

Supplementary data

Legends to Table 1 and 2:

PAR4-LGR5 interface. For PAR4-LGR5 complex our PDBePISA analysis reveals a substantial buried interface area ($1118.1 \text{ \AA}^2$) with a favorable solvation free energy gain ($\Delta iG = -23.3 \text{ kcal/mol}$), supported by five hydrogen bonds, consistent with a potentially stable protein–protein association. HADDOCK refinement further supports an energetically favorable interaction model with a HADDOCK score of -107.7 and a large, buried area ($2335.6 \text{ \AA}^2$). The interaction energy profile indicates significant contributions from both van der Waals interactions (-58.8), reflecting strong shape complementarity and close atomic packing, and electrostatic interactions (-66.3), indicating favorable charge complementarity at the interface. Collectively, these parameters suggest that the PAR4–LGR5 interface possesses structural and energetic features consistent with a stable and biologically plausible complex between PAR4-LGR5.

GPR25-LGR5 interface. PDBePISA analysis of the predicted LGR5-GPR25 complex identifies an interface area of $861.3 \text{ \AA}^2$ with a moderate solvation free energy gain ($\Delta iG = -15.3 \text{ kcal/mol}$), supported by two hydrogen bonds, one salt bridge intermolecular interface. HADDOCK refinement yields a score of -94.1 with a buried surface area of $1821.0 \text{ \AA}^2$, suggesting the formation of a stable docking configuration within the computational model. The interaction energetics show contributions from van der Waals interactions (-49.6), reflecting moderate packing complementarity, and electrostatic interactions (-82.0), indicating the presence of strong charge-based interactions at the interface. Overall, these computational features support the interaction between LGR5 and GPR25.

Table 1:

PDBePISA Analysis

PAR4-LGR5

Parameter	PAR4	LGR5	Complex
Interface atoms	112	104	—
Interface residues	40	35	—
Surface area (Å ²)	23424	54474	—
Interface area (Å ²)	—	—	1118.1
ΔiG (kcal/mol)	—	—	-23.3
Hydrogen bonds	—	—	5

Category	Parameter	PAR4	LGR5
Atoms	Interface	112 (3.9%)	104 (1.5%)
	Surface	1762 (60.8%)	4240 (60.3%)
	Total	2898	7033
Residues	Interface	40 (10.4%)	35 (3.9%)
	Surface	357 (92.7%)	843 (92.9%)
	Total	385	907
Surface Area (Å²)	Interface	1094.3 (4.7%)	1141.8 (2.1%)
	Total	23423.5	54474.1
Solvation Energy (kcal/mol)	Isolated	-343.5	-843.5
	Gain (complex)	-8.7	-14.6
	Average gain	-8.5	-6.0

Hydrogen Bonds

#	PAR4 Residue	Distance (Å)	LGR5 Residue
1	SER308 (OG)	3.58	MET723 (SD)
2	ALA281 (N)	3.84	CYS906 (SG)
3	SER308 (O)	2.85	ASN792 (ND2)
4	HIS280 (ND1)	2.44	LEU907 (O)
5	HIS280 (NE2)	2.63	LEU907 (O)

GPR25-LGR5

PDBePISA Analysis

Parameter	GPR25	LGR5	Complex
Interface atoms	85	104	—
Interface residues	26	32	—
Surface area (Å ²)	19494	53969	—
Interface area (Å ²)	—	—	861.3
ΔiG (kcal/mol)	—	—	-15.3
Hydrogen bonds	—	—	2
Salt bridges	—	—	1
Category	Parameter	GPR25	LGR5
Atoms	Interface	85 (3.1%)	104 (1.5%)
	Surface	1681 (61.5%)	4194 (59.6%)
	Total	2733	7033
Residues	Interface	26 (7.2%)	32 (3.5%)
	Surface	343 (95.0%)	835 (92.1%)
	Total	361	907
Surface Area (Å ²)	Interface	853.8 (4.4%)	868.9 (1.6%)
	Total	19493.9	53968.7
Solvation Energy (kcal/mol)	Isolated	-316.2	-843.5
	Gain (complex)	-8.9	-6.4
	Average gain	-6.2	-6.1

HADDOCK	Score	-94.1 ± 0.0
	Van der Waals	-49.6
	Electrostatic	-82.0
	Desolvation	-28.1
	Buried Surface Area (Å ²)	1821.0

Hydrogen Bonds

#	GPR25 Residue	Distance (Å)	LGR5 Residue
1	TYR39 (OH)	2.30	GLU799 (OE2)
2	ARG325 (NH1)	3.56	ASP752 (OD1)

Salt Bridge

#	GPR25 Residue	Distance (Å)	LGR5 Residue
1	ARG325 (NH1)	3.56	ASP752 (OD1)

Table 2:
Interface Summary

	Structure 1		Structure 2
<u>Selection range</u>	PAR4	PAR4	LGR5
class	Protein	Protein	
symmetry opera	x,y,z		
symmetry ID	1_555		0_555
<u>Number of atoms</u>			
interface	112	3.90%	104
surface	1762	60.80%	4240
total	2898	100.00%	7033
<u>Number of residues</u>			
interface	40	10.40%	35
surface	357	92.70%	843
total	385	100.00%	907
<u>Solvent-accessible area, Å</u>			
interface	1094.3	4.70%	1141.8
total	23423.5	100.00%	54474.1
<u>Solvation energy, kcal/mol</u>			
isolated structur	-343.5	100.00%	-843.5
gain on complex	-8.7	2.50%	-14.6
average gain	-8.5	2.50%	-6

Hydrogen bonds XML

##	PAR4	Dist. [Å]	LGR5
1	A:SER 308 [OG]	3.58	B:MET 723 [
2	A:ALA 281 [N]	3.84	B:CYS 906 [
3	A:SER 308 [O]	2.85	B:ASN 792 [
4	A:HIS 280 [ND1]	2.44	B:LEU 907 [
5	A:HIS 280 [NE2]	2.63	B:LEU 907 [

Interfacing residues

	Inaccessible residues	
	Solvent-accessible residues	
ASA	Accessible Surface Area, Å ²	BSA

##	PAR4	HSDC	ASA
1	A:MET 1		243.26
2	A:TRP 2		250.21
3	A:GLY 3		69.05
4	A:ARG 4		216.96
5	A:LEU 5		165.94
6	A:LEU 6		137.98
7	A:LEU 7		162.88

8	A:TRP	8	205.67
9	A:PRO	9	108.43
10	A:LEU	10	152.51
11	A:VAL	11	126.28
12	A:LEU	12	127.12
13	A:GLY	13	62.38
14	A:PHE	14	168.69
15	A:SER	15	97.65
16	A:LEU	16	169.20
17	A:SER	17	100.68
18	A:GLY	18	58.16
19	A:GLY	19	68.55
20	A:THR	20	117.70
21	A:GLN	21	175.00
22	A:THR	22	111.07
23	A:PRO	23	122.10
24	A:SER	24	99.88
25	A:VAL	25	127.06
26	A:TYR	26	216.29
27	A:ASP	27	116.88
28	A:GLU	28	174.49
29	A:SER	29	95.04
30	A:GLY	30	71.24
31	A:SER	31	108.31
32	A:THR	32	133.61
33	A:GLY	33	77.40
34	A:GLY	34	67.31
35	A:GLY	35	74.35
36	A:ASP	36	135.43
37	A:ASP	37	136.79
38	A:SER	38	97.25
39	A:THR	39	109.50
40	A:PRO	40	121.54
41	A:SER	41	84.45
42	A:ILE	42	160.37
43	A:LEU	43	64.45
44	A:PRO	44	19.94
45	A:ALA	45	14.06
46	A:PRO	46	0.33
47	A:ARG	47	25.12
48	A:GLY	48	0.83
49	A:TYR	49	3.36
50	A:PRO	50	8.37
51	A:GLY	51	0.00
52	A:GLN	52	83.71
53	A:VAL	53	23.35
54	A:CYS	54	36.36
55	A:ALA	55	86.40
56	A:ASN	56	154.71

