

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第4334249号
(P4334249)

(45) 発行日 平成21年9月30日(2009.9.30)

(24) 登録日 平成21年7月3日(2009.7.3)

(51) Int.Cl.	F I	
G06F 19/00 (2006.01)	G06F 19/00	600
G06F 17/30 (2006.01)	G06F 17/30	170F
G01N 33/48 (2006.01)	G06F 17/30	120A
G01N 33/68 (2006.01)	G01N 33/48	Z
G06F 17/10 (2006.01)	G01N 33/68	

請求項の数 28 (全 137 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2003-68390 (P2003-68390)	(73) 特許権者	502433955
(22) 出願日	平成15年3月13日(2003.3.13)		株式会社インシリコサイエンス
(65) 公開番号	特開2004-280276 (P2004-280276A)		東京都大田区東雪谷二丁目15番9号
(43) 公開日	平成16年10月7日(2004.10.7)	(74) 代理人	100089118
審査請求日	平成18年3月8日(2006.3.8)		弁理士 酒井 宏明
		(74) 代理人	100113103
			弁理士 香島 拓也
		(72) 発明者	梅山 秀明
			千葉県浦安市美浜1-7-1002
		(72) 発明者	渡辺 佳晃
			東京都港区白金3-5-6-303
		(72) 発明者	岩館 満雄
			埼玉県羽生市尾崎26-5

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

タンパク質の構造データを記憶する記憶部と、制御部と、を少なくとも備えた構造情報処理装置であって、

上記制御部は、

上記記憶部から上記タンパク質の上記構造データを取得する構造データ取得手段と、

上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、

を備えたことを特徴とする構造情報処理装置。

【請求項2】

上記構造変化手段は、

上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる上記目的関数について、上記タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記公開用構造データを作成することを特徴とする請求項1に記載の構造情報処理装置。

【請求項3】

上記構造変化手段は、

上記目的関数 (U_{pos}) を以下の数式で計算し、

【数1】

$$U_{pos} = K_{pos} \sum_i \|X_i - X_i^*\|$$

(ここで、 U_{pos} はタンパク質の原子位置に関するエネルギーを指標とする目的関数、 K_{pos} はタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数、 X_i は摂動を加えた後のタンパク質の i 残基目の座標、 X_i^* は摂動を加える前のタンパク質の i 残基目の座標である。)

10

加える摂動の大きさを以下の数式のように設定し、

$$X_i^{post} = X_i^{pre} + Y_i$$

(ここで、 Y_i はタンパク質の i 残基目の座標に加える摂動 ()、 X_i^{pre} は摂動を加える前のタンパク質の i 残基目の座標、 X_i^{post} は摂動を加えた後のタンパク質の i 残基目の座標である。)

加える摂動に関する関数 Y_i を以下の数式で計算し、

$$Y_i = P \times T_i$$

(ここで、 T_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの大きさ、 P は Y_i のノルム (ベクトルの大きさ) を 0 より大きく 5 より小さい値にするよう調整しながら発生する乱数である。)

20

タンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (K_{pos}) を以下の数式で計算すること、

$$K_{pos} = M \times S_i$$

(ここで、 S_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの値を反映したパラメータであり、 S_i は T_i の値が大きいと小さくなる揺らぎに対応した定数、 M は K_{pos} を 0 ~ 1 までの値にする調整因子である。)

を特徴とする請求項2に記載の構造情報処理装置。

【請求項4】

30

上記構造変化手段は、

上記タンパク質の上記構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、上記結合物質に対応する立体構造座標を含む、上記構造変化手段により作成された構造変化後の上記公開用構造データを用いて、上記結合物質と上記タンパク質との複合体を構築し、当該複合体においてファンデルワールスの原子衝突の有無を判定することにより、上記公開用構造データが上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定する機能判定手段、

をさらに備え、上記機能判定手段により機能を失ったと判定されるまで、上記タンパク質の上記公開用構造データを繰り返し作成することを特徴とする請求項1から3のいずれか一つに記載の構造情報処理装置。

40

【請求項5】

上記構造変化手段は、

上記タンパク質の上記構造データに、上記リガンドを含む上記結合物質の構造が含まれている場合に、上記結合物質に対応する上記立体構造座標に摂動を加えて変化させる結合物質座標変化手段、

をさらに備えたことを特徴とする請求項1から4のいずれか一つに記載の構造情報処理装置。

【請求項6】

上記機能判定手段は、

上記結合物質座標変化手段により変化させた上記結合物質に対応する上記立体構造座標

50

を含む、上記構造変化手段により作成された構造変化後の上記タンパク質の上記公開用構造データを用いて、上記結合物質と上記タンパク質との複合体を構築し、当該複合体において上記ファンデルワールスの原子衝突の有無を判定することにより、上記公開用構造データが上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定し、

上記結合物質座標変化手段は、

上記機能判定手段により機能を失ったと判定されるまで、上記結合物質に対応する上記立体構造座標に摂動を加えて変化させることを特徴とする請求項5に記載の構造情報処理装置。

【請求項7】

上記結合物質座標変化手段は、

上記リガンドに加える摂動の大きさを以下の数式のように設定し、

$$X l i g _ i ^ { p o s t } = X l i g _ i ^ { p r e } + Y l i g _ i$$

(ここで、 $Y l i g _ i$ はリガンドの*i*原子の座標に加える摂動()、 $X l i g _ i ^ { p r e }$ は摂動を加える前のリガンドの*i*原子の座標、 $X l i g _ i ^ { p o s t }$ は摂動を加えた後のリガンドの*i*原子の座標である。また、 $Y l i g _ i$ (ベクトルの大きさ)は、加える摂動で、座標の回転移動、平行移動、単結合の回転の操作に対して、リガンド座標が以下の範囲で座標変換されるように発生する乱数である。)

上記数式を用いて、上記結合物質に対応する上記立体構造座標について、重心を中心に $0^{\circ} \sim 180^{\circ}$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^{\circ} \sim 30^{\circ}$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行うことにより、上記結合物質に対して機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させること、

を特徴とする請求項5または6に記載の構造情報処理装置。

【請求項8】

上記構造変化手段は、

上記タンパク質の公開用構造データを、C原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみC原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成する公開用構造データ作成手段、

をさらに備えたことを特徴とする請求項1から7のいずれか一つに記載の構造情報処理装置。

【請求項9】

上記制御部は、

上記タンパク質の上記構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納する契約情報格納手段と、

上記構造情報創作者と上記構造情報利用者との間で上記タンパク質の上記構造データに対する契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、

上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段と、

をさらに備えたことを特徴とする請求項1から8のいずれか一つに記載の構造情報処理装置。

【請求項10】

タンパク質の構造データを記憶する記憶部と、制御部と、を少なくとも備えた構造情報処理装置を用いて行われる構造情報処理方法であって、

上記制御部において実行される、

上記記憶部から上記タンパク質の構造データを取得する構造データ取得ステップと、

上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記

10

20

30

40

50

目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、

を含むことを特徴とする構造情報処理方法。

【請求項 1 1】

上記構造変化ステップは、

上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる上記目的関数について、上記タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記ループ部分の構造のみを変化させた上記公開用構造データを作成することを特徴とする請求項 1 0 に記載の構造情報処理方法。

10

【請求項 1 2】

上記構造変化ステップは、

上記目的関数 (U_{pos}) を以下の数式で計算し、

【数 2】

$$U_{pos} = K_{pos} \sum_i \|X_i - X_i^*\|$$

(ここで、 U_{pos} はタンパク質の原子位置に関するエネルギーを指標とする目的関数、 K_{pos} はタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数、 X_i は摂動を加えた後のタンパク質の i 残基目の座標、 X_i^* は摂動を加える前のタンパク質の i 残基目の座標である。)

20

加える摂動の大きさを以下の数式のように設定し、

$$X_i^{post} = X_i^{pre} + Y_i$$

(ここで、 Y_i はタンパク質の i 残基目の座標に加える摂動 ()、 X_i^{pre} は摂動を加える前のタンパク質の i 残基目の座標、 X_i^{post} は摂動を加えた後のタンパク質の i 残基目の座標である。)

加える摂動に関する関数 Y_i を以下の数式で計算し、

$$Y_i = P \times T_i$$

(ここで、 T_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの大きさ、 P は Y_i のノルム (ベクトルの大きさ) を 0 より大きく 5 より小さい値にするよう調整しながら発生する乱数である。)

30

タンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (K_{pos}) を以下の数式で計算すること

$$K_{pos} = M \times S_i$$

(ここで、 S_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの値を反映したパラメータであり、 S_i は T_i の値が大きいと小さくなる揺らぎに対応した定数、 M は K_{pos} を 0 ~ 1 までの値にする調整因子である。)

を特徴とする請求項 1 1 に記載の構造情報処理方法。

【請求項 1 3】

40

上記構造変化ステップは、

上記タンパク質の上記構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、上記結合物質に対応する立体構造座標を含む、上記構造変化ステップにより作成された構造変化後の上記公開用構造データを用いて、上記結合物質と上記タンパク質との複合体を構築し、当該複合体においてファンデルワールスの原子衝突の有無を判定することにより、上記公開用構造データが上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定する機能判定ステップ、

をさらに含み、上記機能判定ステップにより機能を失ったと判定されるまで、上記タンパク質の上記公開用構造データを繰り返し作成することを特徴とする請求項 1 0 から 1 2 のいずれか一つに記載の構造情報処理方法。

50

【請求項 14】

上記構造変化ステップは、
 上記タンパク質の上記構造データに、上記リガンドを含む上記結合物質の構造が含まれている場合に、上記結合物質に対応する上記立体構造座標に摂動を加えて変化させる結合物質座標変化ステップ、

をさらに含むことを特徴とする請求項 10 から 13 のいずれか一つに記載の構造情報処理方法。

【請求項 15】

上記機能判定ステップは、
上記結合物質座標変化ステップにより変化させた上記結合物質に対応する上記立体構造座標を含む、上記構造変化ステップにより作成された構造変化後の上記タンパク質の上記公開用構造データを用いて、上記結合物質と上記タンパク質との複合体を構築し、当該複合体において上記ファンデルワールスの原子衝突の有無を判定することにより、上記公開用構造データが上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定し、

上記結合物質座標変化ステップは、
上記機能判定ステップにより機能を失ったと判定されるまで、上記結合物質に対応する上記立体構造座標に摂動を加えて変化させることを特徴とする請求項 14 に記載の構造情報処理方法。

【請求項 16】

上記結合物質座標変化ステップは、
 上記リガンドに加える摂動の大きさを以下の数式のように設定し、

$$X_{lig_i}^{post} = X_{lig_i}^{pre} + Y_{lig_i}$$

(ここで、 Y_{lig_i} はリガンドの i 原子の座標に加える摂動 ()、 $X_{lig_i}^{pre}$ は摂動を加える前のリガンドの i 原子の座標、 $X_{lig_i}^{post}$ は摂動を加えた後のリガンドの i 原子の座標である。また、 Y_{lig_i} (ベクトルの大きさ) は、加える摂動で、座標の回転移動、平行移動、単結合の回転の操作に対して、リガンド座標が以下の範囲で座標変換されるように発生する乱数である。)

上記数式を用いて、上記結合物質に対応する上記立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行うことにより、上記結合物質に

対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させること、

を特徴とする請求項 14 または 15 に記載の構造情報処理方法。

【請求項 17】

上記構造変化ステップは、
 上記タンパク質の公開用構造データを、C 原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみ C 原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成する公開用構造データ作成ステップ、

をさらに含むことを特徴とする請求項 10 から 16 のいずれか一つに記載の構造情報処理方法。

【請求項 18】

上記制御部において実行される、
 上記タンパク質の上記構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納する契約情報格納ステップと、

上記構造情報創作者と上記構造情報利用者との間で上記タンパク質の上記構造データに対する契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、

上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、

をさらに含むことを特徴とする請求項 10 から 17 のいずれか一つに記載の構造情報処

10

20

30

40

50

理方法。

【請求項 19】

上記請求項 10 から 18 のいずれか一つに記載された構造情報処理方法をコンピュータに実行させることを特徴とするプログラム。

【請求項 20】

上記請求項 10 から 18 のいずれか一つに記載された構造情報処理方法をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録したことを特徴とするコンピュータ読取可能な記録媒体。

【請求項 21】

タンパク質の構造データを記憶する記憶部と制御部とを少なくとも備えた、上記タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、

上記構造情報処理装置の上記制御部は、

上記記憶部から上記タンパク質の上記構造データを取得する構造データ取得手段と、

上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、

上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、

上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段と、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部は、

上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧手段と、

購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、

上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段と、

を備えたことを特徴とする構造情報受発注システム。

【請求項 22】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、

上記構造情報処理装置の上記制御部は、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置から任意の上記タンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の上記構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得手段と、

上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段

10

20

30

40

50

と、

上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、

上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段と、

を備え、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部は、

上記タンパク質の上記アミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段と、

上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧手段と、

購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、

上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段と、

を備えたことを特徴とする構造情報受発注システム。

【請求項 23】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、上記タンパク質の構造データを記憶する記憶部と制御部を少なくとも備えた、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、

上記構造情報処理装置の上記制御部は、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記記憶部から上記タンパク質の上記構造データを取得する構造データ取得手段と、

上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、

上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、

上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段と、

を備え、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記制御部は、

上記記憶部に記憶された上記タンパク質の上記構造データを上記構造情報処理装置に対して送信する構造データ登録手段、

を備え、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部は、

上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧手段と、

購入する上記タンパク質の上記構造データに対する上記発注情報を送信する発注手段と

10

20

30

40

50

上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段と、

を備えたことを特徴とする構造情報受発注システム。

【請求項 24】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、

上記構造情報処理装置の上記制御部は、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置から任意の上記タンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の上記構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得手段と、

上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、

上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、

上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段と、

を備え、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記制御部は、
上記タンパク質の上記アミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段、

を備え、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部は、

上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧手段と、

購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、

上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段と、

を備えたことを特徴とする構造情報受発注システム。

【請求項 25】

タンパク質の構造データを記憶する記憶部と制御部とを少なくとも備えた、上記タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記記憶部から上記タンパク質の上記構造データを取得する構造データ取得ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、

10

20

30

40

50

一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、

10

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップと、

を含むことを特徴とする構造情報受発注方法。

20

【請求項 26】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、任意の上記タンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記アミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の上記構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得ステップと、

30

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、

40

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する上記発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記契約情報管理ステップに

50

より上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップと、

を含むことを特徴とする構造情報受発注方法。

【請求項 27】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、上記タンパク質の構造データを記憶する記憶部と制御部を少なくとも備えた、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記記憶部に記憶された上記タンパク質の上記構造データを上記構造情報処理装置に対して送信する構造データ登録ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記記憶部から上記タンパク質の上記構造データを取得する構造データ取得ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する上記発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップと、

を含むことを特徴とする構造情報受発注方法。

【請求項 28】

制御部を少なくとも備えた、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、制御部を少なくとも備えた、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、

上記構造情報創作者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、任意の上記タンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信ス

10

20

30

40

50

トップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報創作者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記アミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の上記構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行い、ヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、上記目的関数を調整することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、

10

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の上記情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの上記契約情報を閲覧する閲覧ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記構造情報利用者の上記情報端末装置から上記タンパク質の上記構造データに対する上記発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの上記契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、

20

上記構造情報処理装置の上記制御部において実行される、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の上記情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、

上記構造情報利用者の上記情報端末装置の上記制御部において実行される、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップと、

を含むことを特徴とする構造情報受発注方法。

【発明の詳細な説明】

30

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法に関し、特に、ユーザ（構造情報利用者）のタンパク質立体構造を把握するという要求と、サプライヤー（構造情報提供者）のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たし、かつ、タンパク質立体構造座標に関連したバイオインフォマティクス情報を産業に結びつけ安定的な流通を図るビジネスモデルを提供することのできる構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法に関する。

【0002】

40

【従来の技術】

タンパク質の立体構造を解明する試みは構造生物学において構造決定の主力とされるX線結晶構造解析、NMRを適用して行われている。また、ゲノム解析から推定されるタンパク質の数は多く、すべてのタンパク質をX線結晶構造解析などの実験的手法により解明することは極めて困難であることから、計算機を用いて、目的とするタンパク質とアミノ酸配列の相同性の高い立体構造既知のタンパク質を探し出し、目的タンパク質の機能を予測することが行われている。

【0003】

ここで、アミノ酸配列から立体構造を作成する方法として、ホモロジーモデリング法が広く知られている。これは、任意のアミノ酸配列（目的配列）が与えられたとき、目的配列

50

と類似の配列を有するタンパク質（参照タンパク質）をPDBのような立体構造データベースから検索し、目的配列と類似配列の間のアライメント（配列を並置したもの）を与えた後、アライメント情報を基に、参照タンパク質の3次元座標から目的配列上のアミノ酸ごとの3次元座標を作成する手法である。ホモロジーモデリング法としては、蛋白質自動モデリングシステム（例えば、FAMS：非特許文献1などを参照。）が知られており、精度の高いタンパク質立体構造を構築することが出来る。

【0004】

【非特許文献1】

K. Ogata and H. Umeyama, Journal of Molecular Graphics and Modeling 18, 258 - 272, 2000 10

【0005】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、創作者がタンパク質構造データを流通させる場合には、データ自体が容易に複製できるため、データ自体を公開して流通させることができないというシステム構造上の基本的問題点を有していた。

以下、この問題点の内容について、一層具体的に説明する。

【0006】

近年、ポストゲノム技術の進展に伴い、タンパク質の立体構造や機能の解明などを研究開発や創薬の基盤としようとする構造プロテオミクスの研究開発が世界的に発展しつつあり、タンパク質の三次元形状を原子座標により特定する「タンパク質立体構造データ」や、薬理活性を示す官能基の空間的位置を特定する「ファーマコフォアデータ」などを用いた情報処理（バイオインフォマティクス）技術が発展している。 20

【0007】

ここで、多くのタンパク質は、種々のホルモンやペプチド、タンパク質、DNA、金属、農薬、医薬品などの化合物等といった分子と相互作用することにより、生体内で機能を発揮する。多くのタンパク質で、相互作用の共通の性質は、タンパク質と相互作用する分子との相補性のある立体構造であり、各タンパク質の特異的な立体構造の特徴が相互作用の強さ、相互作用する分子の機能を決定しているため、タンパク質の立体構造は医薬、農薬の設計に大変重要な情報である。よって、タンパク質の立体構造座標といった情報は産業的価値が高く、有効に産業に結び付けていくシステム、ビジネスモデルが必要とされる。 30

【0008】

すなわち、ユーザ（構造情報利用者）は、タンパク質立体構造を把握するという要求があり、サプライヤー（構造情報提供者）はタンパク質立体構造の重要な部分は保護する（公開しない）という要求があるため、双方の要求を満たしたビジネスモデルが必要である。

