73. | | | | | | | |
| 0.591 | 0.000 | 0.115 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| H3 | NT | H3 | H2 | | | | | | |
| 1.2810 | 1.1370 | 73. | | | | | | | |
| 0.591 | 0.000 | 0.115 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | | | |
| 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 |
| RES | HOH | 3 | 0.0320 | N | | | | | |
| O | H1 | O | H2 | | | | | | |

```
0.9710 0.7790 48.
6.447 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.089 0.039
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
H1      O      H1      H2
1.1690 1.0650 94.
0.777 0.000 0.165 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
H2      O      H2      H1
1.1690 1.0650 94.
0.777 0.000 0.165 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
```