57	A:ASP	57	59.69
58	A:SER	58	76.46
59	A:ASP	59	56.10
60	A:THR	60	15.66
61	A:LEU	61	0.00
62	A:GLU	62	68.09
63	A:LEU	63	14.79
64	A:PRO	64	64.68
65	A:ASP	65	115.13
66	A:SER	66	63.59
67	A:SER	67	2.58
68	A:ARG	68	50.17
69	A:ALA	69	68.32
70	A:LEU	70	75.09
71	A:LEU	71	1.34
72	A:LEU	72	50.47
73	A:GLY	73	24.27
74	A:TRP	74	169.48
75	A:VAL	75	49.13
76	A:PRO	76	8.65
77	A:THR	77	20.80
78	A:ARG	78	159.54
79	A:LEU	79	61.25
80	A:VAL	80	0.00
81	A:PRO	81	4.64
82	A:ALA	82	63.24
83	A:LEU	83	27.02
84	A:TYR	84	2.45
85	A:GLY	85	21.78
86	A:LEU	86	90.10
87	A:VAL	87	0.00
88	A:LEU	88	48.58
89	A:VAL	89	109.52
90	A:VAL	90	50.68
91	A:GLY	91	0.00
92	A:LEU	92	56.85
93	A:PRO	93	73.38
94	A:ALA	94	10.27
95	A:ASN	95	0.00
96	A:GLY	96	26.19
97	A:LEU	97	52.47
98	A:ALA	98	0.00
99	A:LEU	99	42.42
100	A:TRP	100	113.58
101	A:VAL	101	0.00
102	A:LEU	102	10.16
103	A:ALA	103	62.53
104	A:THR	104	82.15
105	A:GLN	105	55.16

106	A:ALA 106	18.56
107	A:PRO 107	70.91
108	A:ARG 108	245.45
109	A:LEU 109	97.97
110	A:PRO 110	29.75
111	A:SER 111	28.81
112	A:THR 112	11.56
113	A:MET 113	53.06
114	A:LEU 114	3.12
115	A:LEU 115	32.07
116	A:MET 116	60.76
117	A:ASN 117	29.27
118	A:LEU 118	0.00
119	A:ALA 119	0.00
120	A:ALA 120	25.10
121	A:ALA 121	0.00
122	A:ASP 122	0.49
123	A:LEU 123	34.80
124	A:LEU 124	68.49
125	A:LEU 125	3.85
126	A:ALA 126	0.17
127	A:LEU 127	96.56
128	A:ALA 128	12.63
129	A:LEU 129	0.00
130	A:PRO 130	55.04
131	A:PRO 131	43.80
132	A:ARG 132	13.68
133	A:ILE 133	22.09
134	A:ALA 134	29.53
135	A:TYR 135	0.00
136	A:HIS 136	2.08
137	A:LEU 137	109.66
138	A:ARG 138	138.98
139	A:GLY 139	14.99
140	A:GLN 140	0.91
141	A:ARG 141	102.21
142	A:TRP 142	11.96
143	A:PRO 143	62.21
144	A:PHE 144	101.10
145	A:GLY 145	37.91
146	A:GLU 146	48.39
147	A:ALA 147	70.61
148	A:ALA 148	34.51
149	A:CYS 149	0.00
150	A:ARG 150	61.39
151	A:LEU 151	120.87
152	A:ALA 152	12.49
153	A:THR 153	0.84
154	A:ALA 154	11.47

155	A:ALA 155	30.84
156	A:LEU 156	2.34
157	A:TYR 157	3.36
158	A:GLY 158	8.65
159	A:HIS 159	38.95
160	A:MET 160	2.52
161	A:TYR 161	1.61
162	A:GLY 162	0.34
163	A:SER 163	2.17
164	A:VAL 164	0.67
165	A:LEU 165	11.66
166	A:LEU 166	0.67
167	A:LEU 167	2.17
168	A:ALA 168	13.27
169	A:ALA 169	7.41
170	A:VAL 170	5.19
171	A:SER 171	0.00
172	A:LEU 172	60.40
173	A:ASP 173	10.85
174	A:ARG 174	59.59
175	A:TYR 175	44.43
176	A:LEU 176	21.39
177	A:ALA 177	29.49
178	A:LEU 178	78.62
179	A:VAL 179	38.05
180	A:HIS 180	73.91
181	A:PRO 181	78.87
182	A:LEU 182	166.25
183	A:ARG 183	173.92
184	A:ALA 184	5.41
185	A:ARG 185	227.69
186	A:ALA 186	90.83
187	A:LEU 187	84.64
188	A:ARG 188	70.84
189	A:GLY 189	28.46
190	A:ARG 190	187.95
191	A:ARG 191	222.01
192	A:LEU 192	64.06
193	A:ALA 193	3.73
194	A:LEU 194	83.58
195	A:GLY 195	36.86
196	A:LEU 196	40.15
197	A:CYS 197	5.53
198	A:MET 198	114.77
199	A:ALA 199	54.44
200	A:ALA 200	6.36
201	A:TRP 201	72.46
202	A:LEU 202	119.95
203	A:MET 203	73.10

204	A:ALA 204	3.21
205	A:ALA 205	61.21
206	A:ALA 206	64.16
207	A:LEU 207	16.69
208	A:ALA 208	10.17
209	A:LEU 209	109.32
210	A:PRO 210	37.25
211	A:LEU 211	0.00
212	A:THR 212	41.53
213	A:LEU 213	114.86
214	A:GLN 214	60.12
215	A:ARG 215	85.38
216	A:GLN 216	0.00
217	A:THR 217	11.22
218	A:PHE 218	10.24
219	A:ARG 219	125.24
220	A:LEU 220	0.70
221	A:ALA 221	6.53
222	A:ARG 222	206.31
223	A:SER 223	22.59
224	A:ASP 224	88.15
225	A:ARG 225	54.41
226	A:VAL 226	55.59
227	A:LEU 227	0.00
228	A:CYS 228	0.00
229	A:HIS 229	4.68
230	A:ASP 230	0.96
231	A:ALA 231	0.00
232	A:LEU 232	1.17
233	A:PRO 233	18.24
234	A:LEU 234	18.08
235	A:ASP 235	86.02
236	A:ALA 236	17.20
237	A:GLN 237	0.00
238	A:ALA 238	40.05
239	A:SER 239	84.27
240	A:HIS 240	34.94
241	A:TRP 241	0.00
242	A:GLN 242	49.54
243	A:PRO 243	62.92
244	A:ALA 244	9.28
245	A:PHE 245	2.05
246	A:THR 246	42.39
247	A:CYS 247	59.86
248	A:LEU 248	0.17
249	A:ALA 249	0.00
250	A:LEU 250	85.52
251	A:LEU 251	75.21
252	A:GLY 252	0.00