【0009】

しかしながら、新規のタンパク質の構造データを創作した場合には、タンパク質立体構造データに関するビジネスとしては、データ自体を公開できずに秘匿したまま個別のライセンスによる流通が主流ではあり、タンパク質の立体構造座標といった情報を取り扱う場合は、特許や著作権等の知的財産としての保護が困難であるということもあり、ユーザ（構造情報利用者）、サプライヤー（構造情報提供者）双方の立場、要求を満たしたビジネス形態にはなっていない。 40

【0010】

すなわち、ユーザ（構造情報利用者）に対してタンパク質立体構造を把握させるのに十分な情報を開示しつつ、サプライヤー（構造情報提供者）に対してタンパク質立体構造の重要な部分は保護する（公開しない）という要求を満たした、タンパク質の構造の公開および流通システムは存在していない。

【0011】

特に、ランダムにタンパク質の構造を変化させた場合には、ユーザにとっても必要なタンパク質の立体構造を把握することができなくなる場合もあり、また、サプライヤーにとつ 50

ても重要な構造部分がユーザに筒抜けになってしまう場合もあるであろう。

【0012】

このように、従来のシステム等は数々の問題点を有しており、その結果、構造データの利用者および提供者のいずれにとっても、利便性が悪く、また、利用効率が悪いものであった。

【0013】

本発明は上記問題点に鑑みてなされたもので、ユーザ（構造情報利用者）のタンパク質立体構造を把握するという要求と、サプライヤー（構造情報提供者）のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たし、かつ、タンパク質立体構造座標に関連したバイオインフォマティクス情報を産業に結びつけ安定的な流通を図るビジネスモデルを提供することのできる、構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法を提供することを目的としている。

10

【0014】

すなわち、本発明者等は、構造情報利用者のタンパク質立体構造を把握するという要求と、構造情報提供者のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たし、かつ、タンパク質立体構造座標に関連したバイオインフォマテクスの情報を産業に結びつけるビジネスモデルについて検討をおこなった。現状ではタンパク質立体構造の特許による保護は困難であり、こうした状況ではデータ創作者によるデータ秘匿を誘発してしまう。一方、構造ゲノミクス領域の急速な進歩に伴い、膨大な数のタンパク質構造データが創出されつつある現状があり、こうした構造データは医薬品、農薬の開発に対して大変重要な情報であり、産業的な価値を有する。そこで、本発明であるビジネスモデルでは、構造データを用いた新規ビジネスの構築、タンパク質立体構造データの流通の促進、バイオインフォマテクス関連事業の研究開発の発展、データの創作者および利用者の両者に対して過度な負担を強いることのない簡便な仕組みで、これらの構造データについて知的創造サイクルが効率的に回るシステム等を作ることを目的とする。

20

【0015】

【課題を解決するための手段】

このような目的を達成するため、本発明の構造情報処理装置は、タンパク質の構造データを取得する構造データ取得手段と、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段とを備えたことを特徴とする。

30

【0016】

この装置によれば、タンパク質の構造データを取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成するので、タンパク質立体構造の概要を把握でき、かつ構造上の重要な部分（ループ構造をとる活性部位など）は失った構造である公開用構造データを作成することができる。

【0017】

すなわち、公開用構造データは、ユーザ（構造情報利用者）のタンパク質立体構造を把握するという要求と、サプライヤー（構造情報提供者）のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たすことができる。

40

【0018】

これにより、この公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、その公開構造データの作成の基と

50

なったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

【0019】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記構造変化手段は、上記構造変化手段により作成された構造変化後の構造データが、上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定する機能判定手段をさらに備え、上記機能判定手段により機能を失ったと判定されるまで、構造変化させることを特徴とする。

【0020】

これは構造変化手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、作成された構造変化後の構造データが、タンパク質の機能を失っているか否かを判定し、機能を失ったと判定されるまで構造変化させるので、公開用構造データについて確実に構造変化が機能を失う（例えば、重要な活性部位を失うなど）まで構造変化を行うことができるようになる。

10

【0021】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記構造変化手段は、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出する2次構造判定手段と、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、上記タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整する目的関数調節手段とをさらに備えたことを特徴とする。

20

【0022】

これは構造変化手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、取得した構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、タンパク質の構造データのエネルギー指標となる目的関数について、ヘリックス部分およびシート部分は固定するように、一方ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整するので、タンパク質の原子の位置のエネルギーの指標となる目的関数に摂動を加える際に、ヘリックス、シート部分は固定するように、ループ部分は変化しやすくするようなタンパク質の動的な性質を反映したパラメータとして、タンパク質の二次構造判定結果から得られる各アミノ酸残基のヘリックスやシートの判定、もしくはタンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いた立体構造のゆらぎにくさを使用し、目的関数に取り込んで「公開用構造データ」の構築に使用することができる。

30

【0023】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記目的関数調節手段は、上記目的関数 (U_{pos}) を以下の数式で計算し、

【数3】

$$U_{pos} = K_{pos} \sum_i \|X_i - X_i^*\|$$

40

(ここで、 U_{pos} はタンパク質の原子位置に関するエネルギーを指標とする目的関数、 K_{pos} はタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (例えば、 $0 < K_{pos} < 1$ である。) 、 X_i は摂動を加えた後のタンパク質の i 残基目の座標、 X_i^* は摂動を加える前のタンパク質の i 残基目の座標である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

加える摂動の大きさを以下の数式のように設定することを特徴とする。

$$X_i^{post} = X_i^{pre} + Y_i$$

50

(ここで、 Y_i はタンパク質の*i*残基目の座標に加える摂動()、 X_i^{pre} は摂動を加える前のタンパク質の*i*残基目の座標、 X_i^{pos} は摂動を加えた後のタンパク質の*i*残基目の座標である。)

【0024】

これは目的関数調節手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数(U_{pos})に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルル法に工夫を加えて修正し、上記の計算式からなるタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数(K_{pos})、およびタンパク質の位置からタンパク質の原子位置の微小の移動に対応する摂動の大きさ(Y_i)などをを用いるので、目的関数の調節を摂動の大きさなどを適切に反映して行うことができる。

10

【0025】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記目的関数調節手段は、加える摂動に関する関数 Y_i を以下の数式で計算することを特徴とする。

$$Y_i = P \times T_i$$

(ここで、 T_i は上記タンパク質の*i*番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの大きさ、 P は Y_i のノルム(ベクトルの大きさ)を0より大きく5より小さい値にするよう調整しながら発生する乱数である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

20

【0026】

これは目的関数調節手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数(U_{pos})に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルル法に工夫を加えて修正し、以下の計算式からなるタンパク質の位置からタンパク質の原子位置の微小の移動に対応する摂動の大きさ(Y_i)に、タンパク質のゆらぎにあたるやわらかさを指標としたパラメータに依存した定数(T_i)を用いることにより、現実のタンパク構造により近いモデルを作成することができるようになる。

【0027】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記目的関数調節手段は、タンパク質の原子位置に関する関数の比例定数(K_{pos})を以下の数式で計算することを特徴とする。

$$K_{pos} = M \times S_i$$

(ここで、 S_i は上記タンパク質の*i*番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの値を反映したパラメータであり S_i は T_i の値が大きいと小さくなる揺らぎに対応した定数、 M は K_{pos} を0~1までの値にする調整因子である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

30

【0028】

これは目的関数調節手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、この装置によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数(U_{pos})に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルル法に工夫を加えて修正し、以下の計算式からなるタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数(K_{pos})に、タンパク質のゆらぎにあたるやわらかさを指標としたパラメータに依存した定数(S_i)を用いることにより、現実のタンパク構造により近いモデルを作成することができるようになる。

40

【0029】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記構造変化手段は、上記タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれて

50

いる場合に、上記結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させる結合物質座標変化手段をさらに備えたことを特徴とする。

【0030】

これは構造変化手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、この装置によれば、タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させるので、タンパク質座標に関しては、機能に重要な部分の構造を失った座標にするとともに、リガンドの立体構造座標を、リガンドに対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を構築することができる。

【0031】

ここで、リガンドに加える摂動の計算式の一例を以下に示す。

$$X \text{ lig}_i^{\text{post}} = X \text{ lig}_i^{\text{pre}} + Y \text{ lig}_i$$

ここで、 $Y \text{ lig}_i$ はリガンドの*i*原子の座標に加える摂動()、 $X \text{ lig}_i^{\text{pre}}$ は摂動を加える前のリガンドの*i*原子の座標、 $X \text{ lig}_i^{\text{post}}$ は摂動を加えた後のリガンドの*i*原子の座標である。また、 $Y \text{ lig}_i$ (ベクトルの大きさ)は、加える摂動で、座標の回転移動、平行移動、単結合の回転の操作に対して、リガンド座標が以下の範囲で座標変換されるように発生する乱数である。

【0032】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記結合物質座標変化手段は、上記結合物質に対応する立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行い、上記結合物質に対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させることを特徴とする。

【0033】

これは結合物質座標変化手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、結合物質に対応する立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行い、結合物質に対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させるので、リガンドに対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を構築することができる。

【0034】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記構造変化手段は、上記タンパク質の公開用構造データを、C原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみC原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成する公開用構造データ作成手段をさらに備えたことを特徴とする。

【0035】

これは構造変化手段の一例を一層具体的に示すものである。この装置によれば、タンパク質の公開用構造データを、C原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみC原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成するので、タンパク質立体構造の概要を把握でき、かつ構造上の重要な部分(ループ構造をとる活性部位など)は失った構造である公開用構造データを作成することができる。

【0036】

また、本発明の構造情報処理装置は、上記記載の構造情報処理装置において、上記タンパク質の構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納する契約情報格納手段と、上記構造情報創作者と上記構造情報利用者との間で上記タンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に上記構造データの

10

20

30

40

50

契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段とをさらに備えたことを特徴とする。

【0037】

この装置によれば、タンパク質の構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納し、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にするので、公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

10

【0038】

また、本発明は構造情報処理方法に関するものであり、本発明の構造情報処理方法は、タンパク質の構造データを取得する構造データ取得ステップと、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップとを含むことを特徴とする。

20

【0039】

この方法によれば、タンパク質の構造データを取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成するので、タンパク質立体構造の概要を把握でき、かつ構造上の重要な部分（ループ構造をとる活性部位など）は失った構造である公開用構造データを作成することができる。

30

【0040】

すなわち、公開用構造データは、ユーザ（構造情報利用者）のタンパク質立体構造を把握するという要求と、サプライヤー（構造情報提供者）のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たすことができる。

【0041】

これにより、この公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

40

【0042】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記構造変化ステップは、上記構造変化ステップにより作成された構造変化後の構造データが、上記タンパク質の機能を失っているか否かを判定する機能判定ステップをさらに含み、上記機能判定ステップにより機能を失ったと判定されるまで、構造変化させることを特徴とする。

【0043】

50

これは構造変化ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、作成された構造変化後の構造データが、タンパク質の機能を失っているか否かを判定し、機能を失ったと判定されるまで構造変化させるので、公開用構造データについて確実に構造変化が機能を失う（例えば、重要な活性部位を失うなど）まで構造変化を行うことができるようになる。

【0044】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記構造変化ステップは、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出する2次構造判定ステップと、上記タンパク質の上記構造データのエネルギー指標となる目的関数について、上記ヘリックス部分および上記シート部分は固定するように、一方上記ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、上記タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整する目的関数調節ステップとをさらに含むことを特徴とする。

10

【0045】

これは構造変化ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、取得した上記構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出し、タンパク質の構造データのエネルギー指標となる目的関数について、ヘリックス部分およびシート部分は固定するように、一方ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整するので、タンパク質の原子の位置のエネルギーの指標となる目的関数に摂動を加える際に、ヘリックス、シート部分は固定するように、ループ部分は変化しやすくするようなタンパク質の動的な性質を反映したパラメータとして、タンパク質の二次構造判定結果から得られる各アミノ酸残基のヘリックスやシートの判定、もしくはタンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いた立体構造のゆらぎにくさを使用し、目的関数に取り込んで「公開用構造データ」の構築に使用することができる。

20

【0046】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記目的関数調節ステップは、上記目的関数 (U_{pos}) を以下の数式で計算し、

30

【数4】

$$U_{pos} = K_{pos} \sum_i \|X_i - X_i^*\|$$

(ここで、 U_{pos} はタンパク質の原子位置に関するエネルギーを指標とする目的関数、 K_{pos} はタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数(例えば、 $0 < K_{pos} < 1$ である。)、 X_i は摂動を加えた後のタンパク質の*i*残基目の座標、 X_i^* は摂動を加える前のタンパク質の*i*残基目の座標である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

40

加える摂動の大きさを以下の数式のように設定することを特徴とする。

$$X_i^{post} = X_i^{pre} + Y_i$$

(ここで、 Y_i はタンパク質の*i*残基目の座標に加える摂動()、 X_i^{pre} は摂動を加える前のタンパク質の*i*残基目の座標、 X_i^{post} は摂動を加えた後のタンパク質の*i*残基目の座標である。)

【0047】

これは目的関数調節ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数 (U_{pos}) に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルロ法に工夫を加えて修正し、上記

50

の計算式からなるタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (K_{pos})、およびタンパク質の位置からタンパク質の原子位置の微小の移動に対応する摂動の大きさ (Y_i) などを用いるので、目的関数の調節を摂動の大きさなどを適切に反映して行うことができる。

【0048】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記目的関数調節ステップは、加える摂動に関する関数 Y_i を以下の数式で計算することを特徴とする。

$$Y_i = P \times T_i$$

(ここで、 T_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの大きさ、 P は Y_i のノルム (ベクトルの大きさ) を 0 より大きく 5 より小さい値にするよう調整しながら発生する乱数である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

10

【0049】

これは目的関数調節ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数 (U_{pos}) に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルロ法に工夫を加えて修正し、以下の計算式からなるタンパク質の位置からタンパク質の原子位置の微小の移動に対応する摂動の大きさ (Y_i) に、タンパク質のゆらぎにあたるやわらかさを指標としたパラメータに依存した定数 (T_i) を用いることにより、現実のタンパク構造により近いモデルを作成することができるようになる。

20

【0050】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記目的関数調節ステップは、タンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (K_{pos}) を以下の数式で計算することを特徴とする。

$$K_{pos} = M \times S_i$$

(ここで、 S_i は上記タンパク質の i 番目残基の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎの値を反映したパラメータであり S_i は T_i の値が大きいと小さくなる揺らぎに対応した定数、 M は K_{pos} を 0 ~ 1 までの値にする調整因子である。上式に示した値は規定値を示すが、変更可能な値であり、本請求項の範囲を制限するものではない。)

30

【0051】

これは目的関数調節ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、この方法によれば、タンパク質の原子の位置に拘束するエネルギー指標の目的関数 (U_{pos}) に対して、目的関数に摂動を加え、座標を変化させる際に、タンパク質の原子の位置をエネルギー的に安定な点をめざしてランダムに移動するためのモンテカルロ法に工夫を加えて修正し、以下の計算式からなるタンパク質の原子位置に関する関数の比例定数 (K_{pos}) に、タンパク質のゆらぎにあたるやわらかさを指標としたパラメータに依存した定数 (S_i) を用いることにより、現実のタンパク構造により近いモデルを作成することができるようになる。

40

【0052】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記構造変化ステップは、上記タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、上記結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させる結合物質座標変化ステップをさらに含むことを特徴とする。

【0053】

これは構造変化ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、この方法によれば、タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させるので、タンパク質座標に関しては、機能に重要な部分の構造を失った座標にするとともに、リガンドの立体

50

構造座標を、リガンドに対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を構築することができる。

【0054】

ここで、リガンドに加える摂動の計算式の一例を以下に示す。

$$X \text{ lig}_i^{\text{post}} = X \text{ lig}_i^{\text{pre}} + Y \text{ lig}_i$$

ここで、 $Y \text{ lig}_i$ はリガンドの*i*原子の座標に加える摂動()、 $X \text{ lig}_i^{\text{pre}}$ は摂動を加える前のリガンドの*i*原子の座標、 $X \text{ lig}_i^{\text{post}}$ は摂動を加えた後のリガンドの*i*原子の座標である。また、 $Y \text{ lig}_i$ (ベクトルの大きさ)は、加える摂動で、座標の回転移動、平行移動、単結合の回転の操作に対して、リガンド座標が以下の範囲で座標変換されるように発生する乱数である。

10

【0055】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記結合物質座標変化ステップは、上記結合物質に対応する立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行い、上記結合物質に対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させることを特徴とする。

【0056】

これは結合物質座標変化ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、結合物質に対応する立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち

20

【0057】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記構造変化ステップは、上記タンパク質の公開用構造データを、C原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみC原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成する公開用構造データ作成ステップをさらに含むことを特徴とする。

30

【0058】

これは構造変化ステップの一例を一層具体的に示すものである。この方法によれば、タンパク質の公開用構造データを、C原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、上記タンパク質の機能に重要な部分のみC原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成するので、タンパク質立体構造の概要を把握でき、かつ構造上の重要な部分(ループ構造をとる活性部位など)は失った構造である公開用構造データを作成することができる。

【0059】

また、本発明の構造情報処理方法は、上記記載の構造情報処理方法において、上記タン

40

【0060】

この方法によれば、タンパク質の構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納し、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約

50

済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にするので、公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

10

【0061】

また、本発明はプログラムに関するものであり、本発明のプログラムは、上記記載された構造情報処理方法をコンピュータに実行させるためのプログラムであることを特徴とする。

【0062】

このプログラムによれば、当該プログラムをコンピュータに読み取らせて実行することによって、上記記載された構造情報処理方法をコンピュータを利用して実現することができる。これら各方法と同様の効果を得ることができる。

【0063】

また、本発明は記録媒体に関するものであり、本発明の記録媒体は、上記記載された構造情報処理方法をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録したことを特徴とする。

20

【0064】

この記録媒体によれば、当該記録媒体に記録されたプログラムをコンピュータに読み取らせて実行することによって、上記記載された構造情報処理方法をコンピュータを利用して実現することができる。これら各方法と同様の効果を得ることができる。

【0065】

また、本発明は構造情報受発注システムに関するものであり、本発明の構造情報受発注システムは、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、上記構造情報処理装置は、タンパク質の構造データを取得する構造データ取得手段と、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段とを備え、上記構造情報利用者の情報端末装置は、上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧手段と、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段とを備えたことを特徴とする。

30

40

【0066】

このシステムによれば、構造情報処理装置は、タンパク質の構造データを取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成し、作成された公開用構造デー

50

タおよび構造データの契約情報を構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にし、情報利用者の情報端末装置からタンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする。

【0067】

また、構造情報利用者の情報端末装置は、閲覧可能にされた、公開用構造データおよび構造データの契約情報を閲覧し、購入するタンパク質の構造データに対する発注情報を送信し、発注情報を送信したタンパク質の構造データを受信する。

【0068】

これにより、公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

【0069】

また、本発明の構造情報受発注システムは、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、上記構造情報処理装置は、上記構造情報利用者の情報端末装置から任意のタンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得手段と、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段とを備え、上記構造情報利用者の情報端末装置は、上記タンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段と、上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧手段と、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段とを備えたことを特徴とする。