253	A:CYS 253	0.00
254	A:PHE 254	58.33
255	A:LEU 255	95.83
256	A:PRO 256	5.35
257	A:LEU 257	10.48
258	A:LEU 258	100.57
259	A:ALA 259	40.81
260	A:MET 260	0.49
261	A:LEU 261	90.11
262	A:LEU 262	114.67
263	A:CYS 263	14.71
264	A:TYR 264	1.02
265	A:GLY 265	31.98
266	A:ALA 266	35.66
267	A:THR 267	1.15
268	A:LEU 268	37.66
269	A:HIS 269	134.48
270	A:THR 270	40.48
271	A:LEU 271	5.77
272	A:ALA 272	63.34
273	A:ALA 273	83.28
274	A:SER 274	58.60
275	A:GLY 275	39.37
276	A:ARG 276	242.66
277	A:ARG 277	229.38
278	A:TYR 278	107.23
279	A:GLY 279	32.41
280	A:HIS 280	S127.66
281	A:ALA 281	H37.62
282	A:LEU 282	54.24
283	A:ARG 283	178.18
284	A:LEU 284	44.37
285	A:THR 285	11.95
286	A:ALA 286	41.54
287	A:VAL 287	79.48
288	A:VAL 288	1.70
289	A:LEU 289	26.61
290	A:ALA 290	60.58
291	A:SER 291	16.28
292	A:ALA 292	3.01
293	A:VAL 293	53.62
294	A:ALA 294	64.75
295	A:PHE 295	43.27
296	A:PHE 296	3.28
297	A:VAL 297	44.67
298	A:PRO 298	61.63
299	A:SER 299	1.80
300	A:ASN 300	0.92
301	A:LEU 301	87.03

302	A:LEU 302	37.16
303	A:LEU 303	2.29
304	A:LEU 304	41.83
305	A:LEU 305	61.83
306	A:HIS 306	3.75
307	A:TYR 307	6.16
308	A:SER 308	H63.99
309	A:ASP 309	32.81
310	A:PRO 310	80.46
311	A:SER 311	43.44
312	A:PRO 312	44.69
313	A:SER 313	99.57
314	A:ALA 314	57.84
315	A:TRP 315	77.70
316	A:GLY 316	5.27
317	A:ASN 317	80.10
318	A:LEU 318	34.75
319	A:TYR 319	5.60
320	A:GLY 320	13.87
321	A:ALA 321	44.32
322	A:TYR 322	3.56
323	A:VAL 323	13.05
324	A:PRO 324	20.91
325	A:SER 325	9.73
326	A:LEU 326	10.22
327	A:ALA 327	0.00
328	A:LEU 328	84.79
329	A:SER 329	0.61
330	A:THR 330	0.00
331	A:LEU 331	22.92
332	A:ASN 332	2.34
333	A:SER 333	1.49
334	A:CYS 334	9.00
335	A:VAL 335	44.00
336	A:ASP 336	2.21
337	A:PRO 337	0.00
338	A:PHE 338	95.33
339	A:ILE 339	18.09
340	A:TYR 340	17.23
341	A:TYR 341	3.10
342	A:TYR 342	37.56
343	A:VAL 343	53.45
344	A:SER 344	48.34
345	A:ALA 345	61.35
346	A:GLU 346	128.05
347	A:PHE 347	16.08
348	A:ARG 348	122.09
349	A:ASP 349	82.66
350	A:LYS 350	57.55

351	A:VAL 351	15.05
352	A:ARG 352	164.99
353	A:ALA 353	53.32
354	A:GLY 354	14.52
355	A:LEU 355	99.70
356	A:PHE 356	156.39
357	A:GLN 357	149.56
358	A:ARG 358	226.58
359	A:SER 359	89.82
360	A:PRO 360	118.60
361	A:GLY 361	50.44
362	A:ASP 362	132.55
363	A:THR 363	117.95
364	A:VAL 364	124.79
365	A:ALA 365	83.35
366	A:SER 366	93.04
367	A:LYS 367	183.92
368	A:ALA 368	87.39
369	A:SER 369	100.50
370	A:ALA 370	92.51
371	A:GLU 371	166.94
372	A:GLY 372	71.37
373	A:GLY 373	74.57
374	A:SER 374	111.90
375	A:ARG 375	238.21
376	A:GLY 376	76.37
377	A:MET 377	185.00
378	A:GLY 378	81.09
379	A:THR 379	122.44
380	A:HIS 380	178.79
381	A:SER 381	99.60
382	A:SER 382	92.92
383	A:LEU 383	160.72
384	A:LEU 384	157.48
385	A:GLN 385	235.99



1.50%
60.30%
100.00%

3.90%
92.90%
100.00%

2.10%
100.00%

100.00%
1.70%
0.70%

SD]

SG]

O]

O]

Buried Surface Area, Å²

HSDC

residues making **H**ydrogen/**D**isulphide bond
Salt bridge or **C**ovalent link

Interfacing residues

ΔG

Solvation energy

<u>BSA</u>	<u>ΔiG</u>
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00

<u>##</u>	<u>LGR5</u>
1	B:MET 1
2	B:ASP 2
3	B:THR 3
4	B:SER 4
5	B:ARG 5
6	B:LEU 6
7	B:GLY 7

0.00	0.00
11.89	0.19
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
34.64	0.55
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
62.53	0.19
0.00	0.00
0.00	0.00
9.21	0.15
12.06	0.19
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
16.36	-0.19
35.03	0.44
0.00	0.00
79.39	0.66
19.84	0.27
0.00	0.00
0.00	0.00
23.77	0.38
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
1.00	0.02
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
12.22	0.20
0.00	0.00
0.00	0.00
0.00	0.00
57.50	0.92

253	B:ILE 253
254	B:ARG 254
255	B:THR 255
256	B:LEU 256
257	B:SER 257
258	B:ASN 258
259	B:LEU 259
260	B:LYS 260
261	B:GLU 261
262	B:LEU 262
263	B:GLY 263
264	B:PHE 264
265	B:HIS 265
266	B:SER 266
267	B:ASN 267
268	B:ASN 268
269	B:ILE 269
270	B:ARG 270
271	B:SER 271
272	B:ILE 272
273	B:PRO 273
274	B:GLU 274
275	B:LYS 275
276	B:ALA 276
277	B:PHE 277
278	B:VAL 278
279	B:GLY 279
280	B:ASN 280
281	B:PRO 281
282	B:SER 282
283	B:LEU 283
284	B:ILE 284
285	B:THR 285
286	B:ILE 286
287	B:HIS 287
288	B:PHE 288
289	B:TYR 289
290	B:ASP 290
291	B:ASN 291
292	B:PRO 292
293	B:ILE 293
294	B:GLN 294
295	B:PHE 295
296	B:VAL 296
297	B:GLY 297
298	B:ARG 298
299	B:SER 299
300	B:ALA 300
301	B:PHE 301

400	B:LEU 400
401	B:ARG 401
402	B:SER 402
403	B:LEU 403
404	B:ASN 404
405	B:LEU 405
406	B:ALA 406
407	B:TRP 407
408	B:ASN 408
409	B:LYS 409
410	B:ILE 410
411	B:ALA 411
412	B:ILE 412
413	B:ILE 413
414	B:HIS 414
415	B:PRO 415
416	B:ASN 416
417	B:ALA 417
418	B:PHE 418
419	B:SER 419
420	B:THR 420
421	B:LEU 421
422	B:PRO 422
423	B:SER 423
424	B:LEU 424
425	B:ILE 425
426	B:LYS 426
427	B:LEU 427
428	B:ASP 428
429	B:LEU 429
430	B:SER 430
431	B:SER 431
432	B:ASN 432
433	B:LEU 433
434	B:LEU 434
435	B:SER 435
436	B:SER 436
437	B:PHE 437
438	B:PRO 438
439	B:ILE 439
440	B:THR 440
441	B:GLY 441
442	B:LEU 442
443	B:HIS 443
444	B:GLY 444
445	B:LEU 445
446	B:THR 446
447	B:HIS 447
448	B:LEU 448

449	B:LYS 449
450	B:LEU 450
451	B:THR 451
452	B:GLY 452
453	B:ASN 453
454	B:HIS 454
455	B:ALA 455
456	B:LEU 456
457	B:GLN 457
458	B:SER 458
459	B:LEU 459
460	B:ILE 460
461	B:SER 461
462	B:SER 462
463	B:GLU 463
464	B:ASN 464
465	B:PHE 465
466	B:PRO 466
467	B:GLU 467
468	B:LEU 468
469	B:LYS 469
470	B:VAL 470
471	B:ILE 471
472	B:GLU 472
473	B:MET 473
474	B:PRO 474
475	B:TYR 475
476	B:ALA 476
477	B:TYR 477
478	B:GLN 478
479	B:CYS 479
480	B:CYS 480
481	B:ALA 481
482	B:PHE 482
483	B:GLY 483
484	B:VAL 484
485	B:CYS 485
486	B:GLU 486
487	B:ASN 487
488	B:ALA 488
489	B:TYR 489
490	B:LYS 490
491	B:ILE 491
492	B:SER 492
493	B:ASN 493
494	B:GLN 494
495	B:TRP 495
496	B:ASN 496
497	B:LYS 497

498	B:GLY 498
499	B:ASP 499
500	B:ASN 500
501	B:SER 501
502	B:SER 502
503	B:MET 503
504	B:ASP 504
505	B:ASP 505
506	B:LEU 506
507	B:HIS 507
508	B:LYS 508
509	B:LYS 509
510	B:ASP 510
511	B:ALA 511
512	B:GLY 512
513	B:MET 513
514	B:PHE 514
515	B:GLN 515
516	B:ALA 516
517	B:GLN 517
518	B:ASP 518
519	B:GLU 519
520	B:ARG 520
521	B:ASP 521
522	B:LEU 522
523	B:GLU 523
524	B:ASP 524
525	B:PHE 525
526	B:LEU 526
527	B:LEU 527
528	B:ASP 528
529	B:PHE 529
530	B:GLU 530
531	B:GLU 531
532	B:ASP 532
533	B:LEU 533
534	B:LYS 534
535	B:ALA 535
536	B:LEU 536
537	B:HIS 537
538	B:SER 538
539	B:VAL 539
540	B:GLN 540
541	B:CYS 541
542	B:SER 542
543	B:PRO 543
544	B:SER 544
545	B:PRO 545
546	B:GLY 546

547	B:PRO 547
548	B:PHE 548
549	B:LYS 549
550	B:PRO 550
551	B:CYS 551
552	B:GLU 552
553	B:HIS 553
554	B:LEU 554
555	B:LEU 555
556	B:ASP 556
557	B:GLY 557
558	B:TRP 558
559	B:LEU 559
560	B:ILE 560
561	B:ARG 561
562	B:ILE 562
563	B:GLY 563
564	B:VAL 564
565	B:TRP 565
566	B:THR 566
567	B:ILE 567
568	B:ALA 568
569	B:VAL 569
570	B:LEU 570
571	B:ALA 571
572	B:LEU 572
573	B:THR 573
574	B:CYS 574
575	B:ASN 575
576	B:ALA 576
577	B:LEU 577
578	B:VAL 578
579	B:THR 579
580	B:SER 580
581	B:THR 581
582	B:VAL 582
583	B:PHE 583
584	B:ARG 584
585	B:SER 585
586	B:PRO 586
587	B:LEU 587
588	B:TYR 588
589	B:ILE 589
590	B:SER 590
591	B:PRO 591
592	B:ILE 592
593	B:LYS 593
594	B:LEU 594
595	B:LEU 595

596	B:ILE 596
597	B:GLY 597
598	B:VAL 598
599	B:ILE 599
600	B:ALA 600
601	B:ALA 601
602	B:VAL 602
603	B:ASN 603
604	B:MET 604
605	B:LEU 605
606	B:THR 606
607	B:GLY 607
608	B:VAL 608
609	B:SER 609
610	B:SER 610
611	B:ALA 611
612	B:VAL 612
613	B:LEU 613
614	B:ALA 614
615	B:GLY 615
616	B:VAL 616
617	B:ASP 617
618	B:ALA 618
619	B:PHE 619
620	B:THR 620
621	B:PHE 621
622	B:GLY 622
623	B:SER 623
624	B:PHE 624
625	B:ALA 625
626	B:ARG 626
627	B:HIS 627
628	B:GLY 628
629	B:ALA 629
630	B:TRP 630
631	B:TRP 631
632	B:GLU 632
633	B:ASN 633
634	B:GLY 634
635	B:VAL 635
636	B:GLY 636
637	B:CYS 637
638	B:HIS 638
639	B:VAL 639
640	B:ILE 640
641	B:GLY 641
642	B:PHE 642
643	B:LEU 643
644	B:SER 644

645	B:ILE 645
646	B:PHE 646
647	B:ALA 647
648	B:SER 648
649	B:GLU 649
650	B:SER 650
651	B:SER 651
652	B:VAL 652
653	B:PHE 653
654	B:LEU 654
655	B:LEU 655
656	B:THR 656
657	B:LEU 657
658	B:ALA 658
659	B:ALA 659
660	B:LEU 660
661	B:GLU 661
662	B:ARG 662
663	B:GLY 663
664	B:PHE 664
665	B:SER 665
666	B:VAL 666
667	B:LYS 667
668	B:TYR 668
669	B:SER 669
670	B:ALA 670
671	B:LYS 671
672	B:PHE 672
673	B:GLU 673
674	B:THR 674
675	B:LYS 675
676	B:ALA 676
677	B:PRO 677
678	B:PHE 678
679	B:SER 679
680	B:SER 680
681	B:LEU 681
682	B:LYS 682
683	B:VAL 683
684	B:ILE 684
685	B:ILE 685
686	B:LEU 686
687	B:LEU 687
688	B:CYS 688
689	B:ALA 689
690	B:LEU 690
691	B:LEU 691
692	B:ALA 692
693	B:LEU 693

694	B:THR 694
695	B:MET 695
696	B:ALA 696
697	B:ALA 697
698	B:VAL 698
699	B:PRO 699
700	B:LEU 700
701	B:LEU 701
702	B:GLY 702
703	B:GLY 703
704	B:SER 704
705	B:LYS 705
706	B:TYR 706
707	B:GLY 707
708	B:ALA 708
709	B:SER 709
710	B:PRO 710
711	B:LEU 711
712	B:CYS 712
713	B:LEU 713
714	B:PRO 714
715	B:LEU 715
716	B:PRO 716
717	B:PHE 717
718	B:GLY 718
719	B:GLU 719
720	B:PRO 720
721	B:SER 721
722	B:THR 722
723	B:MET 723
724	B:GLY 724
725	B:TYR 725
726	B:MET 726
727	B:VAL 727
728	B:ALA 728
729	B:LEU 729
730	B:ILE 730
731	B:LEU 731
732	B:LEU 732
733	B:ASN 733
734	B:SER 734
735	B:LEU 735
736	B:CYS 736
737	B:PHE 737
738	B:LEU 738
739	B:MET 739
740	B:MET 740
741	B:THR 741
742	B:ILE 742