【0070】

このシステムによれば、構造情報処理装置は、上記構造情報利用者の情報端末装置から任意のタンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成し、作成された公開用構造データおよび構造データの契約情報を構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にし、情報利用者の情報端末装置からタンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする。

10

20

30

40

50

【0071】

また、構造情報利用者の情報端末装置は、タンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信し、閲覧可能にされた、公開用構造データおよび構造データの契約情報を閲覧し、購入するタンパク質の構造データに対する発注情報を送信し、発注情報を送信したタンパク質の構造データを受信する。

【0072】

これにより、構造情報利用者からタンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信させ、そのアミノ酸配列に基づいて作成した構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

10

【0073】

また、本発明の構造情報受発注システムは、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、上記構造情報処理装置は、上記構造情報創作者の情報端末装置からタンパク質の構造データを取得する構造データ取得手段と、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段とを備え、上記構造情報創作者の情報端末装置は、上記タンパク質の構造データを上記構造情報処理装置に対して送信する構造データ登録手段を備え、上記構造情報利用者の情報端末装置は、上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧手段と、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段とを備えたことを特徴とする。

20

30

【0074】

このシステムによれば、構造情報処理装置は、構造情報創作者の情報端末装置からタンパク質の構造データを取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成し、作成された公開用構造データおよび構造データの契約情報を構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にし、情報利用者の情報端末装置からタンパク質の構造データに対する発注情報を受信し構造情報利用者と構造情報創作者との間の契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする。

40

【0075】

また、構造情報創作者の情報端末装置は、タンパク質の構造データを構造情報処理装置に

50

対して送信する。

【0076】

また、構造情報利用者の情報端末装置は、閲覧可能にされた、公開用構造データおよび構造データの契約情報を閲覧し、購入するタンパク質の構造データに対する発注情報を送信し、発注情報を送信したタンパク質の構造データを受信する。

【0077】

これにより、構造情報創作者が登録したタンパク質構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

【0078】

また、本発明の構造情報受発注システムは、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムであって、上記構造情報処理装置は、上記構造情報創作者の情報端末装置から任意のタンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得手段と、上記構造データ取得手段にて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段と、上記構造変化手段にて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段と、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段と、上記契約情報管理手段により上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信手段とを備え、上記構造情報創作者の情報端末装置は、上記タンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段を備え、上記構造情報利用者の情報端末装置は、上記公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧手段と、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注手段と、上記発注手段にて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信手段とを備えたことを特徴とする。

【0079】

このシステムによれば、構造情報処理装置は、構造情報創作者の情報端末装置から任意のタンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得し、取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成し、作成された公開用構造データおよび構造データの契約情報を構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にし、情報利用者の情報端末装置からタンパク質の構造データに対する発注情報を受信し構造情報利用者と構造情報創作者との間の契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする。

【0080】

また、構造情報創作者の情報端末装置は、タンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信する。

【0081】

また、構造情報利用者の情報端末装置は、閲覧可能にされた、公開用構造データおよび構造データの契約情報を閲覧し、購入するタンパク質の構造データに対する発注情報を送信し、発注情報を送信したタンパク質の構造データを受信する。

【0082】

これにより、構造情報創作者が登録したタンパク質のアミノ酸配列に基づいて作成した構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

【0083】

また、本発明は構造情報受発注方法に関するものであり、本発明の構造情報受発注方法は、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、上記構造情報処理装置において、タンパク質の構造データを取得する構造データ取得ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、上記構造情報処理装置において、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、上記構造情報処理装置において、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップとを含むことを特徴とする。

【0084】

この方法によれば、公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモ

10

20

30

40

50

デルが提供できる。

【0085】

また、本発明の構造情報受発注方法は、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、上記構造情報利用者の情報端末装置において、任意の上記タンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の上記アミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、上記構造情報処理装置において、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップとを含むことを特徴とする。

10

20

【0086】

この方法によれば、構造情報利用者からタンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信させ、そのアミノ酸配列に基づいて作成した構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

30

【0087】

また、本発明の構造情報受発注方法は、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、上記構造情報創作者の情報端末装置において、上記タンパク質の構造データを上記構造情報処理装置に対して送信する構造データ登録ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造情報創作者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データを取得する構造データ取得ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造変化ステ

40

50

ップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、上記構造情報処理装置において、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、上記構造情報処理装置において、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記発注ステップにて上記発注情報を送信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップとを含むことを特徴とする。

10

【0088】

この方法によれば、構造情報創作者が登録したタンパク質構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

20

【0089】

また、本発明の構造情報受発注方法は、タンパク質の構造に関する情報を処理する構造情報処理装置と、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された構造情報受発注システムを用いて行われる構造情報受発注方法であって、上記構造情報創作者の情報端末装置において、任意のタンパク質のアミノ酸配列を上記構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造情報創作者の情報端末装置から上記タンパク質の上記アミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造データ取得ステップにて取得した上記構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、上記タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化ステップと、上記構造情報処理装置において、上記構造変化ステップにて作成された上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を上記構造情報利用者の情報端末装置から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記公開用構造データ閲覧ステップにより閲覧可能にされた、上記公開用構造データおよび上記構造データの契約情報を閲覧する閲覧ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、購入する上記タンパク質の上記構造データに対する発注情報を送信する発注ステップと、上記構造情報処理装置において、上記情報利用者の情報端末装置から上記タンパク質の構造データに対する発注情報を受信し上記構造情報利用者と上記構造情報創作者との間の契約が成立した場合に上記構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理ステップと、上記構造情報処理装置において、上記契約情報管理ステップにより上記契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者の情報端末装置に対して当該構造データを送信可能にする構造データ送信ステップと、上記構造情報利用者の情報端末装置において、上記発注ステップにて上記発注情報を送

30

40

50

信した上記タンパク質の上記構造データを受信する構造データ受信ステップとを含むことを特徴とする。

【0090】

この方法によれば、構造情報創作者が登録したタンパク質のアミノ酸配列に基づいて作成した構造データを構造変化した公開用構造データを、構造モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発などに大切な活性部位情報などを失った構造（公開用タンパク質立体構造座標サンプル）として無料または低価格で構造情報利用者に譲渡し（例えば、タンパクの立体構造のデータベースまたはタンパク質立体構造作成サービスに従って得られたモデル構造について、C座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報を構造情報利用者に無料または低価格で提供）、構造情報創作者（構造情報提供者を含む）と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に、その公開構造データの作成の基となったタンパク質構造データやその機能付加データベース、タンパク質立体構造作成サービス等を有償で販売するというようなビジネスモデルが提供できる。

10

【0091】

【発明の実施の形態】

以下に、本発明にかかる構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法の実施の形態を図面に基づいて詳細に説明する。なお、この実施の形態によりこの発明が限定されるものではない。

【0092】

[本発明の概要]

以下、本発明の構造情報受発注システム（以下、「本システム」という。）の概要について説明し、その後、本システムの構成および処理等について詳細に説明する。図1は本発明の基本原理を説明する概念図である。また、図2は本システムの全体構成の一例を示すブロック図であり、該システム構成のうち本発明に係る部分のみを概念的に示している。

20

【0093】

本システムは、図2に示すように、概略的に、タンパク質の構造に関する情報を処理し、構造情報提供者によって管理された構造情報処理装置100と、構造情報創作者または構造情報利用者の情報端末装置200とを、ネットワーク300を介して通信可能に接続して構成されている。

30

【0094】

このシステムは、概略的に、以下の基本的特徴を有する。すなわち、図1に示すように、本発明者等は、構造情報利用者のタンパク質立体構造を把握するという要求と、構造情報提供者のタンパク質立体構造の重要な部分は保護するという要求を同時に満たすものとして、タンパク質等の構造データに基づいて、タンパク質の機能に重要な部分の構造を失った座標を構築し、公開用構造データを作成する構造変化処理を実現する構造情報処理装置100を開発した。

【0095】

さらに、タンパク質の機能に重要な部分の構造を失った座標を有する公開用構造データを一般公開用のサンプルとして構造情報利用者の情報端末装置200に無料提供することで、構造情報提供者のタンパク質立体構造の重要な部分は保護することと、構造情報利用者のタンパク質立体構造を把握することを同時に満たすことが可能となり、公開用構造データを広告媒体もしくは構造情報利用者の評価サンプルとすれば、タンパク質座標（またはシークエンス）、作成サービス等のバイオインフォマティクス技術によって算出されるデータやサービスの販売を効率的に進める新しいビジネスモデルを提供できることを見出した。

40

【0096】

タンパク質の機能に重要な部分の構造を失った「公開用構造データ」は、例えば、タンパク質の立体構造に関して、タンパク質立体構造のエネルギー指標となる目的関数をヘリッ

50

クス、シート部分は固定するように、ループ部分は変化しやすくするように調整し、目的関数に摂動を加え座標を変化させてもよく、また、C 原子のみから構成される座標として、または主鎖原子のみから構成させる座標として、または、タンパク質の機能に重要な部分のみC 原子もしくは主鎖原子から構成する座標として構築してもよい。こうした手法により、全体の立体構造の特徴を失うことなく、かつ機能に重要な部分の構造を失った構造を提供することができる。

【0097】

[システム構成]

以下、このような基本的特徴を具現化するための、本システムの構成について説明する。

【0098】

[システム構成 構造情報処理装置100]

まず、構造情報処理装置100の構成について図3～図5を参照して説明する。

図3は、本発明が適用される構造情報処理装置100の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。図3において構造情報処理装置100は、概略的に、構造情報処理装置100の全体を統括的に制御するCPU等の制御部102、通信回線等に接続されるルータ等の通信装置(図示せず)に接続される通信制御インターフェース部104、入力装置112や出力装置114に接続される入出力制御インターフェース部108、および、各種のデータベースやファイル等(利用者情報データベース106a～契約情報データベース106d)を格納する記憶部106を備えて構成されており、これら各部は任意の通信路を介して通信可能に接続されている。さらに、この構造情報処理装置100は、ルータ等の通信装置および専用線等の有線または無線の通信回線を介して、ネットワーク300に通信可能に接続されている。

【0099】

図3において、記憶部106に格納される各種のデータベースやファイル等(利用者情報データベース106a～契約情報データベース106d)は、固定ディスク装置等のストレージ手段であり、各種処理やウェブサイト提供に用いる各種のプログラムやテーブルやファイルやデータベースやウェブページ用ファイル等を格納する。

【0100】

これら記憶部106の各構成要素のうち、利用者情報データベース106aは、本システムの利用者(構造情報利用者および構造情報創作者を含む)に関する情報(利用者情報)を格納する利用者情報格納手段である。図4は、利用者情報データベース106aに格納される利用者情報の一例を示す図である。

【0101】

この利用者情報データベース106aに格納される情報は、図4に示すように、各利用者を一意に識別するための利用者ID、各利用者が正当な者であるか否かの認証を行うための利用者パスワード、各利用者の氏名、各利用者の所属する所属先を一意に識別するための所属先ID、各利用者の所属する所属先の部門を一意に識別するための部門ID、および、各利用者の電子メールアドレスなどを相互に関連付けて構成されている。

【0102】

また、構造データファイル106bは、タンパク質の構造データに関する情報等を格納する構造データ格納手段である。構造データファイル106bは、インターネットを経由してアクセスする外部のタンパク質構造データベースであってもよく、また、これらのデータベースをコピーしたり、オリジナルの構造情報を格納したり、さらに独自のアノテーション情報等を付加したりして作成したインハウスデータベースであってもよい。

【0103】

この構造データファイル106bに格納される情報は、タンパク質や複合体を一意に識別するための識別情報、タンパク質や複合体の各種の属性に関する属性情報、タンパク質や複合体の立体構造データ等を相互に関連付けて構成されている。

【0104】

また、公開用構造データファイル106cは、公開用構造データに関する情報等を格納す

10

20

30

40

50

る公開用構造データ格納手段である。

【0105】

この公開用構造データファイル106cに格納される情報は、タンパク質や複合体を一意に識別するための識別情報、タンパク質や複合体の各種の属性に関する属性情報、タンパク質や複合体の公開用構造データ等を相互に関連付けて構成されている。

【0106】

また、契約情報データベース106dは、タンパク質の構造データへのアクセスなどの契約に関する情報等を格納する契約情報格納手段である。

【0107】

この契約情報データベース106dに格納される情報は、タンパク質や複合体を一意に識別するための識別情報、構造情報創作者、構造情報利用者、対価、契約済みフラグ等を相互に関連付けて構成されている。

10

【0108】

また、その他の情報として、構造情報処理装置100の記憶部106には、ウェブサイトを情報端末装置200に提供するための各種のWebデータやCGIプログラム等が記録されている。

【0109】

このWebデータとしては、後述する各種のWebページを表示するためのデータ等があり、これらデータは、例えば、HTMLやXMLにて記述されたテキストファイルとして形成されている。また、これらのWebデータを作成するための部品用のファイルや作業用のファイルやその他一時的なファイル等も記憶部106に記憶される。

20

【0110】

この他、必要に応じて、情報端末装置200に送信するための音声をWAVE形式やAIF形式の如き音声ファイルで格納したり、静止画や動画をJPEG形式やMPEG2形式の如き画像ファイルで格納したりすることができる。

【0111】

また、図3において、通信制御インターフェース部104は、構造情報処理装置100とネットワーク300（またはルータ等の通信装置）との間における通信制御を行う。すなわち、通信制御インターフェース部104は、他の端末と通信回線を介してデータを通信する機能を有する。

30

【0112】

また、図3において、入出力制御インターフェース部108は、入力装置112や出力装置114の制御を行う。ここで、出力装置114としては、モニタ（家庭用テレビを含む）の他、スピーカを用いることができる（なお、以下においては出力装置をモニタとして記載する）。また、入力装置112としては、キーボード、マウス、および、マイク等を用いることができる。また、モニタも、マウスと協働してポインティングデバイス機能を実現する。

【0113】

また、図3において、制御部102は、OS（Operating System）等の制御プログラム、各種の処理手順等を規定したプログラム、および所要データを格納するための内部メモリを有し、これらのプログラム等により、種々の処理を実行するための情報処理を行う。制御部102は、機能概念的に、要求解釈部102a、閲覧処理部102b、認証処理部102c、電子メール生成部102d、Webページ生成部102e、送信部102f、構造データ取得部102g、構造変化部102h、および、契約情報管理部102iを備えて構成されている。

40

【0114】

このうち、要求解釈部102aは、情報端末装置200からの要求内容を解釈し、その解釈結果に応じて制御部の他の各部に処理を受け渡す要求解釈手段である。

【0115】

また、閲覧処理部102bは、情報端末装置200からの各種画面の閲覧要求を受けて、

50

これら画面の Web データの生成や送信を行なう閲覧処理手段、構造変化部 102h にて作成された公開用構造データおよび構造データの契約情報を構造情報利用者の情報端末装置 200 から閲覧可能にする公開用構造データ閲覧手段である。

【0116】

また、認証処理部 102c は、情報端末装置 200 からの認証要求を受けて、この認証判断を行なう認証処理手段である。

【0117】

また、電子メール生成部 102d は、各種の情報を含んだ電子メールを生成する電子メール生成手段である。

【0118】

また、Web ページ生成部 102e は、本システムの利用者が閲覧する Web ページを生成する Web ページ生成手段である。

【0119】

また、送信部 102f は、各種の情報を当該利用者の情報端末装置 200 に送信する送信手段、契約情報管理部 102i により契約済みフラグが設定された場合に構造情報利用者に対して構造データを送信可能にする構造データ送信手段である。

【0120】

また、構造データ取得部 102g は、タンパク質の構造データを取得する構造データ取得手段、構造情報創作者の情報端末装置 200 からタンパク質の構造データを取得する構造データ取得手段、構造情報利用者または構造情報創作者の情報端末装置 200 から任意のタンパク質のアミノ酸配列を受信し、当該タンパク質の構造データを新規構築することにより取得する構造データ取得手段である。

【0121】

また、構造変化部 102h は、構造データ取得手段にて取得した構造データについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成する構造変化手段である。ここで、図5は、構造変化部 102h の構成の一例を示すブロック図である。図5に示すように、構造変化部 102h は、機能判定部 102j、2次構造判定部 102k、目的関数調節部 102m、結合物質座標変化部 102n、および、公開用構造データ作成部 102p を含んで構成される。

【0122】

図5において、機能判定部 102j は、構造変化手段により作成された構造変化後の構造データが、タンパク質の機能を失っているか否かを判定する機能判定手段である。

【0123】

また、2次構造判定部 102k は、構造データ取得手段にて取得した構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出する2次構造判定手段である。

【0124】

また、目的関数調節部 102m は、タンパク質の構造データのエネルギー指標となる目的関数について、ヘリックス部分およびシート部分は固定するように、一方ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整する目的関数調節手段である。

【0125】

また、結合物質座標変化部 102n は、タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質の構造が含まれている場合に、結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させる結合物質座標変化手段である。

【0126】

また、公開用構造データ作成部 102p は、タンパク質の公開用構造データを、C 原子のみから構成される座標、主鎖原子のみから構成される座標、主鎖および側鎖原子から構成される座標、タンパク質の機能に重要な部分のみ C 原子または主鎖原子から構成される座標、のうち少なくとも一つの座標を有する構造データとして作成する公開用構造デー

10

20

30

40

50

タ作成手段である。

【0127】

再び図3に戻り、契約情報管理部102iは、タンパク質の構造データに関する、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を契約情報データベース106dに格納し、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定する契約情報管理手段である。

【0128】

なお、これら各部によって行なわれる処理の詳細については、後述する。

【0129】

[システム構成 - 情報端末装置200]

次に、情報端末装置200の構成について図6を参照して説明する。

図6は、本発明が適用される情報端末装置200の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に係る部分のみを概念的に示している。この図6に示すように、情報端末装置200は、概略的には、制御部210、ROM220、HD230、RAM240、入力装置250、出力装置260、入出力制御インターフェース270、および、通信制御インターフェース280を備えて構成されており、これら各部がバスを介してデータ通信可能に接続されている。

【0130】

この情報端末装置200の制御部210は、Webブラウザ211および電子メール212を備えて構成され、公開用構造データ閲覧手段により閲覧可能にされた、公開用構造データおよび構造データの契約情報を閲覧する閲覧手段、購入するタンパク質の構造データに対する発注情報を送信する発注手段、発注手段にて発注情報を送信したタンパク質の構造データを受信する構造データ受信手段、タンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段、タンパク質の構造データを構造情報処理装置に対して送信する構造データ登録手段、タンパク質のアミノ酸配列を構造情報処理装置に対して送信するアミノ酸配列送信手段として機能する。

【0131】

このうち、Webブラウザ211は、基本的には、Webデータを解釈して、後述するモニタ261に表示させる表示制御(ブラウズ処理)を行うものである。また、Webブラウザ211は、ストリーム映像の受信、表示、フィードバック等を行う機能を備えたストリームプレイヤー等の各種のソフトウェアをプラグインしてもよい。

【0132】

また、電子メール212は、所定の通信規約(例えば、SMTP(Simple Mail Transfer Protocol)やPOP3(Post Office Protocol version 3)等)に従って、電子メールの送受信を行う。

【0133】

また、入力装置250としては、キーボード、マウス、および、マイク等を用いることができる。また、後述するモニタ261も、マウスと協働してポインティングデバイス機能を実現する。

【0134】

また、出力装置260としては、モニタ(家庭用テレビを含む)261、および、プリンタ262が設けられている。この他、出力装置260としては、スピーカ等を用いることができる。出力装置260は、通信制御IF280を介して受信された情報を出力する出力手段である。

【0135】

また、通信制御IF280は、情報端末装置200とネットワーク300(またはルータ等の通信装置)との間における通信制御を行う。この通信制御IF280は、構造情報処理装置100から送信された情報を受信する受信手段である。

【0136】

10

20

30

40

50

このように構成された情報端末装置 200 は、モデム、T A、ルータ等の通信装置と電話回線を介して、あるいは、専用線を介して、ネットワーク 300 に接続されており、所定の通信規約（たとえば、TCP/IP インターネットプロトコル）に従って構造情報処理装置 100 にアクセスすることができる。

【0137】

[システム構成 - ネットワーク 300]

次に、ネットワーク 300 の構成について説明する。ネットワーク 300 は、構造情報処理装置 100 と情報端末装置 200 とを相互に接続する機能を有し、例えば、インターネット等である。

【0138】

[システムの処理]

次に、このように構成された本実施の形態における本システムの処理の一例について、以下に図 3 ~ 図 37 を参照して詳細に説明する。なお、以下の実施例において、情報端末装置 200 のモニタ 261 に表示される各種の画面情報は、特記しない限り構造情報処理装置 100 が作成して情報端末装置 200 に送信している場合を一例に説明するが、本発明はこの場合に限定されるものではなく、情報端末装置 200 の記憶部に予め画面情報の少なくとも一部を格納しておき、情報端末装置 200 の制御部 210 の制御により必要な画面情報を適宜読み出して表示してもよい。

【0139】

[実施例 1 : リゾチーム抗体の C 原子座標のみのモデリング例]

次に、実施例 1 の詳細について図 7 ~ 図 10などを参照して説明する。図 7 は、本実施形態における本システムの実施例 1 の一例を示すフローチャートである。

【0140】

治療、診断として使用されている抗体において、抗原との相互作用に関する詳細な理解は大変重要であり、抗体と抗原との立体構造は、その役割を担う解析方法である。こうした情報を用いることにより、抗原に対し、より選択性、活性とも優れた抗体設計を行うことが可能となる。

【0141】

本実施例においては、抗体の立体構造に際し、動的挙動を考慮して、立体構造を変化させた C 原子のみの立体構造を構築することで、C 座標のみから判断できる抗体のタンパク質表面に局在する抗原部位のような部分的な機能情報提供することが可能であり、かつこうした座標に主鎖や側鎖原子を付加して立体構造を構築した場合には、相互作用情報は失われてしまうことを示す。

【0142】

リゾチームとリゾチーム抗体の複合体の立体構造は多く解析されており、PDB データベース中にも数多く登録されている。うち、K. Decannier らの報告したトリの卵のリゾチームとラクダの抗体の抗原結合部分 (c - A b - L y s 3) との複合体の立体構造は、抗原と抗体の立体配置の微妙な違いは、抗原と抗体の相互作用表面に大きな影響を引き起こすことを示した。(Decanniere, K., Transue, T. R., Desmyter, A., Maes, D., Muyldermans, S., Wyns, L.: Degenerate Interfaces in Antigen - Antibody Complexes J. Mol. Biol. 313 pp. 473 (2001)). PDB としては、1JTO、1JTP、1JTT として登録されている。

【0143】

まず、構造情報処理装置 100 は、構造データ取得部 102 g の処理により、構造データファイル 106 b にアクセスして、構造データを取得する (ステップ SA - 1)。本実施例においては、PDB から 1JTO の A 鎖 (c - A b - L y s 3) を取得した。

【0144】

そして、構造情報処理装置 100 は、構造変化部 102 h の処理により、取得した構造デ

10

20

30

40

50

ータについて、2次構造がループとなる部分の構造を変化させた構造データを作成することにより、タンパク質の公開用構造データを作成する。公開用構造データの作成の具体例について以下に詳細に説明する。

【0145】

本実施例においては、1JTOのA鎖(c - A b - L y s 3)を用いて、タンパク質も動的挙動を考慮して、立体構造を変化させたC 原子のみの立体構造を構築した。

【0146】

構造変化部102hは、2次構造判定部102kの処理により、取得した1JTOのA鎖の構造データについて、2次構造判定を行いヘリックス部分、シート部分およびループ部分の構造を抽出する(ステップSA-2)。ここで、2次構造判定の手法は、いずれの既知の2次構造判定プログラムなどを用いてもよい。

10

【0147】

そして、構造変化部102hは、目的関数調節部102mの処理により、タンパク質の構造データのエネルギー指標となる目的関数について、ヘリックス部分およびシート部分は固定するように、一方ループ部分は変化するように摂動を加えて、および/または、タンパク質の基準振動解析の計算から得られる常温付近のゆらぎのデータを用いて、調整する(ステップSA-3)。

【0148】

本実施例においては、ループとして判定された部分に関しては、 U_{pos} に対するモンテカルロ法の摂動の式において、その摂動の大きさ Y_i を決める R の値を4、 U_{pos} 中の K_{pos} の値を0.1に設定している。

20

【0149】

そして、構造変化部102hは、公開用構造データ作成部102pの処理により、まずC 原子のみの立体構造を公開用構造データとして構築する(ステップSA-4)。

【0150】

図8および図9に、モデリングしたC 原子のみの座標(公開用構造データ)と、構造変化させる前の立体構造をグラフィックで表示させた場合の一例を示す。図8は、1JTOのA鎖を構造変化させたC 原子座標のみのモデル(公開用構造データ)の3次元表示例を示す図である。図9は、1JTOのA鎖の立体構造データのモデル(構造データ)の3次元表示例を示す図である。

30

【0151】

このようにして作成したC 原子のみの座標においては、座標変化させる前の立体構造と比較して、全体の立体構造の特徴を失うことなく、リゾチームとの結合部分であるループ部分が構造の自由度の高いことを示すモデルとして提供することができる。

【0152】

次に、構造変化部102hは、公開用構造データ作成部102pの処理により、作成したC 原子のみの座標に主鎖、側鎖を付加して、立体構造を作成し(ステップSA-5)、その構造に対して、本来1JTOのA鎖(c - A b - L y s 3)と結合しているリゾチームの立体構造(1JTOのL鎖)を加えた。

【0153】

ここで、構造変化部102hは、結合物質座標変化部102nの処理により、タンパク質の構造データに、リガンドを含む結合物質(本実施例におけるリゾチーム)の構造が含まれている場合に、結合物質に対応する立体構造座標に摂動を加えて変化させてもよい。すなわち、結合物質座標変化部102nは、結合物質に対応する立体構造座標について、重心を中心に $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で回転移動、 $0 \sim 1$ の範囲で平行移動、 $0^\circ \sim 30^\circ$ の範囲で単結合の回転移動、のうち少なくとも一つの座標移動を行い、結合物質に対しても機能に重要な部分の構造を失うように座標を変化させる。

40

【0154】

また、構造変化部102hは、機能判定部102jの処理により、作成された構造変化後の構造データが、タンパク質の機能を失っているか否かを判定し、機能を失ったと判定さ

50

れるまで構造変化させてもよい(ステップS A - 6)。

【0155】

図10に構造変位させたC 原子のみの座標に主鎖および側鎖を付加して作成した立体構造と座標変化させる前の立体構造(1JTOのA鎖)にリゾチームの立体構造(1JTOのL鎖)を加えた立体構造に関して、その結合部分の拡大図をグラフィックで表示した場合の一例を示す。

【0156】

図10は、リゾチーム(1JTOのL鎖:black)とモデル立体構造(構造変位Cを用いて作成した抗体モデル:dark grey)および抗体(1JTOのA鎖:grey)の結合部分の拡大図の一例を示す図である。

10

【0157】

図10では、リゾチーム立体構造中に表示したアミノ酸残基の側鎖はモデル立体構造との間にファンデルワールスの原子が衝突していることを示す。

【0158】

そして、構造情報処理装置100は、構造変化部102hの処理により、作成した公開用構造データを公開用構造データファイル106cに格納する。

【0159】

このように、作成した複合体においては、本来結合している表面部分においてファンデルワールスの原子の衝突がおり、正しい複合体の立体構造として利用できないことがわかる。よって、妥当な複合体の立体構造がデータベース中にある場合は、これを利用すべきであることが明確になる。すなわち、構造変位させたC 原子のみの座標を表示したことにより、データベース中に存在している妥当な立体構造の産業的利用価値を高めることができる。

20

【0160】

このように、構築済みのタンパク質のC 座標のみのタンパク質モデルの構築を実行し、その構築モデルまたはデータベースを、モデルを使う構造情報利用者に医薬品開発等に大切な活性部位情報などを失った構造として表示することは、C 座標のみから判断できる抗原-抗体反応におけるタンパク質表面に局在部分的な機能情報として構造情報利用者に提供することができ、C 原子のみからなるタンパク質の作成の基となったタンパク質やその機能付加データベースに産業的価値を認めてさせていくことができる。

30

【0161】

例えば、立体構造データベースが存在する場合、そこに含まれる立体構造の情報を評価サンプルとして無料で構造情報利用者に提供する場合は、本実施例で用いた手法により構造変位させたC 原子座標のみの立体構造を用いる。その後、構造情報利用者より立体構造データベース中の主鎖、側鎖も含まれた立体構造の提供を依頼された場合には有料とするといった産業に結びつけることができる。

【0162】

これにて、実施例1が終了する。

【0163】

[実施例2:公開用立体構造座標サンプルを用いた、立体構造データベース「FAMSB ASE」中に含まれるタンパク質立体構造座標の販売例]

40

次に、このように構成された本システムを用いて行なわれる本方法としての実施例2の詳細について図11~図23などを参照して説明する。

【0164】

「FAMSB ASE」は、遺伝研究所で公開している「GTOP」(Genomes T O Protein structures and functions : h YPERLINK "http://spock.genes.nig.ac.jp/~genome/gtop-j.html" t t p : / / s p o c k . g e n e s . n i g . a c . j p / ~ g e n o m e / g t o p - j . h t m l) 内の41生物種の遺伝子についてPSI-BLASTの検索結果を「FAMS」を用いてタンパク質の立体構造を構築し、その座標を保存しているデータベースのことである。「FAM

50

「FAMSBASE」中には18万個の立体構造モデルが保存されている。

【0165】

本実施例では、「FAMSBASE」中のタンパク質立体構造について、公開用立体構造座標サンプルを用いて、構造情報利用者に対して立体構造座標の販売を行う実施例を示す。

【0166】

Epidermal growth factor (EGF) は、細胞膜上に埋まっているEpidermal growth factor受容体 (EGFR) と結合して、特定の細胞の分裂を促進するタンパク質である。EGFとEGFRの細胞外ドメイン部分との複合体の立体構造はX線結晶構造により解析されており、PDBでその立体構造が公開されている (Ogiso, H., Ishitani, R., Nureki, O., Fukai, S., Yamanaka, M., Kim, J. H., Saito, K., Inoue, M., Shirouzu, M., Yokoyama, S.: Crystal Structure of the Complex of Human Epidermal Growth Factor and Receptor Extracellular Domains. Cell (Cambridge, Mass.) 110 pp. 775 (2002)、PDB ID: 1IVO)。

10

【0167】

図12は、EGFの(1JTOのC鎖)の立体構造のグラフィック表示の一例を示す図である。

20

【0168】

EGFRと複合体を形成する可能性があるタンパク質は、EGF以外にも存在することが知られているので、構造情報利用者 (Yoshiaki Watanabe) は「FAMSBASE」に存在している立体構造のうちEGFとシーケンスのホモロジーが高く、かつ立体構造も似ている座標を購入し、EGFR座標とのドッキングシュミレーションを行うこととした。

【0169】

構造情報利用者 (Yoshiaki Watanabe) は、「GTOP」から、興味あるタンパク質として生物種が「Homo sapiens cDNA (huge0)」、遺伝子名が「KIAA1237」の297-353番目の残基部分を選びだした。

30

【0170】

そこで、「FAMSBASE」より「KIAA1237」の297-353番目の残基部分の立体構造座標を購入するにあたり、該当する公開用立体構造座標サンプルを入手し、公開用立体構造サンプルがEGFの立体構造と比較し、形がよく似ていた場合は座標を購入することとした。

【0171】

以下に、構造情報利用者が、構造情報提供者の提供する構造情報処理装置100 (本実施例における「FAMSBASE」である。) から構造データを購入するまでの手順について以下に、図11等を参照して詳細に説明する。

40

【0172】

図11は、本実施形態における本システムの実施例2の一例を示すフローチャートである。

【0173】

まず、構造情報処理装置100は、閲覧処理部102bの処理により、「FAMSBASE」のwebページを公開している (ステップSB-1)。ここで、図13は、構造情報受注用Webページの一例を示す図である。

【0174】

そして、情報端末装置200は、構造情報処理装置100の提供するウェブサイトのアドレス (URL等) を利用者がWebブラウザ211の表示される画面上で入力装置250

50

を介して指定することにより、インターネットを介して、構造情報処理装置 100 に接続する。

【0175】

具体的には、利用者が、情報端末装置 200 の Web ブラウザ 211 を起動し、この Web ブラウザ 211 の所定の入力欄に、本システムの構造情報受注用画面に対応する所定の URL を入力する。そして、利用者が、この Web ブラウザ 211 の画面更新を指示すると、Web ブラウザ 211 は、この URL を通信制御 IF 280 を介して所定の通信規約にて送信し、この URL に基づくルーティングによって構造情報処理装置 100 に対する構造情報受注用 Web ページの送信要求を行う。

【0176】

ついで、構造情報処理装置 100 の要求解釈部 102 a は、情報端末装置 200 からの送信の有無を監視しており、送信を受けると、この送信の内容を解析し、その結果に応じて当該制御部 102 内の各部に処理を移す。送信の内容が構造情報受注用 Web ページの送信要求である場合には、主として閲覧処理部 102 b の制御下において、記憶部 106 から構造情報受注用 Web ページを表示するための Web データを取得し、この Web データを通信制御インターフェース部 104 を介して情報端末装置 200 に送信する（ステップ S A - 2）。ここで、構造情報処理装置 100 から情報端末装置 200 へデータ送信を行う際の情報端末装置 200 の特定は、情報端末装置 200 から送信要求と共に送信された IP アドレスを用いて行う。

【0177】

なお、このように利用者から Web ページの送信要求があった場合には、利用者に利用者 ID およびパスワードの入力を求め、認証処理部 102 c が利用者情報データベース 106 a に格納されている利用者 ID およびパスワードに基づいて認証可否を判断し、認証可の場合にのみ Web ページを閲覧させてもよい（以下においても同様であるためその詳細を省略する）。

【0178】

この情報端末装置 200 は、構造情報処理装置 100 からの Web データを通信制御 IF 280 を介して受信し、このデータを Web ブラウザ 211 にて解釈することにより、モニタ 261 に構造情報受注用 Web ページを表示する。以下、情報端末装置 200 から構造情報処理装置 100 への画面要求と、構造情報処理装置 100 から情報端末装置 200 への Web データの送信、および、情報端末装置 200 における Web ページの表示はほぼ同様に行われるものとし、以下ではその詳細を省略する。

【0179】

この構造情報受注用 Web ページの購入する構造データの選択画面を図 14 に例示する。図 14 のように 41 生物種類の立体構造座標が含まれている。

【0180】

そして、利用者が情報端末装置 200 の入力装置 250 を介していずれかの構造データを選択すると、入力情報および選択事項を特定するための識別子が構造情報処理装置 100 に送信される。

【0181】

そして、構造情報処理装置 100 の要求解釈部 102 a は、この識別子を解析することによって、情報端末装置 200 からの要求の内容を解析する（情報端末装置 200 から構造情報処理装置 100 への要求内容の識別については、以下の処理においてもほぼ同様に行われるものとし、以下ではその詳細を省略する）。

【0182】

そして、構造情報処理装置 100 は、閲覧処理部 102 b の処理により、選択された構造データの詳細データ用の Web ページを情報端末装置 200 に閲覧させる。

【0183】

ここで、本実施例では、生物種が「Homo sapiens cDNA (huge 0)」、遺伝子名が「K I A A 1 2 3 7」の 297 - 353 番目の残基部分の公開用立体構

10

20

30

40

50

造座標サンプルの提供を依頼する。そのため以下の要領で画面上をクリックし、電子メールを利用して公開用立体構造サンプル座標の提供を依頼する。

【0184】

まず、図15に示すように、生物種が「Homo sapiens cDNA (huge 0)」で遺伝子名が「KIAA1237」を選びクリックする。

【0185】

そして、図16に示すように、提供を希望する公開用立体構造サンプル(「KIAA1237」の297-353番目の残基部分)をクリックする。

そして、図17に示すように、電子メールを構造情報提供者(FAMSBASE)へ送信する。

10

【0186】

構造情報処理装置100は、電子メールを受信すると、送信部102fの処理により、対応する公開用構造データを送信する(ステップSB-3)。

【0187】

すなわち、電子メール生成部102dは、送信タイミングに従って、その電子メールの作成内容を含む電子メールデータを生成する。具体的には、利用者の利用者ID等に基づいて利用者情報データベース106aに格納された利用者情報を参照し、この利用者の電子メールアドレスを呼び出す。

【0188】

そして、この電子メールアドレスを宛先とする電子メールであって、利用者の氏名およびメール本文(公開用構造データの添付ファイルを含む)を含む電子メールのメールデータを生成して、このメールデータを送信部102fに受け渡す。そして、送信部102fは、このメールデータを送信する。

20

【0189】

一方、利用者は、情報端末装置200の電子メール212を用いて上記電子メールを任意のタイミングで受信する。この電子メールは電子メール212の公知の機能に基づいてモニタ261に表示される(ステップSA-10)。また、利用者は、必要に応じてこの電子メールの表示内容をプリンタ262にて印刷することができる。