743	B:ALA 743
744	B:TYR 744
745	B:THR 745
746	B:LYS 746
747	B:LEU 747
748	B:TYR 748
749	B:CYS 749
750	B:ASN 750
751	B:LEU 751
752	B:ASP 752
753	B:LYS 753
754	B:GLY 754
755	B:ASP 755
756	B:LEU 756
757	B:GLU 757
758	B:ASN 758
759	B:ILE 759
760	B:TRP 760
761	B:ASP 761
762	B:CYS 762
763	B:SER 763
764	B:MET 764
765	B:VAL 765
766	B:LYS 766
767	B:HIS 767
768	B:ILE 768
769	B:ALA 769
770	B:LEU 770
771	B:LEU 771
772	B:LEU 772
773	B:PHE 773
774	B:THR 774
775	B:ASN 775
776	B:CYS 776
777	B:ILE 777
778	B:LEU 778
779	B:ASN 779
780	B:CYS 780
781	B:PRO 781
782	B:VAL 782
783	B:ALA 783
784	B:PHE 784
785	B:LEU 785
786	B:SER 786
787	B:PHE 787
788	B:SER 788
789	B:SER 789
790	B:LEU 790
791	B:ILE 791

792	B:ASN 792
793	B:LEU 793
794	B:THR 794
795	B:PHE 795
796	B:ILE 796
797	B:SER 797
798	B:PRO 798
799	B:GLU 799
800	B:VAL 800
801	B:ILE 801
802	B:LYS 802
803	B:PHE 803
804	B:ILE 804
805	B:LEU 805
806	B:LEU 806
807	B:VAL 807
808	B:VAL 808
809	B:VAL 809
810	B:PRO 810
811	B:LEU 811
812	B:PRO 812
813	B:ALA 813
814	B:CYS 814
815	B:LEU 815
816	B:ASN 816
817	B:PRO 817
818	B:LEU 818
819	B:LEU 819
820	B:TYR 820
821	B:ILE 821
822	B:LEU 822
823	B:PHE 823
824	B:ASN 824
825	B:PRO 825
826	B:HIS 826
827	B:PHE 827
828	B:LYS 828
829	B:GLU 829
830	B:ASP 830
831	B:LEU 831
832	B:VAL 832
833	B:SER 833
834	B:LEU 834
835	B:ARG 835
836	B:LYS 836
837	B:GLN 837
838	B:THR 838
839	B:TYR 839
840	B:VAL 840

841	B:TRP 841
842	B:THR 842
843	B:ARG 843
844	B:SER 844
845	B:LYS 845
846	B:HIS 846
847	B:PRO 847
848	B:SER 848
849	B:LEU 849
850	B:MET 850
851	B:SER 851
852	B:ILE 852
853	B:ASN 853
854	B:SER 854
855	B:ASP 855
856	B:ASP 856
857	B:VAL 857
858	B:GLU 858
859	B:LYS 859
860	B:GLN 860
861	B:SER 861
862	B:CYS 862
863	B:ASP 863
864	B:SER 864
865	B:THR 865
866	B:GLN 866
867	B:ALA 867
868	B:LEU 868
869	B:VAL 869
870	B:THR 870
871	B:PHE 871
872	B:THR 872
873	B:SER 873
874	B:SER 874
875	B:SER 875
876	B:ILE 876
877	B:THR 877
878	B:TYR 878
879	B:ASP 879
880	B:LEU 880
881	B:PRO 881
882	B:PRO 882
883	B:SER 883
884	B:SER 884
885	B:VAL 885
886	B:PRO 886
887	B:SER 887
888	B:PRO 888
889	B:ALA 889

890	B:TYR 890
891	B:PRO 891
892	B:VAL 892
893	B:THR 893
894	B:GLU 894
895	B:SER 895
896	B:CYS 896
897	B:HIS 897
898	B:LEU 898
899	B:SER 899
900	B:SER 900
901	B:VAL 901
902	B:ALA 902
903	B:PHE 903
904	B:VAL 904
905	B:PRO 905
906	B:CYS 906
907	B:LEU 907

<u>HSDC</u>	<u>ASA</u>	<u>BSA</u>	<u>ΔiG</u>
	242.97	0.00	0.00
	145.73	0.00	0.00
	125.43	0.00	0.00
	101.91	0.00	0.00
	236.32	0.00	0.00
	169.13	0.00	0.00
	65.19	0.00	0.00

124.46	0.00	0.00
171.80	0.00	0.00
152.89	0.00	0.00
101.47	0.00	0.00
150.20	0.00	0.00
106.64	0.00	0.00
118.15	0.00	0.00
152.86	0.00	0.00
148.41	0.00	0.00
153.32	0.00	0.00
161.30	0.00	0.00
87.45	0.00	0.00
124.75	0.00	0.00
60.10	0.00	0.00
66.76	0.00	0.00
97.50	0.00	0.00
83.83	0.00	0.00
121.46	0.00	0.00
232.00	0.00	0.00
95.99	0.00	0.00
59.02	0.00	0.00
117.36	0.00	0.00
161.87	0.00	0.00
54.49	0.00	0.00
231.00	0.00	0.00
26.70	0.00	0.00
34.45	0.00	0.00
9.19	0.00	0.00
114.13	0.00	0.00
160.27	0.00	0.00
14.96	0.00	0.00
151.70	0.00	0.00
20.33	0.00	0.00
115.78	0.00	0.00
89.16	0.00	0.00
47.40	0.00	0.00
63.57	0.00	0.00
245.00	0.00	0.00
153.34	0.00	0.00
54.58	0.00	0.00
14.22	0.00	0.00
118.92	0.00	0.00
0.16	0.00	0.00
59.13	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
34.68	0.00	0.00
111.55	0.00	0.00
68.22	0.00	0.00
44.24	0.00	0.00

43.49	0.00	0.00
75.60	0.00	0.00
130.69	0.00	0.00
31.06	0.00	0.00
20.76	0.00	0.00
108.25	0.00	0.00
110.70	0.00	0.00
23.73	0.00	0.00
15.77	0.00	0.00
69.73	0.00	0.00
99.61	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
5.51	0.00	0.00
29.94	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
10.74	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
15.57	0.00	0.00
121.96	0.00	0.00
5.54	0.00	0.00
97.38	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
57.55	0.00	0.00
147.03	0.00	0.00
9.72	0.00	0.00
129.29	0.00	0.00
74.49	0.00	0.00
96.86	0.00	0.00
29.80	0.00	0.00
7.32	0.00	0.00
67.71	0.00	0.00
56.44	0.00	0.00
1.17	0.00	0.00
150.31	0.00	0.00
94.67	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
65.19	0.00	0.00
30.14	0.00	0.00
0.33	0.00	0.00
75.50	0.00	0.00
0.33	0.00	0.00
12.20	0.00	0.00
18.27	0.00	0.00
9.60	0.00	0.00
33.28	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
71.92	0.00	0.00
121.08	0.00	0.00
3.74	0.00	0.00