【0190】

そして、情報端末装置200では、図18に示すように、公開用立体構造座標サンプルが添付された電子メールが構造情報提供者より届いた。

30

【0191】

添付された公開用立体構造座標サンプルは以下のとおりである。

```

HEADER                               sample model
REMARK                               ID 000027
REMARK
SEQRES  1    57  VAL ASP VAL ASN GLU CYS LEU SER ASN PRO CYS PRO SER
SEQRES  2    57  THR ALA THR CYS ASN ASN THR GLN GLY SER PHE ILE CYS
SEQRES  3    57  LYS CYS PRO VAL GLY TYR GLN LEU GLU LYS GLY ILE CYS
SEQRES  4    57  ASN LEU VAL ARG THR PHE VAL THR GLU PHE LYS LEU LYS
SEQRES  5    57  ARG THR PHE LEU ASN
ATOM    1  CA  VAL      1    -16.570  24.769  -0.261
ATOM    2  CA  ASP      2    -13.500  22.584   0.140
ATOM    3  CA  VAL      3    -14.387  18.845  -0.720
ATOM    4  CA  ASN      4    -11.766  18.565  -3.395
ATOM    5  CA  GLU      5     -9.135  16.076  -2.299
ATOM    6  CA  CYS      6    -10.274  12.777  -3.507
ATOM    7  CA  LEU      7    -13.786  13.408  -4.892
ATOM    8  CA  SER      8    -12.779  14.838  -8.266
ATOM    9  CA  ASN      9    -12.901  12.085 -10.835

```

40

50

ATOM	10	CA	PRO	10	-9.142	11.386	-11.335	
ATOM	11	CA	CYS	11	-8.177	12.377	-7.778	
ATOM	12	CA	PRO	12	-7.594	9.143	-5.725	
ATOM	13	CA	SER	13	-10.468	6.873	-6.728	
ATOM	14	CA	THR	14	-11.926	6.122	-3.288	
ATOM	15	CA	ALA	15	-8.945	5.182	-0.933	
ATOM	16	CA	THR	16	-7.139	8.417	0.229	
ATOM	17	CA	CYS	17	-9.584	10.617	2.023	
ATOM	18	CA	ASN	18	-7.721	13.204	4.008	
ATOM	19	CA	ASN	19	-9.128	16.640	3.127	10
ATOM	20	CA	THR	20	-6.433	18.579	4.790	
ATOM	21	CA	GLN	21	-7.132	21.452	2.585	
ATOM	22	CA	GLY	22	-3.977	22.040	0.834	
ATOM	23	CA	SER	23	-3.328	19.130	-1.699	
ATOM	24	CA	PHE	24	-5.505	16.100	-0.564	
ATOM	25	CA	ILE	25	-3.070	13.612	0.962	
ATOM	26	CA	CYS	26	-4.453	10.192	-0.079	
ATOM	27	CA	LYS	27	-3.880	7.576	2.853	
ATOM	28	CA	CYS	28	-5.875	4.581	1.269	
ATOM	29	CA	PRO	29	-5.858	1.689	3.707	20
ATOM	30	CA	VAL	30	-7.413	-1.325	1.820	
ATOM	31	CA	GLY	31	-4.571	-2.714	-0.416	
ATOM	32	CA	TYR	32	-3.358	0.603	-1.135	
ATOM	33	CA	GLN	33	-2.983	0.986	-4.723	
ATOM	34	CA	LEU	34	-2.379	4.728	-4.965	
ATOM	35	CA	GLU	35	-1.368	5.230	-8.398	
ATOM	36	CA	LYS	36	-3.420	8.494	-8.764	
ATOM	37	CA	GLY	37	-6.730	6.566	-8.139	
ATOM	38	CA	ILE	38	-5.901	3.698	-5.584	
ATOM	39	CA	CYS	39	-6.759	0.684	-7.718	30
ATOM	40	CA	ASN	40	-6.298	-2.534	-5.603	
ATOM	41	CA	LEU	41	-4.456	-4.895	-7.914	
ATOM	42	CA	VAL	42	-2.147	-6.994	-5.901	
ATOM	43	CA	ARG	43	-2.256	-10.398	-7.161	
ATOM	44	CA	THR	44	0.176	-12.399	-5.178	
ATOM	45	CA	PHE	45	3.632	-11.348	-6.075	
ATOM	46	CA	VAL	46	4.862	-12.602	-2.863	
ATOM	47	CA	THR	47	3.323	-16.119	-3.300	
ATOM	48	CA	GLU	48	-0.015	-15.929	-1.578	
ATOM	49	CA	PHE	49	-1.824	-19.116	-2.009	40
ATOM	50	CA	LYS	50	-2.874	-20.341	1.358	
ATOM	51	CA	LEU	51	0.349	-22.316	1.663	
ATOM	52	CA	LYS	52	-0.727	-25.191	-0.472	
ATOM	53	CA	ARG	53	-0.169	-23.868	-4.079	
ATOM	54	CA	THR	54	-3.482	-22.435	-5.366	
ATOM	55	CA	PHE	55	-3.084	-18.645	-5.680	
ATOM	56	CA	LEU	56	-6.231	-17.348	-7.457	
ATOM	57	CA	ASN	57	-6.201	-13.581	-7.228	
END								

そして、情報端末装置 200 は、公開用構造データを表示する（ステップ S B - 4）。図 19 は、「K I A A 1 2 3 7」の 297 - 353 番目の残基部分の公開用立体構造座標サンプルの表示例を示す図である。

【0193】

構造情報利用者は、「K I A A 1 2 3 7」の 297 - 353 番目の残基部分の公開用立体構造サンプルをグラフィックスで考察すると、E G F とその大きさ、形がよく似ているので、購入することにした。そして、図 20 の電子メールにて、目的タンパク質の立体構造座標を発注する（ステップ S B - 5）。

【0194】

構造情報処理装置 100 は、契約情報管理部 102 i の処理により、発注情報に基づいて、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納し、構造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にする（ステップ S B - 6）。

10

【0195】

そして、構造情報利用者は、図 21 に示すように、電子メールにより、発注した目的タンパク質の立体構造座標とアライメント結果の提供を受けた（ステップ S B - 7）。

【0196】

添付された立体構造座標は以下のとおりである。

20

```

HEADER                                     huge_KIAA1237_1_4_1.
SEQRES   1      57  VAL ASP VAL ASN GLU CYS LEU SER ASN PRO CYS PRO SER
SEQRES   2      57  THR ALA THR CYS ASN ASN THR GLN GLY SER PHE ILE CYS
SEQRES   3      57  LYS CYS PRO VAL GLY TYR GLN LEU GLU LYS GLY ILE CYS
SEQRES   4      57  ASN LEU VAL ARG THR PHE VAL THR GLU PHE LYS LEU LYS
SEQRES   5      57  ARG THR PHE LEU ASN
SSBOND   1 CYS      6      CYS      17
ATOM     1  N  VAL      1      -17.298  25.004   1.020
ATOM     2  CA VAL      1      -16.920  25.074  -0.401
ATOM     3  C  VAL      1      -15.420  24.755  -0.711
ATOM     4  O  VAL      1      -15.181  24.405  -1.881
ATOM     5  CB VAL      1      -17.243  26.512  -0.870
ATOM     6  CG1 VAL     1      -16.130  27.002  -1.851
ATOM     7  CG2 VAL     1      -18.570  26.535  -1.621
ATOM     8  N  ASP      2      -14.550  24.428   0.261
ATOM     9  CA ASP      2      -13.170  24.021   0.041
ATOM    10  C  ASP      2      -13.223  22.902  -1.010
ATOM    11  O  ASP      2      -13.770  21.841  -0.711
ATOM    12  CB ASP      2      -12.610  23.579   1.401
ATOM    13  CG ASP      2      -11.139  23.308   1.420
ATOM    14  OD1 ASP     2      -10.400  22.951   0.501
ATOM    15  OD2 ASP     2      -10.560  23.440   2.521
ATOM    16  N  VAL      3      -12.450  23.100  -2.101
ATOM    17  CA VAL      3      -12.430  22.121  -3.201
ATOM    18  C  VAL      3      -11.880  20.810  -2.591
ATOM    19  O  VAL      3      -10.803  20.822  -1.970
ATOM    20  CB VAL      3      -11.661  22.656  -4.411
ATOM    21  CG1 VAL     3      -11.540  21.654  -5.531
ATOM    22  CG2 VAL     3      -12.170  24.001  -4.841
ATOM    23  N  ASN      4      -12.703  19.782  -2.620

```

30

40

50

ATOM	24	CA	ASN	4	-12.329	18.519	-1.970	
ATOM	25	C	ASN	4	-10.941	18.011	-2.521	
ATOM	26	O	ASN	4	-10.090	17.680	-1.681	
ATOM	27	CB	ASN	4	-13.440	17.451	-2.121	
ATOM	28	CG	ASN	4	-13.273	16.222	-1.210	
ATOM	29	OD1	ASN	4	-13.330	15.065	-1.761	
ATOM	30	ND2	ASN	4	-13.091	16.410	0.071	
ATOM	31	N	GLU	5	-10.723	17.932	-3.840	
ATOM	32	CA	GLU	5	-9.517	17.405	-4.510	
ATOM	33	C	GLU	5	-9.220	15.875	-4.171	10
ATOM	34	O	GLU	5	-8.071	15.476	-4.171	
ATOM	35	CB	GLU	5	-8.389	18.337	-4.200	
ATOM	36	CG	GLU	5	-8.661	19.825	-4.261	
ATOM	37	CD	GLU	5	-7.529	20.467	-5.020	
ATOM	38	OE1	GLU	5	-6.361	20.426	-4.611	
ATOM	39	OE2	GLU	5	-7.911	20.941	-6.101	
ATOM	40	N	CYS	6	-10.153	15.172	-3.470	
ATOM	41	CA	CYS	6	-10.108	13.715	-3.160	
ATOM	42	C	CYS	6	-11.461	13.080	-3.681	
ATOM	43	O	CYS	6	-11.450	11.885	-4.031	20
ATOM	44	CB	CYS	6	-10.031	13.618	-1.621	
ATOM	45	SG	CYS	6	-11.270	12.391	-0.951	
ATOM	46	N	LEU	7	-12.421	13.894	-4.211	
ATOM	47	CA	LEU	7	-13.661	13.485	-4.821	
ATOM	48	C	LEU	7	-13.620	13.685	-6.361	
ATOM	49	O	LEU	7	-14.391	12.966	-7.031	
ATOM	50	CB	LEU	7	-14.852	14.271	-4.221	
ATOM	51	CG	LEU	7	-15.813	13.352	-3.440	
ATOM	52	CD1	LEU	7	-15.021	12.351	-2.611	
ATOM	53	CD2	LEU	7	-16.691	14.200	-2.531	30
ATOM	54	N	SER	8	-12.773	14.572	-6.950	
ATOM	55	CA	SER	8	-12.787	14.740	-8.370	
ATOM	56	C	SER	8	-12.400	13.421	-9.051	
ATOM	57	O	SER	8	-11.809	12.518	-8.450	
ATOM	58	CB	SER	8	-11.991	15.974	-8.811	
ATOM	59	OG	SER	8	-10.611	15.997	-8.621	
ATOM	60	N	ASN	9	-13.029	13.337	-10.200	
ATOM	61	CA	ASN	9	-12.861	12.144	-10.971	
ATOM	62	C	ASN	9	-11.382	11.741	-11.071	
ATOM	63	O	ASN	9	-11.073	10.622	-10.660	40
ATOM	64	CB	ASN	9	-13.525	12.370	-12.360	
ATOM	65	CG	ASN	9	-13.235	11.584	-13.640	
ATOM	66	OD1	ASN	9	-12.954	12.154	-14.690	
ATOM	67	ND2	ASN	9	-13.283	10.242	-13.660	
ATOM	68	N	PRO	10	-10.415	12.530	-11.610	
ATOM	69	CA	PRO	10	-9.104	12.028	-11.710	
ATOM	70	C	PRO	10	-8.324	11.948	-10.340	
ATOM	71	O	PRO	10	-7.225	11.361	-10.350	
ATOM	72	CB	PRO	10	-8.274	12.966	-12.630	
ATOM	73	CG	PRO	10	-8.993	14.292	-12.450	50

ATOM	74	CD	PRO	10	-10.436	13.985	-12.050	
ATOM	75	N	CYS	11	-8.881	12.360	-9.201	
ATOM	76	CA	CYS	11	-8.173	12.402	-7.940	
ATOM	77	C	CYS	11	-8.171	11.021	-7.311	
ATOM	78	O	CYS	11	-7.831	10.104	-8.051	
ATOM	79	CB	CYS	11	-8.710	13.495	-7.101	
ATOM	80	SG	CYS	11	-7.880	15.053	-7.081	
ATOM	81	N	PRO	12	-8.230	10.745	-5.951	
ATOM	82	CA	PRO	12	-8.191	9.380	-5.461	
ATOM	83	C	PRO	12	-9.189	8.487	-6.170	10
ATOM	84	O	PRO	12	-8.730	7.488	-6.611	
ATOM	85	CB	PRO	12	-8.623	9.462	-4.000	
ATOM	86	CG	PRO	12	-7.900	10.802	-3.611	
ATOM	87	CD	PRO	12	-8.280	11.675	-4.781	
ATOM	88	N	SER	13	-10.480	8.738	-6.221	
ATOM	89	CA	SER	13	-11.370	7.721	-6.861	
ATOM	90	C	SER	13	-11.263	6.292	-6.230	
ATOM	91	O	SER	13	-10.510	5.405	-6.661	
ATOM	92	CB	SER	13	-11.241	7.635	-8.351	
ATOM	93	OG	SER	13	-11.343	6.312	-8.980	20
ATOM	94	N	THR	14	-12.093	6.024	-5.230	
ATOM	95	CA	THR	14	-12.184	4.747	-4.460	
ATOM	96	C	THR	14	-11.070	4.550	-3.421	
ATOM	97	O	THR	14	-10.671	3.413	-3.031	
ATOM	98	CB	THR	14	-12.424	3.518	-5.420	
ATOM	99	OG1	THR	14	-13.535	3.801	-6.360	
ATOM	100	CG2	THR	14	-12.631	2.265	-4.501	
ATOM	101	N	ALA	15	-10.705	5.660	-2.720	
ATOM	102	CA	ALA	15	-9.684	5.707	-1.630	
ATOM	103	C	ALA	15	-10.241	6.585	-0.481	30
ATOM	104	O	ALA	15	-11.061	7.492	-0.711	
ATOM	105	CB	ALA	15	-8.515	6.482	-2.220	
ATOM	106	N	THR	16	-9.674	6.449	0.700	
ATOM	107	CA	THR	16	-10.034	7.367	1.810	
ATOM	108	C	THR	16	-9.017	8.577	1.810	
ATOM	109	O	THR	16	-7.827	8.329	2.120	
ATOM	110	CB	THR	16	-9.966	6.678	3.200	
ATOM	111	OG1	THR	16	-8.606	6.349	3.620	
ATOM	112	CG2	THR	16	-10.847	5.406	3.300	
ATOM	113	N	CYS	17	-9.464	9.777	1.730	40
ATOM	114	CA	CYS	17	-8.640	10.944	1.571	
ATOM	115	C	CYS	17	-9.151	12.247	2.191	
ATOM	116	O	CYS	17	-10.370	12.523	2.211	
ATOM	117	CB	CYS	17	-8.230	10.931	0.131	
ATOM	118	SG	CYS	17	-9.674	11.107	-1.000	
ATOM	119	N	ASN	18	-8.238	12.800	2.990	
ATOM	120	CA	ASN	18	-8.438	14.013	3.820	
ATOM	121	C	ASN	18	-8.397	15.293	3.010	
ATOM	122	O	ASN	18	-7.436	15.576	2.260	
ATOM	123	CB	ASN	18	-7.330	13.978	4.891	50

ATOM	124	CG	ASN	18	-7.659	14.987	6.010	
ATOM	125	OD1	ASN	18	-8.311	16.015	5.891	
ATOM	126	ND2	ASN	18	-7.211	14.646	7.211	
ATOM	127	N	ASN	19	-9.324	16.167	3.370	
ATOM	128	CA	ASN	19	-9.417	17.495	2.790	
ATOM	129	C	ASN	19	-8.667	18.463	3.680	
ATOM	130	O	ASN	19	-9.106	18.845	4.790	
ATOM	131	CB	ASN	19	-10.866	17.965	2.580	
ATOM	132	CG	ASN	19	-11.074	19.129	1.610	
ATOM	133	OD1	ASN	19	-11.985	19.960	1.760	10
ATOM	134	ND2	ASN	19	-10.245	19.151	0.570	
ATOM	135	N	THR	20	-7.455	18.755	3.210	
ATOM	136	CA	THR	20	-6.629	19.745	3.860	
ATOM	137	C	THR	20	-6.965	21.175	3.270	
ATOM	138	O	THR	20	-7.534	21.267	2.160	
ATOM	139	CB	THR	20	-5.147	19.205	3.830	
ATOM	140	OG1	THR	20	-4.637	18.953	2.520	
ATOM	141	CG2	THR	20	-5.066	17.885	4.680	
ATOM	142	N	GLN	21	-6.526	22.225	3.910	
ATOM	143	CA	GLN	21	-6.904	23.589	3.460	20
ATOM	144	C	GLN	21	-6.795	23.820	1.890	
ATOM	145	O	GLN	21	-7.845	24.111	1.310	
ATOM	146	CB	GLN	21	-6.045	24.565	4.260	
ATOM	147	CG	GLN	21	-6.814	25.556	5.140	
ATOM	148	CD	GLN	21	-6.191	25.622	6.521	
ATOM	149	OE1	GLN	21	-6.520	24.800	7.391	
ATOM	150	NE2	GLN	21	-5.279	26.568	6.700	
ATOM	151	N	GLY	22	-5.623	23.764	1.260	
ATOM	152	CA	GLY	22	-5.473	23.922	-0.210	
ATOM	153	C	GLY	22	-4.959	22.647	-0.970	30
ATOM	154	O	GLY	22	-4.531	22.810	-2.131	
ATOM	155	N	SER	23	-4.880	21.460	-0.371	
ATOM	156	CA	SER	23	-4.343	20.262	-0.900	
ATOM	157	C	SER	23	-5.159	19.077	-0.280	
ATOM	158	O	SER	23	-6.333	19.212	0.100	
ATOM	159	CB	SER	23	-2.820	20.279	-0.601	
ATOM	160	OG	SER	23	-2.009	19.987	-1.750	
ATOM	161	N	PHE	24	-4.750	17.877	-0.631	
ATOM	162	CA	PHE	24	-5.370	16.611	-0.291	
ATOM	163	C	PHE	24	-4.311	15.474	-0.241	40
ATOM	164	O	PHE	24	-3.273	15.522	-0.930	
ATOM	165	CB	PHE	24	-6.280	16.285	-1.431	
ATOM	166	CG	PHE	24	-5.961	16.175	-2.821	
ATOM	167	CD1	PHE	24	-5.863	17.302	-3.610	
ATOM	168	CD2	PHE	24	-5.633	14.904	-3.340	
ATOM	169	CE1	PHE	24	-5.440	17.212	-4.931	
ATOM	170	CE2	PHE	24	-5.209	14.817	-4.680	
ATOM	171	CZ	PHE	24	-5.100	15.969	-5.451	
ATOM	172	N	ILE	25	-4.651	14.365	0.361	
ATOM	173	CA	ILE	25	-3.859	13.158	0.440	50

ATOM	174	C	ILE	25	-4.829	11.987	0.070	
ATOM	175	O	ILE	25	-5.651	11.595	0.891	
ATOM	176	CB	ILE	25	-3.150	13.021	1.821	
ATOM	177	CG1	ILE	25	-2.453	11.694	1.950	
ATOM	178	CG2	ILE	25	-4.234	13.046	2.930	
ATOM	179	CD1	ILE	25	-1.220	11.609	1.051	
ATOM	180	N	CYS	26	-4.328	11.172	-0.857	
ATOM	181	CA	CYS	26	-5.013	10.036	-1.494	
ATOM	182	C	CYS	26	-4.545	8.830	-0.605	
ATOM	183	O	CYS	26	-3.410	8.327	-0.819	10
ATOM	184	CB	CYS	26	-4.200	9.932	-2.808	
ATOM	185	SG	CYS	26	-5.184	10.902	-4.048	
ATOM	186	N	LYS	27	-5.301	8.360	0.380	
ATOM	187	CA	LYS	27	-4.794	7.317	1.260	
ATOM	188	C	LYS	27	-5.629	6.033	1.033	
ATOM	189	O	LYS	27	-6.743	5.908	1.541	
ATOM	190	CB	LYS	27	-4.871	7.797	2.701	
ATOM	191	CG	LYS	27	-3.553	8.206	3.273	
ATOM	192	CD	LYS	27	-3.287	7.440	4.584	
ATOM	193	CE	LYS	27	-1.816	7.435	5.035	20
ATOM	194	NZ	LYS	27	-1.609	6.296	5.953	
ATOM	195	N	CYS	28	-5.041	5.074	0.351	
ATOM	196	CA	CYS	28	-5.608	3.761	0.073	
ATOM	197	C	CYS	28	-5.635	2.961	1.440	
ATOM	198	O	CYS	28	-4.505	2.699	1.948	
ATOM	199	CB	CYS	28	-4.582	3.045	-0.822	
ATOM	200	SG	CYS	28	-5.467	2.635	-2.401	
ATOM	201	N	PRO	29	-6.747	2.557	2.113	
ATOM	202	CA	PRO	29	-6.568	1.733	3.259	
ATOM	203	C	PRO	29	-5.904	0.411	2.807	30
ATOM	204	O	PRO	29	-5.591	0.234	1.622	
ATOM	205	CB	PRO	29	-7.918	1.539	3.999	
ATOM	206	CG	PRO	29	-8.903	2.308	3.186	
ATOM	207	CD	PRO	29	-8.198	3.022	2.036	
ATOM	208	N	VAL	30	-5.447	-0.368	3.832	
ATOM	209	CA	VAL	30	-4.829	-1.675	3.620	
ATOM	210	C	VAL	30	-5.547	-2.570	2.597	
ATOM	211	O	VAL	30	-6.647	-3.089	2.848	
ATOM	212	CB	VAL	30	-4.708	-2.341	5.004	
ATOM	213	CG1	VAL	30	-3.979	-3.697	4.875	40
ATOM	214	CG2	VAL	30	-4.036	-1.482	6.047	
ATOM	215	N	GLY	31	-4.719	-3.049	1.668	
ATOM	216	CA	GLY	31	-5.086	-3.923	0.521	
ATOM	217	C	GLY	31	-5.416	-3.156	-0.801	
ATOM	218	O	GLY	31	-5.681	-3.850	-1.782	
ATOM	219	N	TYR	32	-5.261	-1.851	-0.856	
ATOM	220	CA	TYR	32	-5.448	-1.024	-1.986	
ATOM	221	C	TYR	32	-4.132	-0.241	-2.236	
ATOM	222	O	TYR	32	-3.360	0.072	-1.309	
ATOM	223	CB	TYR	32	-6.678	-0.158	-1.640	50

ATOM	224	CG	TYR	32	-8.010	-0.803	-1.883	
ATOM	225	CD1	TYR	32	-8.459	-1.925	-1.181	
ATOM	226	CD2	TYR	32	-8.826	-0.261	-2.895	
ATOM	227	CE1	TYR	32	-9.708	-2.469	-1.453	
ATOM	228	CE2	TYR	32	-10.087	-0.803	-3.169	
ATOM	229	CZ	TYR	32	-10.495	-1.935	-2.477	
ATOM	230	OH	TYR	32	-11.766	-2.360	-2.768	
ATOM	231	N	GLN	33	-3.907	0.179	-3.501	
ATOM	232	CA	GLN	33	-2.778	1.003	-3.869	
ATOM	233	C	GLN	33	-3.195	2.237	-4.711	10
ATOM	234	O	GLN	33	-4.155	2.183	-5.480	
ATOM	235	CB	GLN	33	-1.685	0.175	-4.616	
ATOM	236	CG	GLN	33	-1.071	-0.914	-3.781	
ATOM	237	CD	GLN	33	-0.247	-0.522	-2.532	
ATOM	238	OE1	GLN	33	0.288	-1.401	-1.789	
ATOM	239	NE2	GLN	33	-0.008	0.756	-2.265	
ATOM	240	N	LEU	34	-2.226	3.109	-4.915	
ATOM	241	CA	LEU	34	-2.349	4.398	-5.552	
ATOM	242	C	LEU	34	-1.544	4.655	-6.802	
ATOM	243	O	LEU	34	-0.346	4.335	-6.914	20
ATOM	244	CB	LEU	34	-1.842	5.411	-4.499	
ATOM	245	CG	LEU	34	-2.212	6.866	-4.943	
ATOM	246	CD1	LEU	34	-3.726	7.066	-4.855	
ATOM	247	CD2	LEU	34	-1.510	7.884	-4.043	
ATOM	248	N	GLU	35	-2.294	5.020	-7.787	
ATOM	249	CA	GLU	35	-1.849	5.542	-9.088	
ATOM	250	C	GLU	35	-2.673	6.873	-9.342	
ATOM	251	O	GLU	35	-2.684	7.303	-10.507	
ATOM	252	CB	GLU	35	-2.027	4.451	-10.165	
ATOM	253	CG	GLU	35	-3.455	4.215	-10.667	30
ATOM	254	CD	GLU	35	-3.848	3.668	-12.013	
ATOM	255	OE1	GLU	35	-3.856	2.388	-11.952	
ATOM	256	OE2	GLU	35	-4.285	4.312	-12.998	
ATOM	257	N	LYS	36	-2.932	7.682	-8.303	
ATOM	258	CA	LYS	36	-3.836	8.849	-8.293	
ATOM	259	C	LYS	36	-5.267	8.253	-8.103	
ATOM	260	O	LYS	36	-5.811	8.511	-7.020	
ATOM	261	CB	LYS	36	-3.696	9.766	-9.510	
ATOM	262	CG	LYS	36	-3.247	11.166	-9.227	
ATOM	263	CD	LYS	36	-3.722	12.261	-10.196	40
ATOM	264	CE	LYS	36	-2.611	13.051	-10.895	
ATOM	265	NZ	LYS	36	-2.145	12.460	-12.164	
ATOM	266	N	GLY	37	-5.800	7.394	-9.021	
ATOM	267	CA	GLY	37	-7.046	6.750	-8.686	
ATOM	268	C	GLY	37	-6.600	5.663	-7.658	
ATOM	269	O	GLY	37	-5.681	4.888	-8.015	
ATOM	270	N	ILE	38	-7.479	5.215	-6.852	
ATOM	271	CA	ILE	38	-7.059	4.281	-5.819	
ATOM	272	C	ILE	38	-7.908	2.967	-5.995	
ATOM	273	O	ILE	38	-9.109	3.061	-5.818	50

ATOM	274	CB	ILE	38	-7.204	5.005	-4.425	
ATOM	275	CG1	ILE	38	-5.748	5.318	-3.893	
ATOM	276	CG2	ILE	38	-7.851	4.082	-3.361	
ATOM	277	CD1	ILE	38	-5.608	5.994	-2.531	
ATOM	278	N	CYS	39	-7.267	1.775	-6.120	
ATOM	279	CA	CYS	39	-7.873	0.531	-6.446	
ATOM	280	C	CYS	39	-6.950	-0.701	-5.999	
ATOM	281	O	CYS	39	-5.736	-0.507	-5.892	
ATOM	282	CB	CYS	39	-8.449	0.670	-7.886	
ATOM	283	SG	CYS	39	-9.911	1.851	-8.190	10
ATOM	284	N	ASN	40	-7.529	-1.819	-5.566	
ATOM	285	CA	ASN	40	-6.821	-2.985	-5.012	
ATOM	286	C	ASN	40	-5.546	-3.372	-5.782	
ATOM	287	O	ASN	40	-5.576	-3.533	-7.011	
ATOM	288	CB	ASN	40	-7.774	-4.199	-5.065	
ATOM	289	CG	ASN	40	-7.695	-5.133	-3.849	
ATOM	290	OD1	ASN	40	-6.737	-5.914	-3.743	
ATOM	291	ND2	ASN	40	-8.668	-5.063	-2.944	
ATOM	292	N	LEU	41	-4.495	-3.719	-5.042	
ATOM	293	CA	LEU	41	-3.206	-4.215	-5.527	20
ATOM	294	C	LEU	41	-3.311	-5.740	-5.860	
ATOM	295	O	LEU	41	-4.263	-6.425	-5.446	
ATOM	296	CB	LEU	41	-2.206	-3.913	-4.410	
ATOM	297	CG	LEU	41	-2.216	-4.665	-3.087	
ATOM	298	CD1	LEU	41	-1.694	-6.107	-3.085	
ATOM	299	CD2	LEU	41	-1.468	-3.835	-2.028	
ATOM	300	N	VAL	42	-2.296	-6.310	-6.575	
ATOM	301	CA	VAL	42	-2.343	-7.753	-6.850	
ATOM	302	C	VAL	42	-1.567	-8.420	-5.706	
ATOM	303	O	VAL	42	-0.324	-8.392	-5.623	30
ATOM	304	CB	VAL	42	-1.753	-8.085	-8.237	
ATOM	305	CG1	VAL	42	-1.596	-9.592	-8.496	
ATOM	306	CG2	VAL	42	-2.562	-7.465	-9.355	
ATOM	307	N	ARG	43	-2.379	-8.893	-4.761	
ATOM	308	CA	ARG	43	-1.911	-9.652	-3.583	
ATOM	309	C	ARG	43	-1.169	-10.953	-3.996	
ATOM	310	O	ARG	43	-0.216	-11.335	-3.308	
ATOM	311	CB	ARG	43	-3.128	-9.936	-2.668	
ATOM	312	CG	ARG	43	-3.669	-8.636	-2.110	
ATOM	313	CD	ARG	43	-4.868	-8.926	-1.248	40
ATOM	314	NE	ARG	43	-5.960	-9.288	-2.155	
ATOM	315	CZ	ARG	43	-7.038	-9.982	-1.770	
ATOM	316	NH1	ARG	43	-7.158	-10.398	-0.511	
ATOM	317	NH2	ARG	43	-7.955	-10.224	-2.711	
ATOM	318	N	THR	44	-1.798	-11.714	-4.886	
ATOM	319	CA	THR	44	-1.321	-13.000	-5.368	
ATOM	320	C	THR	44	0.085	-12.802	-6.045	
ATOM	321	O	THR	44	0.925	-13.636	-5.756	
ATOM	322	CB	THR	44	-2.288	-13.361	-6.467	
ATOM	323	OG1	THR	44	-2.244	-12.739	-7.771	50

ATOM	324	CG2	THR	44	-3.699	-13.732	-5.895	
ATOM	325	N	PHE	45	0.469	-11.682	-6.599	
ATOM	326	CA	PHE	45	1.870	-11.484	-7.147	
ATOM	327	C	PHE	45	2.945	-11.871	-6.044	
ATOM	328	O	PHE	45	3.980	-12.421	-6.457	
ATOM	329	CB	PHE	45	2.077	-10.006	-7.514	
ATOM	330	CG	PHE	45	3.430	-9.708	-8.088	
ATOM	331	CD1	PHE	45	3.745	-10.148	-9.384	
ATOM	332	CD2	PHE	45	4.373	-9.015	-7.340	
ATOM	333	CE1	PHE	45	5.001	-9.877	-9.933	10
ATOM	334	CE2	PHE	45	5.629	-8.715	-7.890	
ATOM	335	CZ	PHE	45	5.929	-9.150	-9.188	
ATOM	336	N	VAL	46	2.791	-11.533	-4.731	
ATOM	337	CA	VAL	46	3.745	-11.880	-3.647	
ATOM	338	C	VAL	46	4.038	-13.436	-3.594	
ATOM	339	O	VAL	46	5.099	-13.793	-4.109	
ATOM	340	CB	VAL	46	3.247	-11.351	-2.272	
ATOM	341	CG1	VAL	46	4.341	-11.594	-1.201	
ATOM	342	CG2	VAL	46	2.845	-9.861	-2.372	
ATOM	343	N	THR	47	3.045	-14.309	-3.354	20
ATOM	344	CA	THR	47	3.235	-15.770	-3.246	
ATOM	345	C	THR	47	1.832	-16.386	-3.110	
ATOM	346	O	THR	47	0.843	-15.637	-2.911	
ATOM	347	CB	THR	47	4.185	-15.985	-2.035	
ATOM	348	OG1	THR	47	5.460	-16.561	-2.399	
ATOM	349	CG2	THR	47	3.642	-16.781	-0.908	
ATOM	350	N	GLU	48	1.642	-17.673	-3.226	
ATOM	351	CA	GLU	48	0.361	-18.226	-3.144	
ATOM	352	C	GLU	48	-0.067	-18.369	-1.666	
ATOM	353	O	GLU	48	0.630	-18.984	-0.841	30
ATOM	354	CB	GLU	48	0.309	-19.526	-3.892	
ATOM	355	CG	GLU	48	1.139	-20.653	-3.406	
ATOM	356	CD	GLU	48	2.577	-20.813	-3.934	
ATOM	357	OE1	GLU	48	3.197	-19.956	-4.630	
ATOM	358	OE2	GLU	48	3.069	-21.879	-3.554	
ATOM	359	N	PHE	49	-0.925	-17.382	-1.276	
ATOM	360	CA	PHE	49	-1.498	-17.284	0.089	
ATOM	361	C	PHE	49	-2.223	-18.567	0.582	
ATOM	362	O	PHE	49	-2.302	-18.726	1.802	
ATOM	363	CB	PHE	49	-2.386	-16.036	0.219	40
ATOM	364	CG	PHE	49	-3.381	-15.827	-0.903	
ATOM	365	CD1	PHE	49	-4.510	-16.627	-0.981	
ATOM	366	CD2	PHE	49	-3.219	-14.770	-1.800	
ATOM	367	CE1	PHE	49	-5.462	-16.443	-2.032	
ATOM	368	CE2	PHE	49	-4.151	-14.569	-2.822	
ATOM	369	CZ	PHE	49	-5.301	-15.368	-2.901	
ATOM	370	N	LYS	50	-2.598	-19.546	-0.296	
ATOM	371	CA	LYS	50	-3.183	-20.814	0.094	
ATOM	372	C	LYS	50	-2.103	-21.824	0.632	
ATOM	373	O	LYS	50	-2.520	-22.887	1.113	50

ATOM	374	CB	LYS	50	-3.834	-21.463	-1.103	
ATOM	375	CG	LYS	50	-5.218	-20.993	-1.418	
ATOM	376	CD	LYS	50	-5.194	-19.782	-2.342	
ATOM	377	CE	LYS	50	-6.589	-19.326	-2.756	
ATOM	378	NZ	LYS	50	-7.322	-20.343	-3.522	
ATOM	379	N	LEU	51	-0.836	-21.344	0.834	
ATOM	380	CA	LEU	51	0.325	-22.107	1.266	
ATOM	381	C	LEU	51	0.899	-22.949	0.103	
ATOM	382	O	LEU	51	2.113	-22.851	-0.100	
ATOM	383	CB	LEU	51	0.065	-22.961	2.522	10
ATOM	384	CG	LEU	51	-0.408	-22.210	3.747	
ATOM	385	CD1	LEU	51	-0.553	-23.226	4.867	
ATOM	386	CD2	LEU	51	0.582	-21.103	4.136	
ATOM	387	N	LYS	52	0.138	-23.908	-0.497	
ATOM	388	CA	LYS	52	0.631	-24.729	-1.618	
ATOM	389	C	LYS	52	-0.139	-24.528	-2.973	
ATOM	390	O	LYS	52	0.481	-24.840	-4.007	
ATOM	391	CB	LYS	52	0.428	-26.171	-1.187	
ATOM	392	CG	LYS	52	1.572	-27.135	-1.085	
ATOM	393	CD	LYS	52	0.947	-28.456	-0.610	20
ATOM	394	CE	LYS	52	1.929	-29.600	-0.442	
ATOM	395	NZ	LYS	52	1.248	-30.729	0.278	
ATOM	396	N	ARG	53	-1.312	-23.906	-3.005	
ATOM	397	CA	ARG	53	-2.095	-23.716	-4.186	
ATOM	398	C	ARG	53	-1.929	-22.292	-4.629	
ATOM	399	O	ARG	53	-2.149	-21.357	-3.843	
ATOM	400	CB	ARG	53	-3.548	-24.052	-3.931	
ATOM	401	CG	ARG	53	-3.960	-25.481	-3.932	
ATOM	402	CD	ARG	53	-5.377	-25.527	-3.443	
ATOM	403	NE	ARG	53	-5.486	-25.594	-2.007	30
ATOM	404	CZ	ARG	53	-6.600	-25.808	-1.314	
ATOM	405	NH1	ARG	53	-7.789	-25.980	-1.876	
ATOM	406	NH2	ARG	53	-6.544	-25.855	0.021	
ATOM	407	N	THR	54	-2.043	-22.117	-5.924	
ATOM	408	CA	THR	54	-1.828	-20.835	-6.597	
ATOM	409	C	THR	54	-2.776	-19.739	-6.017	
ATOM	410	O	THR	54	-3.975	-19.960	-5.782	
ATOM	411	CB	THR	54	-2.206	-21.175	-8.091	
ATOM	412	OG1	THR	54	-3.227	-22.184	-8.415	
ATOM	413	CG2	THR	54	-1.062	-21.651	-9.062	40
ATOM	414	N	PHE	55	-2.246	-18.540	-6.012	
ATOM	415	CA	PHE	55	-2.858	-17.308	-5.475	
ATOM	416	C	PHE	55	-3.699	-16.524	-6.568	
ATOM	417	O	PHE	55	-3.294	-16.530	-7.750	
ATOM	418	CB	PHE	55	-1.673	-16.420	-5.105	
ATOM	419	CG	PHE	55	-0.545	-16.256	-6.029	
ATOM	420	CD1	PHE	55	-0.743	-15.479	-7.182	
ATOM	421	CD2	PHE	55	0.661	-16.930	-5.885	
ATOM	422	CE1	PHE	55	0.244	-15.323	-8.136	
ATOM	423	CE2	PHE	55	1.670	-16.776	-6.841	50