20.07	0.00	0.00
127.70	0.00	0.00
13.23	0.00	0.00
1.35	0.00	0.00
6.29	0.00	0.00
70.71	0.00	0.00
13.28	0.00	0.00
6.40	0.00	0.00
152.71	0.00	0.00
33.40	0.00	0.00
1.23	0.00	0.00
71.31	0.00	0.00
32.88	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
28.50	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
24.23	0.00	0.00
90.21	1.17	-0.01
5.00	0.00	0.00
88.08	0.00	0.00
1.63	0.00	0.00
175.22	0.00	0.00
65.55	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
3.52	0.00	0.00
64.30	0.00	0.00
72.09	0.00	0.00
6.91	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
44.97	0.00	0.00
101.75	0.00	0.00
16.37	0.00	0.00
178.68	0.00	0.00
35.50	0.00	0.00
0.15	0.00	0.00
59.98	0.00	0.00
11.22	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
71.06	31.45	-0.84
0.00	0.00	0.00
8.86	0.00	0.00
29.46	2.82	0.05
4.88	0.00	0.00
110.27	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
62.19	0.00	0.00
118.33	0.00	0.00
9.89	0.00	0.00
6.66	0.00	0.00

68.61	0.00	0.00
59.25	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
0.15	0.00	0.00
46.19	0.00	0.00
10.75	0.00	0.00
1.83	0.00	0.00
128.16	0.00	0.00
37.06	0.00	0.00
0.30	0.00	0.00
109.62	0.00	0.00
66.29	0.00	0.00
1.19	0.00	0.00
70.36	21.44 IIII	-0.12
0.00	0.00	0.00
27.06	0.00	0.00
69.56	0.00	0.00
11.59	0.00	0.00
28.45	0.00	0.00
3.34	0.00	0.00
59.59	0.00	0.00
118.38	0.00	0.00
7.72	0.00	0.00
17.99	0.00	0.00
39.27	0.00	0.00
118.95	0.00	0.00
0.83	0.00	0.00
2.43	0.00	0.00
154.90	0.00	0.00
46.63	0.00	0.00
0.84	0.00	0.00
64.53	0.00	0.00
31.30	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
69.16	0.00	0.00
27.44	0.00	0.00
2.36	0.00	0.00
14.62	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
1.00	0.00	0.00
84.06	0.00	0.00
6.85	0.00	0.00
89.85	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
92.46	0.00	0.00
78.14	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
44.91	0.00	0.00
69.67	0.00	0.00

113.00	0.00	0.00
0.86	0.00	0.00
1.46	0.00	0.00
30.47	0.00	0.00
73.68	0.00	0.00
0.33	0.00	0.00
49.24	0.00	0.00
37.18	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
47.30	0.00	0.00
38.10	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
59.64	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
45.03	0.00	0.00
54.95	0.00	0.00
8.40	0.00	0.00
136.22	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
106.48	0.00	0.00
42.64	0.00	0.00
33.88	0.00	0.00
11.58	0.00	0.00
167.01	0.00	0.00
95.36	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
0.61	0.00	0.00
26.36	0.00	0.00
13.65	0.00	0.00
1.78	0.00	0.00
118.19	0.00	0.00
38.06	0.00	0.00
0.24	0.00	0.00
51.97	0.00	0.00
23.86	0.00	0.00
0.53	0.00	0.00
17.96	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
16.43	0.00	0.00
113.34	0.00	0.00
5.74	0.00	0.00
68.48	0.00	0.00
3.18	0.00	0.00
64.92	0.00	0.00
139.37	0.00	0.00
13.66	0.00	0.00
3.01	0.00	0.00
59.52	0.00	0.00
2.99	0.00	0.00

0.00	0.00	0.00
116.41	0.00	0.00
69.43	0.00	0.00
1.67	0.00	0.00
59.63	0.00	0.00
67.30	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
74.60	0.00	0.00
68.02	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
3.81	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
12.10	0.00	0.00
24.64	0.00	0.00
5.84	0.00	0.00
70.40	0.00	0.00
0.17	0.00	0.00
163.66	0.00	0.00
46.83	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
41.33	0.00	0.00
80.01	0.00	0.00
115.62	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
0.89	0.00	0.00
82.83	0.00	0.00
17.12	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
62.05	0.00	0.00
33.64	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
67.00	0.00	0.00
36.90	0.00	0.00
12.02	0.00	0.00
72.10	0.00	0.00
7.57	0.00	0.00
103.89	0.00	0.00
110.09	14.78	-0.20
16.47	0.00	0.00
65.53	0.00	0.00
7.91	0.00	0.00
76.75	0.00	0.00
92.24	0.00	0.00
9.95	0.00	0.00
0.24	0.00	0.00
134.47	0.00	0.00
15.98	0.00	0.00
0.74	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00

34.13	0.00	0.00
102.31	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
57.57	0.00	0.00
81.01	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
107.93	0.00	0.00
59.26	0.00	0.00
1.01	0.00	0.00
57.23	0.00	0.00
1.17	0.00	0.00
84.69	0.00	0.00
44.73	0.00	0.00
0.67	0.00	0.00
48.67	0.00	0.00
95.82	0.00	0.00
9.51	0.00	0.00
80.90	0.00	0.00
98.59	0.00	0.00
13.46	0.00	0.00
5.96	0.00	0.00
31.72	0.00	0.00
1.35	0.00	0.00
62.50	0.00	0.00
38.54	0.00	0.00
0.15	0.00	0.00
43.44	0.00	0.00
52.32	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
52.13	0.00	0.00
26.34	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
20.24	0.00	0.00
0.17	0.00	0.00
15.99	0.00	0.00
26.12	0.00	0.00
7.37	0.00	0.00
89.47	0.00	0.00
0.50	0.00	0.00
58.18	0.00	0.00
68.02	0.00	0.00
14.74	0.00	0.00
64.33	0.00	0.00
161.90	0.00	0.00
84.45	0.00	0.00
5.82	0.00	0.00
2.44	0.00	0.00
94.47	0.00	0.00
54.20	0.00	0.00

2.51	0.00	0.00
58.69	0.00	0.00
39.79	0.00	0.00
0.29	0.00	0.00
60.02	0.00	0.00
48.18	0.00	0.00
4.60	0.00	0.00
20.71	0.00	0.00
1.34	0.00	0.00
0.86	0.00	0.00
104.81	0.00	0.00
5.77	0.00	0.00
82.23	0.00	0.00
0.50	0.00	0.00
82.05	0.00	0.00
92.24	0.00	0.00
19.87	0.00	0.00
12.87	0.00	0.00
42.89	0.00	0.00
0.94	0.00	0.00
31.25	0.00	0.00
79.20	0.00	0.00
1.31	0.00	0.00
124.35	0.00	0.00
100.96	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
68.82	0.00	0.00
91.64	0.00	0.00
0.12	0.00	0.00
9.22	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
86.83	0.00	0.00
61.09	0.00	0.00
7.31	0.00	0.00
47.12	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
96.63	0.00	0.00
78.21	0.00	0.00
0.12	0.00	0.00
95.90	0.00	0.00
43.07	0.00	0.00
79.02	0.00	0.00
4.95	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
64.45	0.00	0.00
115.16	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
113.62	0.00	0.00
39.71	0.00	0.00

0.00	0.00	0.00
139.80	0.00	0.00
22.87	0.00	0.00
1.12	0.00	0.00
27.83	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
4.52	0.00	0.00
146.92	0.00	0.00
6.95	0.00	0.00
75.72	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
46.25	0.00	0.00
111.95	0.00	0.00
16.82	0.00	0.00
72.67	0.00	0.00
81.76	0.00	0.00
73.86	0.00	0.00
0.86	0.00	0.00
0.17	0.00	0.00
54.26	0.00	0.00
45.35	0.00	0.00
2.84	0.00	0.00
97.63	0.00	0.00
37.93	0.00	0.00
5.28	0.00	0.00
68.60	0.00	0.00
96.72	0.00	0.00
1.69	0.00	0.00
26.05	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
13.21	0.00	0.00
28.44	0.00	0.00
3.85	0.00	0.00
109.69	0.00	0.00
0.67	0.00	0.00
69.00	0.00	0.00
76.36	0.00	0.00
24.04	0.00	0.00
14.47	0.00	0.00
71.98	0.00	0.00
69.66	0.00	0.00
31.56	0.00	0.00
1.50	0.00	0.00
99.96	0.00	0.00
31.00	0.00	0.00
0.31	0.00	0.00
24.58	0.00	0.00
50.47	0.00	0.00
0.09	0.00	0.00

62.13	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
51.33	0.00	0.00
22.77	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
123.91	0.00	0.00
56.47	0.00	0.00
0.33	0.00	0.00
69.73	0.00	0.00
63.50	0.00	0.00
72.87	0.00	0.00
12.67	0.00	0.00
49.49	0.00	0.00
44.37	0.00	0.00
150.18	0.00	0.00
40.47	0.00	0.00
4.78	0.00	0.00
100.24	0.00	0.00
96.12	0.00	0.00
5.36	0.00	0.00
79.29	0.00	0.00
44.30	0.00	0.00
0.74	0.00	0.00
44.48	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
21.10	0.00	0.00
14.03	0.00	0.00
0.29	0.00	0.00
1.83	0.00	0.00
1.53	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
20.82	0.00	0.00
44.17	0.00	0.00
25.48	0.00	0.00
63.51	0.00	0.00
30.25	0.00	0.00
49.35	0.00	0.00
112.24	0.00	0.00
101.98	0.00	0.00
43.67	0.00	0.00
132.27	0.00	0.00
152.32	0.00	0.00
109.04	0.00	0.00
72.86	0.00	0.00
121.87	0.00	0.00
145.24	0.00	0.00
217.82	0.00	0.00
139.53	0.00	0.00
179.59	0.00	0.00

60.88	0.00	0.00
138.14	0.00	0.00
151.96	0.00	0.00
93.41	0.00	0.00
89.90	0.00	0.00
182.26	0.00	0.00
124.80	0.00	0.00
126.56	0.00	0.00
151.39	0.00	0.00
172.03	0.00	0.00
187.43	0.00	0.00
182.10	0.00	0.00
134.80	0.00	0.00
114.18	0.00	0.00
47.60	0.00	0.00
168.47	0.00	0.00
215.32	0.00	0.00
131.58	0.00	0.00
111.76	0.00	0.00
158.73	0.00	0.00
112.43	0.00	0.00
157.68	0.00	0.00
192.08	0.00	0.00
84.27	0.00	0.00
126.96	0.00	0.00
114.82	0.00	0.00
81.96	0.00	0.00
138.41	0.00	0.00
109.45	0.00	0.00
104.13	0.00	0.00
85.38	0.00	0.00
116.45	0.00	0.00
94.43	0.00	0.00
110.73	0.00	0.00
81.63	0.00	0.00
92.25	0.00	0.00
126.50	0.00	0.00
79.35	0.00	0.00
136.46	0.00	0.00
106.15	0.00	0.00
83.43	0.00	0.00
48.90	0.00	0.00
121.54	0.00	0.00
6.96	0.00	0.00
51.13	0.00	0.00
51.91	0.00	0.00
64.83	0.00	0.00
3.11	0.00	0.00
23.00	0.00	0.00

35.31	0.00	0.00
32.97	0.00	0.00
51.81	0.00	0.00
11.87	0.00	0.00
21.84	0.00	0.00
102.92	0.00	0.00
51.36	0.00	0.00
0.65	0.00	0.00
0.42	0.00	0.00
42.37	0.00	0.00
47.57	0.00	0.00
168.55	0.00	0.00
125.64	0.00	0.00
8.21	0.00	0.00
21.50	0.00	0.00
102.56	0.00	0.00
11.47	0.00	0.00
2.48	0.00	0.00
110.83	0.00	0.00
64.69	0.00	0.00
5.15	0.00	0.00
1.49	0.00	0.00
80.22	0.00	0.00
71.05	0.00	0.00
0.17	0.00	0.00
48.74	0.00	0.00
76.54	0.00	0.00
16.43	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
38.50	0.00	0.00
82.21	0.00	0.00
0.67	0.00	0.00
20.79	0.00	0.00
44.39	0.00	0.00
8.32	0.00	0.00
1.48	0.00	0.00
98.17	0.00	0.00
178.11	0.00	0.00
9.71	0.00	0.00
73.78	0.00	0.00
78.78	0.00	0.00
178.94	0.00	0.00
51.51	0.00	0.00
28.27	0.00	0.00
44.31	0.00	0.00
3.51	0.00	0.00
15.62	0.00	0.00
19.09	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00

11.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
32.48	0.00	0.00
7.08	0.00	0.00
4.31	0.00	0.00
44.27	0.00	0.00
14.95	0.00	0.00
3.36	0.00	0.00
70.71	0.00	0.00
54.72	0.00	0.00
15.36	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
56.75	0.00	0.00
4.90	0.00	0.00
8.45	0.00	0.00
29.64	0.00	0.00
59.94	0.00	0.00
9.70	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
32.90	0.00	0.00
22.90	0.00	0.00
1.23	0.00	0.00
60.29	0.00	0.00
170.92	0.00	0.00
5.62	0.00	0.00
101.44	0.00	0.00
43.83	0.00	0.00
41.54	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
15.59	0.00	0.00
180.07	0.00	0.00
65.50	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
4.67	0.00	0.00
162.80	0.00	0.00
14.76	0.00	0.00
6.20	0.00	0.00
63.99	0.00	0.00
17.13	0.00	0.00
116.16	0.00	0.00
34.88	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
37.82	0.00	0.00
72.13	0.00	0.00
10.37	0.00	0.00
0.33	0.00	0.00
45.85	0.00	0.00
41.52	0.00	0.00
16.61	0.00	0.00

11.38	0.00	0.00
28.77	0.00	0.00
0.39	0.00	0.00
40.51	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
1.84	0.00	0.00
12.70	0.00	0.00
16.05	0.00	0.00
11.34	0.00	0.00
5.01	0.00	0.00
4.02	0.00	0.00
11.20	0.00	0.00
20.00	0.00	0.00
1.18	0.00	0.00
0.12	0.00	0.00
50.85	0.00	0.00
33.55	0.00	0.00
10.34	0.00	0.00
17.75	0.00	0.00
126.27	0.00	0.00
37.30	0.00	0.00
25.43	0.00	0.00
115.51	0.00	0.00
141.85	0.00	0.00
84.03	0.00	0.00
95.21	0.00	0.00
181.41	0.00	0.00
155.29	0.00	0.00
167.20	0.00	0.00
104.42	0.00	0.00
175.43	0.00	0.00
87.36	0.00	0.00
81.88	0.00	0.00
72.14	0.00	0.00
73.05	0.00	0.00
48.25	0.00	0.00
17.24	0.00	0.00
108.74	0.00	0.00
90.40	0.00	0.00
71.02	0.00	0.00
21.24	0.00	0.00
119.07	0.00	0.00
109.73	0.00	0.00
22.76	0.00	0.00
35.57	0.00	0.00
100.54	0.00	0.00
92.44	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00
87.76	0.00	0.00