ATOM	424	CZ	PHE	55	1.459	-15.977	-7.967
ATOM	425	N	LEU	56	-4.929	-16.050	-6.173
ATOM	426	CA	LEU	56	-5.723	-15.252	-7.151
ATOM	427	C	LEU	56	-6.193	-13.811	-6.710
ATOM	428	O	LEU	56	-6.843	-13.692	-5.678
ATOM	429	CB	LEU	56	-6.954	-16.095	-7.491
ATOM	430	CG	LEU	56	-7.854	-15.574	-8.632
ATOM	431	CD1	LEU	56	-7.421	-16.219	-9.936
ATOM	432	CD2	LEU	56	-9.311	-15.903	-8.347
ATOM	433	N	ASN	57	-6.049	-12.808	-7.603
ATOM	434	CA	ASN	57	-6.392	-11.391	-7.390
ATOM	435	C	ASN	57	-7.832	-11.218	-6.836
ATOM	436	O	ASN	57	-8.860	-11.607	-7.466
ATOM	437	CB	ASN	57	-6.264	-10.671	-8.759
ATOM	438	CG	ASN	57	-6.358	-9.146	-8.511
ATOM	439	OD1	ASN	57	-6.066	-8.666	-7.432
ATOM	440	ND2	ASN	57	-6.748	-8.374	-9.485
ATOM	441	OXT	ASN	57	-7.861	-10.888	-5.665
TER	442		ASN	57			

END

【 0 1 9 7 】

ここで、「K I A A 1 2 3 7」の 2 9 7 - 3 5 3 番目の残基部分の購入した立体構造座標のグラフィック表示例を図 2 2 に示す。

【 0 1 9 8 】

また、添付ファイルには、アミノ酸一次配列アライメント結果を含めてもよい。ここで、本実施例において送信されたアミノ酸一次配列アライメントの一例を図 2 3 に示す。図 2 3 は、「K I A A 1 2 3 7」の 2 9 7 - 3 5 3 番目の残基部分のアミノ酸一次配列アライメント結果の一例を示す図である。

【 0 1 9 9 】

また、構造情報利用者 (Y o s h i a k i W a t a n a b e) は構造情報提供者 (F A M S B A S E) に対して、所定のタイミングで立体構造座標の対価を支払うものとする。

【 0 2 0 0 】

これにて、実施例 2 が終了する。

【 0 2 0 1 】

[実施例 3 : 公開用立体構造座標サンプルを用いた、タンパク質立体構造作成サービス「F A M S E - m a i l s e r v i c e v e r s i o n」によるタンパク質立体構造座標の販売例]

次に、実施例 3 の詳細について図 2 4 ~ 図 3 5 などを参照して説明する。

【 0 2 0 2 】

「F A M S E - m a i l s e r v i c e v e r s i o n」は、本発明者らにより開発された「F A M S」を用いたタンパク質の立体構造を構築を行うウェブサーバである。構造情報利用者は立体構造構築を希望するタンパク質のアミノ酸一次配列を電子メールで本サイトに送信すると、参照タンパク質の選定、アミノ酸配列のアライメント、アライメントに従った立体構造の算出が自動的に行われ、構築されたタンパク質の立体構造座標とアミノ酸アライメントが電子メールで構造情報利用者に返信される。

【 0 2 0 3 】

本実施例では、「F A M S E - m a i l s e r v i c e v e r s i o n」(構造情報処理装置 1 0 0 に該当する。)における、公開用立体構造座標サンプルを用いた、立体構造座標の販売を行う実施例を示す。

【 0 2 0 4 】

10

20

30

40

50

マトリックスメタロプロテアーゼ (MMP) は、種々の疾患と関連が報告されており、多くのファミリーが存在し、立体構造も数多く解析されている。

【0205】

MMPにはいくつかの阻害剤が知られており、MMPに共通する触媒ドメインと阻害剤との複合体の立体構造も解析されている。そのうち、BatimastatはいくつかのMMPに対して阻害活性を示す薬剤であり、複合体の立体構造が解析されており、例えばPDBではMMP-12との複合体が解析されている (PDB ID: 1JK3、Lang, R., Kocourek, A., Braun, M., Tschesche, H., Huber, R., Bode, W., Maskos, K.: Substrate Specificity Determinants of Human Macrophage Elastase (Mmp-12) Based on the 1.1 Å Crystal Structure J. Mol. Biol. 312 pp. 731 (2001))。

10

【0206】

そこで、構造情報利用者 (Yoshiaki Watanabe) は、アミノ酸一次配列が解析されているMMPファミリーを選び出し、そのタンパク質立体構造座標を「FAMS E-mail service version」より入手し、Batimastatとのドッキングシュミレーションを行うこととした。

【0207】

構造情報利用者 (Yoshiaki Watanabe) は、Swiss-Protから、興味あるタンパク質としてMMP-20 (エントリ-名 MM20_HUMAN、アクセス番号: 060882) を選んだ。

20

【0208】

構造情報利用者 (Yoshiaki Watanabe) は、「FAMS E-mail service version」より「MM20_HUMAN」の立体構造座標を購入するにあたり、公開用立体構造座標サンプルを入手し、これが1JK3等でよく共通した阻害剤との結合ドメインに形が似ていた場合は立体構造座標を購入することとした。ここで、図25は、1JK3の立体構造のグラフィック表示例を示す図である。

【0209】

以下に、本実施例において構造情報提供者が構造データを購入するまでの手順を、図24などを参照して詳細に説明する。図24は、本実施形態における本システムの実施例3の一例を示すフローチャートである。

30

【0210】

まず、構造情報処理装置100は、閲覧処理部102bの処理により、図26のようなwebページを公開している (ステップSC-1)。図26は、構造情報提供者により公開された「FAMS E-mail service version」のwebページの表示例を示す図である。

【0211】

そして、情報端末装置200は、当該Webページにアクセスして、構造情報利用者から目的タンパク質「MM20_HUMAN」の公開用サンプル立体構造座標の提供依頼を以下の手順で行う (ステップSC-2)。

40

【0212】

まず、構造情報利用者は、情報端末装置200を用いて、SWISS PROTより「MM20_HUMAN」アミノ酸一次配列を入する。ここで、図27は、「MM20_HUMAN」のアミノ酸配列の表示例を示す図である。

【0213】

そして、構造情報利用者は、情報端末装置200を用いて、webページ上の「1. Request Mail」をクリックし、「MM20_HUMAN」のアミノ酸一次配列を記入した、図28に示す電子メールを構造情報提供者 (FAMS) へ送信する。

【0214】

50

構造情報処理装置 100 は、構造データ取得部 102g の処理により、作成依頼されたタンパク質のアミノ酸一次配列を受信し、FAMS などを用いて構造データを新規作成して取得する（ステップ SC - 3）。

【0215】

そして、構造情報処理装置 100 は、構造変化部 102h の処理により、上述した構造変化処理を実行する（ステップ SC - 4）。

【0216】

そして、構造情報処理装置 100 は、送信部 102f の処理により、対応する公開用構造データを送信する（ステップ SC - 5）。

【0217】

すなわち、電子メール生成部 102d は、送信タイミングに従って、その電子メールの作成内容を含む電子メールデータを生成する。具体的には、利用者の利用者 ID 等に基づいて利用者情報データベース 106a に格納された利用者情報を参照し、この利用者の電子メールアドレスを呼び出す。

【0218】

そして、この電子メールアドレスを宛先とする電子メールであって、利用者の氏名およびメール本文（公開用構造データの添付ファイルを含む）を含む電子メールのメールデータを生成して、このメールデータを送信部 102f に受け渡す。そして、送信部 102f は、このメールデータを送信する。

【0219】

一方、利用者は、情報端末装置 200 の電子メーラ 212 を用いて上記電子メールを任意のタイミングで受信する。この電子メールは電子メーラ 212 の公知の機能に基づいてモニタ 261 に表示される。また、利用者は、必要に応じてこの電子メールの表示内容をプリンタ 262 にて印刷することができる。

【0220】

そして、情報端末装置 200 では、図 29 に示すように、公開用立体構造座標サンプルが添付された電子メールが構造情報提供者より届いた。

【0221】

添付された公開用立体構造座標サンプルは以下のとおりである。

HEADER		sample model
REMARK		ID 000038
REMARK		
SEQRES	1	376 TYR ARG LEU PHE PRO GLY GLU PRO LYS TRP LYS LYS ASN
SEQRES	2	376 THR LEU THR TYR ARG ILE SER LYS TYR THR PRO SER MET
SEQRES	3	376 SER SER VAL GLU VAL ASP LYS ALA VAL GLU MET ALA LEU
SEQRES	4	376 GLN ALA TRP SER SER ALA VAL PRO LEU SER PHE VAL ARG
SEQRES	5	376 ILE ASN SER GLY GLU ALA ASP ILE MET ILE SER PHE GLU
SEQRES	6	376 ASN GLY ASP HIS GLY ASP SER TYR PRO PHE ASP GLY PRO
SEQRES	7	376 ARG GLY THR LEU ALA HIS ALA PHE ALA PRO GLY GLU GLY
SEQRES	8	376 LEU GLY GLY ASP THR HIS PHE ASP ASN PRO GLU LYS TRP
SEQRES	9	376 THR MET GLY THR ASN GLY PHE ASN LEU PHE THR VAL ALA
SEQRES	10	376 ALA HIS GLU PHE GLY HIS ALA LEU GLY LEU ALA HIS SER
SEQRES	11	376 THR ASP PRO SER ALA LEU MET TYR PRO THR TYR LYS TYR
SEQRES	12	376 LYS ASN PRO TYR GLY PHE HIS LEU PRO LYS ASP ASP VAL
SEQRES	13	376 LYS GLY ILE GLN ALA LEU TYR GLY PRO ARG LYS VAL PHE
SEQRES	14	376 LEU GLY LYS PRO THR LEU PRO HIS ALA PRO HIS HIS LYS
SEQRES	15	376 PRO SER ILE PRO ASP LEU CYS ASP SER SER SER SER PHE
SEQRES	16	376 ASP ALA VAL THR MET LEU GLY LYS GLU LEU LEU LEU PHE
SEQRES	17	376 LYS ASP ARG ILE PHE TRP ARG ARG GLN VAL HIS LEU ARG
SEQRES	18	376 THR GLY ILE ARG PRO SER THR ILE THR SER SER PHE PRO

10

20

30

40

50

SEQRES	19	376	GLN LEU MET SER ASN VAL ASP ALA ALA TYR GLU VAL ALA					
SEQRES	20	376	GLU ARG GLY THR ALA TYR PHE PHE LYS GLY PRO HIS TYR					
SEQRES	21	376	TRP ILE THR ARG GLY PHE GLN MET GLN GLY PRO PRO ARG					
SEQRES	22	376	THR ILE TYR ASP PHE GLY PHE PRO ARG HIS VAL GLN GLN					
SEQRES	23	376	ILE ASP ALA ALA VAL TYR LEU ARG GLU PRO GLN LYS THR					
SEQRES	24	376	LEU PHE PHE VAL GLY ASP GLU TYR TYR SER TYR ASP GLU					
SEQRES	25	376	ARG LYS ARG LYS MET GLU LYS ASP TYR PRO LYS ASN THR					
SEQRES	26	376	GLU GLU GLU PHE SER GLY VAL ASN GLY GLN ILE ASP ALA					
SEQRES	27	376	ALA VAL GLU LEU ASN GLY TYR ILE TYR PHE PHE SER GLY					
SEQRES	28	376	PRO LYS THR TYR LYS TYR ASP THR GLU LYS GLU ASP VAL	10				
SEQRES	29	376	VAL SER VAL VAL LYS SER SER SER TRP ILE GLY CYS					
ATOM	1	CA	TYR	1	67.216	96.331	-13.233	
ATOM	2	CA	ARG	2	66.984	95.599	-16.895	
ATOM	3	CA	LEU	3	64.136	92.897	-17.375	
ATOM	4	CA	PHE	4	65.844	91.094	-20.152	
ATOM	5	CA	PRO	5	63.330	89.176	-22.161	
ATOM	6	CA	GLY	6	61.146	91.580	-24.001	
ATOM	7	CA	GLU	7	58.498	92.038	-21.242	
ATOM	8	CA	PRO	8	59.228	89.234	-18.802	
ATOM	9	CA	LYS	9	55.869	87.677	-17.587	20
ATOM	10	CA	TRP	10	54.228	89.984	-15.119	
ATOM	11	CA	LYS	11	51.198	90.599	-17.368	
ATOM	12	CA	LYS	12	48.183	88.981	-15.552	
ATOM	13	CA	ASN	13	49.049	88.408	-11.961	
ATOM	14	CA	THR	14	47.349	84.824	-11.454	
ATOM	15	CA	LEU	15	50.131	83.136	-9.791	
ATOM	16	CA	THR	16	50.024	79.627	-8.380	
ATOM	17	CA	TYR	17	53.204	77.617	-7.620	
ATOM	18	CA	ARG	18	53.864	74.097	-6.310	
ATOM	19	CA	ILE	19	56.958	72.370	-4.930	30
ATOM	20	CA	SER	20	57.344	69.169	-7.060	
ATOM	21	CA	LYS	21	59.555	67.305	-4.414	
ATOM	22	CA	TYR	22	61.400	69.875	-2.281	
ATOM	23	CA	THR	23	60.957	68.946	1.470	
ATOM	24	CA	PRO	24	63.899	66.866	2.508	
ATOM	25	CA	SER	25	66.613	69.070	3.707	
ATOM	26	CA	MET	26	64.743	71.282	6.158	
ATOM	27	CA	SER	27	62.052	68.772	6.976	
ATOM	28	CA	SER	28	58.925	69.539	4.932	
ATOM	29	CA	VAL	29	57.571	72.526	6.959	40
ATOM	30	CA	GLU	30	61.165	74.120	6.921	
ATOM	31	CA	VAL	31	61.331	73.853	3.038	
ATOM	32	CA	ASP	32	57.677	75.150	2.870	
ATOM	33	CA	LYS	33	58.368	78.366	4.964	
ATOM	34	CA	ALA	34	61.734	78.837	2.967	
ATOM	35	CA	VAL	35	59.604	79.211	-0.215	
ATOM	36	CA	GLU	36	56.419	81.002	1.283	
ATOM	37	CA	MET	37	58.718	83.633	2.951	
ATOM	38	CA	ALA	38	60.705	84.051	-0.383	
ATOM	39	CA	LEU	39	57.319	84.620	-2.317	50

ATOM	40	CA	GLN	40	56.014	86.970	0.527	
ATOM	41	CA	ALA	41	58.895	89.306	0.023	
ATOM	42	CA	TRP	42	57.866	90.151	-3.493	
ATOM	43	CA	SER	43	54.207	90.679	-2.804	
ATOM	44	CA	SER	44	54.752	93.909	-0.966	
ATOM	45	CA	ALA	45	54.778	96.138	-4.153	
ATOM	46	CA	VAL	46	52.117	94.158	-6.255	
ATOM	47	CA	PRO	47	50.862	91.883	-3.613	
ATOM	48	CA	LEU	48	52.494	88.972	-5.338	
ATOM	49	CA	SER	49	49.451	86.961	-4.973	10
ATOM	50	CA	PHE	50	50.455	83.254	-4.847	
ATOM	51	CA	VAL	51	48.538	80.049	-4.042	
ATOM	52	CA	ARG	52	50.708	76.937	-3.334	
ATOM	53	CA	ILE	53	49.146	73.775	-4.871	
ATOM	54	CA	ASN	54	48.264	74.630	-8.272	
ATOM	55	CA	SER	55	46.483	71.418	-9.282	
ATOM	56	CA	GLY	56	48.780	69.977	-11.838	
ATOM	57	CA	GLU	57	50.410	72.913	-13.753	
ATOM	58	CA	ALA	58	50.545	75.927	-11.357	
ATOM	59	CA	ASP	59	52.804	78.684	-12.921	20
ATOM	60	CA	ILE	60	55.989	78.231	-10.714	
ATOM	61	CA	MET	61	57.162	74.581	-10.358	
ATOM	62	CA	ILE	62	60.095	74.348	-7.963	
ATOM	63	CA	SER	63	62.177	71.172	-7.602	
ATOM	64	CA	PHE	64	65.492	70.229	-6.069	
ATOM	65	CA	GLU	65	67.649	68.605	-8.777	
ATOM	66	CA	ASN	66	70.391	71.023	-9.791	
ATOM	67	CA	GLY	67	72.528	68.582	-11.782	
ATOM	68	CA	ASP	68	69.609	66.265	-12.493	
ATOM	69	CA	HIS	69	70.023	65.967	-16.144	30
ATOM	70	CA	GLY	70	66.634	67.039	-17.640	
ATOM	71	CA	ASP	71	68.167	70.216	-19.429	
ATOM	72	CA	SER	72	71.798	69.885	-19.377	
ATOM	73	CA	TYR	73	72.663	73.113	-17.924	
ATOM	74	CA	PRO	74	75.327	71.806	-15.714	
ATOM	75	CA	PHE	75	74.031	71.903	-12.235	
ATOM	76	CA	ASP	76	77.320	70.518	-10.774	
ATOM	77	CA	GLY	77	76.213	69.980	-7.208	
ATOM	78	CA	PRO	78	78.914	72.043	-5.548	
ATOM	79	CA	ARG	79	77.372	74.061	-2.909	40
ATOM	80	CA	GLY	80	77.794	77.801	-3.703	
ATOM	81	CA	THR	81	74.331	79.202	-4.160	
ATOM	82	CA	LEU	82	73.443	76.495	-6.385	
ATOM	83	CA	ALA	83	70.152	77.400	-8.326	
ATOM	84	CA	HIS	84	68.633	78.904	-11.484	
ATOM	85	CA	ALA	85	65.051	79.920	-12.566	
ATOM	86	CA	PHE	86	63.296	80.707	-15.907	
ATOM	87	CA	ALA	87	60.361	83.346	-15.842	
ATOM	88	CA	PRO	88	57.061	81.479	-16.654	
ATOM	89	CA	GLY	89	55.777	82.833	-19.961	50