	69.74	0.00	0.00
	39.40	0.00	0.00
	0.00	0.00	0.00
	23.77	0.00	0.00
	71.36	0.00	0.00
	3.09	0.00	0.00
	89.40	0.00	0.00
	153.05	0.00	0.00
	56.41	0.00	0.00
	54.48	0.00	0.00
	8.05	0.00	0.00
	121.74	0.00	0.00
	2.40	0.00	0.00
	11.64	0.00	0.00
	48.14	0.00	0.00
	0.84	0.00	0.00
	0.34	0.00	0.00
	1.37	0.00	0.00
	0.29	0.00	0.00
	28.24	0.00	0.00
	8.53	0.00	0.00
	18.37	0.00	0.00
	0.17	0.00	0.00
	48.16	0.00	0.00
	63.43	7.85	-0.09
	90.15	0.00	0.00
	107.77	92.53	1.31
	59.68	8.42	0.12
	6.18	0.00	0.00
H	31.53	25.50	0.78
	40.16	27.39	0.37
	20.19	0.00	0.00
	19.21	0.00	0.00
	19.23	17.38	0.28
	51.24	4.33	0.07
	15.57	0.00	0.00
	6.20	0.00	0.00
	98.82	43.40	0.69
	54.06	0.00	0.00
	7.43	0.00	0.00
	50.43	0.00	0.00
	105.92	1.17	0.02
	14.21	0.00	0.00
	13.42	0.00	0.00
	106.35	33.49	0.54
	91.11	0.00	0.00
	0.00	0.00	0.00
	64.12	0.00	0.00
	101.46	0.00	0.00

13.41	0.00	0.00
30.42	0.00	0.00
75.05	23.08	0.37
117.67	10.02	0.16
7.91	0.00	0.00
156.48	0.00	0.00
101.48	38.74	1.32
86.74	0.00	0.00
25.70	0.00	0.00
107.23	0.00	0.00
207.13	0.00	0.00
54.66	0.00	0.00
72.37	0.00	0.00
49.54	0.00	0.00
159.73	0.00	0.00
120.78	0.00	0.00
39.10	0.00	0.00
253.78	0.00	0.00
38.24	0.00	0.00
23.14	0.00	0.00
35.15	0.00	0.00
3.18	0.00	0.00
11.71	0.00	0.00
126.68	0.00	0.00
8.47	0.00	0.00
0.84	0.00	0.00
39.62	0.00	0.00
65.26	0.00	0.00
5.19	0.00	0.00
17.58	0.00	0.00
127.05	0.00	0.00
27.54	0.00	0.00
11.45	0.00	0.00
43.48	0.00	0.00
87.78	0.00	0.00
26.98	0.00	0.00
30.41	0.00	0.00
75.73	0.00	0.00
46.65	0.00	0.00
10.55	0.00	0.00
19.57	0.00	0.00
122.55	0.00	0.00
2.47	0.00	0.00
1.29	0.00	0.00
87.90	13.69	0.22
6.10	0.00	0.00
15.22	0.12	-0.00
84.68	81.43	0.80
110.95	69.28	1.08

H	122.98	60.80		-0.57
	84.77	0.00		0.00
	128.84	0.00		0.00
	120.40	0.00		0.00
	26.70	0.00		0.00
	47.24	0.00		0.00
	11.14	0.00		0.00
	116.30	0.00		0.00
	71.18	0.00		0.00
	20.92	0.00		0.00
	1.47	0.00		0.00
	67.71	0.00		0.00
	18.38	0.00		0.00
	7.49	0.00		0.00
	7.24	0.00		0.00
	13.79	0.00		0.00
	17.50	0.00		0.00
	52.60	0.00		0.00
	11.39	0.00		0.00
	49.70	0.00		0.00
	22.77	0.00		0.00
	5.24	0.00		0.00
	7.22	0.00		0.00
	51.15	0.00		0.00
	6.53	0.00		0.00
	3.77	0.00		0.00
	53.22	0.00		0.00
	20.25	0.00		0.00
	1.53	0.00		0.00
	36.71	0.00		0.00
	103.72	0.00		0.00
	139.31	0.00		0.00
	3.49	0.00		0.00
	64.51	0.00		0.00
	38.10	0.00		0.00
	9.94	0.00		0.00
	128.88	0.00		0.00
	95.56	0.00		0.00
	1.03	0.00		0.00
	69.68	0.00		0.00
	80.01	0.00		0.00
	21.07	0.00		0.00
	35.77	0.00		0.00
	156.99	0.00		0.00
	135.80	0.00		0.00
	89.66	0.00		0.00
	77.38	0.00		0.00
	138.10	0.00		0.00
	103.22	0.00		0.00

191.90	0.00	0.00
89.10	0.00	0.00
200.97	0.00	0.00
78.66	0.00	0.00
149.04	0.00	0.00
152.91	0.00	0.00
112.29	0.00	0.00
83.32	0.00	0.00
183.62	0.00	0.00
171.85	0.00	0.00
90.12	0.00	0.00
175.03	0.00	0.00
123.46	0.00	0.00
105.10	0.00	0.00
127.46	0.00	0.00
133.70	0.00	0.00
142.41	0.00	0.00
143.29	0.00	0.00
197.56	0.00	0.00
162.22	0.00	0.00
96.04	0.00	0.00
129.91	0.00	0.00
129.50	0.00	0.00
92.27	0.00	0.00
133.79	0.00	0.00
150.61	0.00	0.00
94.40	0.00	0.00
142.91	0.00	0.00
110.79	0.00	0.00
104.29	0.00	0.00
187.47	0.00	0.00
128.16	0.00	0.00
107.43	0.00	0.00
94.23	0.00	0.00
97.63	0.00	0.00
127.09	0.00	0.00
108.56	0.00	0.00
181.88	0.00	0.00
131.70	0.00	0.00
163.37	0.00	0.00
101.75	0.00	0.00
129.05	0.00	0.00
104.09	0.00	0.00
99.08	0.00	0.00
126.16	0.00	0.00
120.32	0.00	0.00
90.72	0.00	0.00
101.91	0.00	0.00
99.07	0.00	0.00

	174.45	0.00	0.00
	106.79	0.00	0.00
	118.76	0.00	0.00
	118.84	0.00	0.00
	141.86	0.00	0.00
	89.37	0.00	0.00
	108.16	23.20	0.85
	170.75	4.82	-0.03
	162.67	22.25	0.36
	87.35	11.33	0.05
	109.74	10.83	0.03
	114.41	43.51	0.70
	93.06	37.18	0.52
	177.62	58.84	0.84
	132.27	97.59	1.38
	101.19	56.61	0.71
H	140.77	83.08	2.71
S	225.44	62.34	0.10