ATOM	90	CA	GLU	90	58.044	81.338	-22.472	
ATOM	91	CA	GLY	91	58.479	77.579	-21.554	
ATOM	92	CA	LEU	92	61.206	77.247	-18.738	
ATOM	93	CA	GLY	93	60.519	80.704	-17.498	
ATOM	94	CA	GLY	94	58.989	79.970	-14.017	
ATOM	95	CA	ASP	95	60.345	76.409	-13.205	
ATOM	96	CA	THR	96	62.985	77.262	-10.364	
ATOM	97	CA	HIS	97	65.508	74.384	-9.885	
ATOM	98	CA	PHE	98	67.826	74.090	-6.806	
ATOM	99	CA	ASP	99	71.035	72.050	-6.989	10
ATOM	100	CA	ASN	100	70.627	68.937	-4.808	
ATOM	101	CA	PRO	101	73.896	69.331	-3.025	
ATOM	102	CA	GLU	102	73.306	73.012	-2.636	
ATOM	103	CA	LYS	103	73.490	73.073	1.131	
ATOM	104	CA	TRP	104	69.809	73.021	1.783	
ATOM	105	CA	THR	105	69.837	75.799	4.392	
ATOM	106	CA	MET	106	67.512	74.946	7.164	
ATOM	107	CA	GLY	107	70.212	75.950	9.748	
ATOM	108	CA	THR	108	72.386	78.638	7.903	
ATOM	109	CA	ASN	109	75.749	76.878	7.267	20
ATOM	110	CA	GLY	110	76.174	77.446	3.545	
ATOM	111	CA	PHE	111	72.599	76.323	2.619	
ATOM	112	CA	ASN	112	70.372	79.305	3.381	
ATOM	113	CA	LEU	113	67.245	78.015	1.571	
ATOM	114	CA	PHE	114	65.360	81.218	1.732	
ATOM	115	CA	THR	115	68.096	83.529	0.487	
ATOM	116	CA	VAL	116	68.043	81.917	-2.914	
ATOM	117	CA	ALA	117	64.297	81.282	-3.093	
ATOM	118	CA	ALA	118	63.510	84.910	-3.391	
ATOM	119	CA	HIS	119	66.932	86.072	-4.606	30
ATOM	120	CA	GLU	120	66.640	84.194	-7.936	
ATOM	121	CA	PHE	121	62.878	84.645	-7.879	
ATOM	122	CA	GLY	122	63.209	88.215	-9.198	
ATOM	123	CA	HIS	123	63.977	86.914	-12.642	
ATOM	124	CA	ALA	124	60.670	85.111	-13.117	
ATOM	125	CA	LEU	125	58.614	88.237	-12.662	
ATOM	126	CA	GLY	126	60.688	91.029	-14.150	
ATOM	127	CA	LEU	127	64.312	89.695	-14.294	
ATOM	128	CA	ALA	128	66.665	92.652	-14.212	
ATOM	129	CA	HIS	129	69.932	91.473	-12.583	40
ATOM	130	CA	SER	130	72.522	93.757	-14.069	
ATOM	131	CA	THR	131	73.822	96.096	-11.388	
ATOM	132	CA	ASP	132	74.800	93.563	-8.584	
ATOM	133	CA	PRO	133	77.239	95.509	-6.718	
ATOM	134	CA	SER	134	75.062	95.701	-3.625	
ATOM	135	CA	ALA	135	71.878	94.029	-4.513	
ATOM	136	CA	LEU	136	70.932	95.005	-7.966	
ATOM	137	CA	MET	137	71.384	91.860	-9.834	
ATOM	138	CA	TYR	138	73.132	90.113	-7.059	
ATOM	139	CA	PRO	139	74.959	87.055	-8.425	50

ATOM	140	CA	THR	140	75.413	85.546	-4.909	
ATOM	141	CA	TYR	141	78.587	86.929	-3.402	
ATOM	142	CA	LYS	142	77.621	88.763	0.001	
ATOM	143	CA	TYR	143	75.631	86.291	2.198	
ATOM	144	CA	LYS	144	75.531	88.066	5.563	
ATOM	145	CA	ASN	145	76.326	85.347	8.149	
ATOM	146	CA	PRO	146	72.815	84.126	7.983	
ATOM	147	CA	TYR	147	71.919	86.894	5.727	
ATOM	148	CA	GLY	148	68.383	88.045	6.596	
ATOM	149	CA	PHE	149	66.622	88.576	3.234	10
ATOM	150	CA	HIS	150	65.200	92.118	3.667	
ATOM	151	CA	LEU	151	64.996	93.414	0.027	
ATOM	152	CA	PRO	152	68.350	95.456	-0.034	
ATOM	153	CA	LYS	153	68.336	97.834	-2.936	
ATOM	154	CA	ASP	154	65.140	99.258	-1.830	
ATOM	155	CA	ASP	155	62.961	96.332	-2.813	
ATOM	156	CA	VAL	156	62.690	97.573	-6.201	
ATOM	157	CA	LYS	157	65.447	95.245	-7.311	
ATOM	158	CA	GLY	158	63.595	94.296	-10.430	
ATOM	159	CA	ILE	159	62.394	97.777	-10.777	20
ATOM	160	CA	GLN	160	58.748	97.916	-9.725	
ATOM	161	CA	ALA	161	57.700	98.893	-13.210	
ATOM	162	CA	LEU	162	55.362	95.917	-13.459	
ATOM	163	CA	TYR	163	52.337	98.111	-13.103	
ATOM	164	CA	GLY	164	50.941	97.169	-9.800	
ATOM	165	CA	PRO	165	53.735	96.738	-7.402	
ATOM	166	CA	ARG	166	54.635	100.250	-7.241	
ATOM	167	CA	LYS	167	51.394	102.219	-8.224	
ATOM	168	CA	VAL	168	52.379	105.187	-10.385	
ATOM	169	CA	PHE	169	51.184	108.041	-8.108	30
ATOM	170	CA	LEU	170	51.232	106.928	-4.607	
ATOM	171	CA	GLY	171	47.600	106.251	-4.659	
ATOM	172	CA	LYS	172	47.567	102.739	-6.119	
ATOM	173	CA	PRO	173	47.701	100.844	-2.778	
ATOM	174	CA	THR	174	50.906	98.864	-3.168	
ATOM	175	CA	LEU	175	50.266	95.780	-0.978	
ATOM	176	CA	PRO	176	50.861	96.834	2.575	
ATOM	177	CA	HIS	177	48.856	100.053	2.269	
ATOM	178	CA	ALA	178	51.454	102.573	3.267	
ATOM	179	CA	PRO	179	54.418	101.277	1.410	40
ATOM	180	CA	HIS	180	57.450	101.972	3.674	
ATOM	181	CA	HIS	181	60.390	101.574	1.097	
ATOM	182	CA	LYS	182	63.626	101.072	2.929	
ATOM	183	CA	PRO	183	66.283	101.443	0.211	
ATOM	184	CA	SER	184	69.637	101.934	1.783	
ATOM	185	CA	ILE	185	72.241	101.852	-0.844	
ATOM	186	CA	PRO	186	74.812	104.433	0.307	
ATOM	187	CA	ASP	187	76.410	105.993	-2.821	
ATOM	188	CA	LEU	188	79.472	108.047	-1.686	
ATOM	189	CA	CYS	189	79.453	110.256	-4.792	50

ATOM	190	CA	ASP	190	75.934	111.814	-5.287	
ATOM	191	CA	SER	191	74.427	110.689	-2.097	
ATOM	192	CA	SER	192	74.069	113.615	0.199	
ATOM	193	CA	SER	193	76.690	113.101	2.996	
ATOM	194	CA	SER	194	76.357	109.421	4.382	
ATOM	195	CA	PHE	195	77.338	110.036	8.177	
ATOM	196	CA	ASP	196	76.835	107.410	10.898	
ATOM	197	CA	ALA	197	80.572	106.683	11.910	
ATOM	198	CA	VAL	198	84.013	107.113	10.374	
ATOM	199	CA	THR	199	87.390	105.833	11.675	10
ATOM	200	CA	MET	200	88.823	103.394	9.284	
ATOM	201	CA	LEU	201	91.545	101.346	11.035	
ATOM	202	CA	GLY	202	94.900	103.266	10.661	
ATOM	203	CA	LYS	203	95.455	103.456	6.957	
ATOM	204	CA	GLU	204	91.968	102.452	5.773	
ATOM	205	CA	LEU	205	89.463	105.267	6.631	
ATOM	206	CA	LEU	206	86.457	103.020	7.225	
ATOM	207	CA	LEU	207	83.189	105.117	6.864	
ATOM	208	CA	PHE	208	80.026	103.218	7.993	
ATOM	209	CA	LYS	209	76.452	103.768	6.699	20
ATOM	210	CA	ASP	210	74.148	101.206	8.472	
ATOM	211	CA	ARG	211	74.727	97.827	7.042	
ATOM	212	CA	ILE	212	77.620	98.913	4.577	
ATOM	213	CA	PHE	213	81.242	100.101	4.850	
ATOM	214	CA	TRP	214	82.693	102.563	2.245	
ATOM	215	CA	ARG	215	86.471	101.756	2.439	
ATOM	216	CA	ARG	216	88.204	104.895	0.896	
ATOM	217	CA	GLN	217	90.121	106.618	3.687	
ATOM	218	CA	VAL	218	93.072	104.289	3.394	
ATOM	219	CA	HIS	219	94.763	104.793	0.100	30
ATOM	220	CA	LEU	220	94.053	101.705	-2.090	
ATOM	221	CA	ARG	221	92.056	103.844	-4.666	
ATOM	222	CA	THR	222	89.246	101.839	-6.050	
ATOM	223	CA	GLY	223	86.529	104.353	-5.534	
ATOM	224	CA	ILE	224	85.463	103.453	-1.967	
ATOM	225	CA	ARG	225	84.677	99.748	-1.895	
ATOM	226	CA	PRO	226	81.430	99.422	0.127	
ATOM	227	CA	SER	227	81.598	96.237	2.351	
ATOM	228	CA	THR	228	79.746	97.183	5.700	
ATOM	229	CA	ILE	229	80.486	94.626	8.337	40
ATOM	230	CA	THR	230	78.633	91.459	7.463	
ATOM	231	CA	SER	231	81.373	90.451	5.068	
ATOM	232	CA	SER	232	83.570	93.166	6.400	
ATOM	233	CA	PHE	233	84.327	91.128	9.568	
ATOM	234	CA	PRO	234	82.607	93.008	12.393	
ATOM	235	CA	GLN	235	80.361	90.625	14.311	
ATOM	236	CA	LEU	236	77.289	91.861	12.505	
ATOM	237	CA	MET	237	78.277	95.362	11.972	
ATOM	238	CA	SER	238	74.777	96.667	12.321	
ATOM	239	CA	ASN	239	74.833	100.448	12.424	50

ATOM	240	CA	VAL	240	77.163	101.607	15.348	
ATOM	241	CA	ASP	241	76.808	105.218	15.680	
ATOM	242	CA	ALA	242	80.652	105.779	16.323	
ATOM	243	CA	ALA	243	83.845	103.801	15.531	
ATOM	244	CA	TYR	244	87.385	104.872	16.730	
ATOM	245	CA	GLU	245	90.778	103.024	16.449	
ATOM	246	CA	VAL	246	93.927	103.062	18.757	
ATOM	247	CA	ALA	247	97.146	102.218	16.625	
ATOM	248	CA	GLU	248	99.107	100.757	19.660	
ATOM	249	CA	ARG	249	98.050	97.266	18.710	10
ATOM	250	CA	GLY	250	95.847	98.595	15.707	
ATOM	251	CA	THR	251	92.705	97.946	17.677	
ATOM	252	CA	ALA	252	89.524	99.723	16.623	
ATOM	253	CA	TYR	253	86.256	100.194	18.550	
ATOM	254	CA	PHE	254	82.592	100.163	17.486	
ATOM	255	CA	PHE	255	79.722	101.732	19.358	
ATOM	256	CA	LYS	256	76.547	99.825	18.675	
ATOM	257	CA	GLY	257	74.284	101.742	21.142	
ATOM	258	CA	PRO	258	75.838	100.443	24.354	
ATOM	259	CA	HIS	259	77.369	97.187	22.972	20
ATOM	260	CA	TYR	260	80.807	98.583	22.051	
ATOM	261	CA	TRP	261	82.978	95.870	20.322	
ATOM	262	CA	ILE	262	86.954	96.021	20.444	
ATOM	263	CA	THR	263	88.493	94.598	17.159	
ATOM	264	CA	ARG	264	92.113	94.294	18.377	
ATOM	265	CA	GLY	265	93.819	92.085	15.855	
ATOM	266	CA	PHE	266	90.903	91.088	13.762	
ATOM	267	CA	GLN	267	88.607	88.879	15.903	
ATOM	268	CA	MET	268	87.116	90.954	18.752	
ATOM	269	CA	GLN	269	87.545	88.644	21.804	30
ATOM	270	CA	GLY	270	85.691	90.380	24.756	
ATOM	271	CA	PRO	271	83.232	92.567	22.870	
ATOM	272	CA	PRO	272	83.918	96.160	23.708	
ATOM	273	CA	ARG	273	82.287	95.835	27.100	
ATOM	274	CA	THR	274	79.073	97.982	27.007	
ATOM	275	CA	ILE	275	80.074	101.599	27.660	
ATOM	276	CA	TYR	276	78.606	102.453	31.187	
ATOM	277	CA	ASP	277	81.823	100.539	32.400	
ATOM	278	CA	PHE	278	83.830	103.512	30.800	
ATOM	279	CA	GLY	279	82.121	105.859	33.442	40
ATOM	280	CA	PHE	280	79.027	106.238	31.129	
ATOM	281	CA	PRO	281	76.784	108.550	33.001	
ATOM	282	CA	ARG	282	73.382	107.024	33.250	
ATOM	283	CA	HIS	283	71.084	108.706	30.557	
ATOM	284	CA	VAL	284	73.556	108.998	27.793	
ATOM	285	CA	GLN	285	73.482	105.739	25.814	
ATOM	286	CA	GLN	286	73.878	106.699	22.101	
ATOM	287	CA	ILE	287	77.439	108.035	21.527	
ATOM	288	CA	ASP	288	77.419	110.256	18.373	
ATOM	289	CA	ALA	289	81.264	110.148	17.424	50

ATOM	290	CA	ALA	290	84.664	109.223	18.921	
ATOM	291	CA	VAL	291	88.328	110.148	18.185	
ATOM	292	CA	TYR	292	91.602	108.958	19.800	
ATOM	293	CA	LEU	293	93.870	112.009	19.872	
ATOM	294	CA	ARG	294	97.514	110.914	20.433	
ATOM	295	CA	GLU	295	99.199	114.282	21.772	
ATOM	296	CA	PRO	296	98.031	113.810	25.155	
ATOM	297	CA	GLN	297	96.736	110.376	24.243	
ATOM	298	CA	LYS	298	92.962	111.169	24.989	
ATOM	299	CA	THR	299	89.768	110.152	23.130	10
ATOM	300	CA	LEU	300	86.967	112.740	22.871	
ATOM	301	CA	PHE	301	83.456	111.219	23.143	
ATOM	302	CA	PHE	302	80.672	113.113	21.360	
ATOM	303	CA	VAL	303	77.245	112.719	22.972	
ATOM	304	CA	GLY	304	74.996	115.440	21.451	
ATOM	305	CA	ASP	305	76.429	118.743	22.490	
ATOM	306	CA	GLU	306	78.952	117.367	25.158	
ATOM	307	CA	TYR	307	82.649	116.439	24.455	
ATOM	308	CA	TYR	308	83.945	113.830	26.976	
ATOM	309	CA	SER	309	87.708	113.664	27.587	20
ATOM	310	CA	TYR	310	88.920	110.192	28.374	
ATOM	311	CA	ASP	311	92.319	109.187	29.527	
ATOM	312	CA	GLU	312	93.982	107.421	26.832	
ATOM	313	CA	ARG	313	96.513	106.214	29.121	
ATOM	314	CA	LYS	314	94.057	103.827	31.136	
ATOM	315	CA	ARG	315	90.285	104.701	31.773	
ATOM	316	CA	LYS	316	90.042	107.897	33.821	
ATOM	317	CA	MET	317	87.513	110.217	32.432	
ATOM	318	CA	GLU	318	89.243	113.650	32.882	
ATOM	319	CA	LYS	319	87.737	115.430	35.942	30
ATOM	320	CA	ASP	320	85.768	118.364	34.327	
ATOM	321	CA	TYR	321	83.557	116.636	31.979	
ATOM	322	CA	PRO	322	83.561	118.475	28.665	
ATOM	323	CA	LYS	323	81.018	121.211	28.855	
ATOM	324	CA	ASN	324	78.572	120.422	26.099	
ATOM	325	CA	THR	325	79.931	121.750	22.842	
ATOM	326	CA	GLU	326	82.695	119.531	21.699	
ATOM	327	CA	GLU	327	85.380	121.414	23.263	
ATOM	328	CA	GLU	328	85.768	124.517	21.465	
ATOM	329	CA	PHE	329	86.471	123.816	17.820	40
ATOM	330	CA	SER	330	83.204	123.303	16.271	
ATOM	331	CA	GLY	331	81.916	126.501	15.090	
ATOM	332	CA	VAL	332	78.405	124.995	14.241	
ATOM	333	CA	ASN	333	79.030	121.584	15.663	
ATOM	334	CA	GLY	334	76.225	120.763	18.127	
ATOM	335	CA	GLN	335	75.580	117.185	17.025	
ATOM	336	CA	ILE	336	78.700	116.073	15.086	
ATOM	337	CA	ASP	337	77.770	112.787	13.142	
ATOM	338	CA	ALA	338	81.414	111.342	12.781	
ATOM	339	CA	ALA	339	85.048	112.416	13.531	50

ATOM	340	CA	VAL	340	88.579	111.136	12.683	
ATOM	341	CA	GLU	341	90.923	113.820	11.497	
ATOM	342	CA	LEU	342	93.851	111.458	10.862	
ATOM	343	CA	ASN	343	96.366	113.266	12.932	
ATOM	344	CA	GLY	344	96.305	116.209	10.672	
ATOM	345	CA	TYR	345	93.166	118.442	11.515	
ATOM	346	CA	ILE	346	90.467	116.303	13.147	
ATOM	347	CA	TYR	347	87.697	115.764	10.594	
ATOM	348	CA	PHE	348	84.325	116.588	12.101	
ATOM	349	CA	PHE	349	81.384	115.452	10.083	10
ATOM	350	CA	SER	350	78.265	117.492	11.328	
ATOM	351	CA	GLY	351	75.702	118.335	8.497	
ATOM	352	CA	PRO	352	77.569	118.455	5.281	
ATOM	353	CA	LYS	353	80.204	120.953	5.822	
ATOM	354	CA	THR	354	82.849	118.644	7.154	
ATOM	355	CA	TYR	355	85.303	120.907	8.963	
ATOM	356	CA	LYS	356	89.065	120.507	8.831	
ATOM	357	CA	TYR	357	90.144	121.341	12.358	
ATOM	358	CA	ASP	358	93.932	121.244	13.047	
ATOM	359	CA	THR	359	93.782	121.026	17.037	20
ATOM	360	CA	GLU	360	96.525	123.316	18.579	
ATOM	361	CA	LYS	361	95.823	126.888	17.373	
ATOM	362	CA	GLU	362	93.902	125.653	14.320	
ATOM	363	CA	ASP	363	90.268	126.980	14.593	
ATOM	364	CA	VAL	364	88.476	125.557	11.499	
ATOM	365	CA	VAL	365	90.973	125.694	8.559	
ATOM	366	CA	SER	366	88.622	124.464	5.681	
ATOM	367	CA	VAL	367	84.936	123.561	5.095	
ATOM	368	CA	VAL	368	84.686	120.733	2.516	
ATOM	369	CA	LYS	369	83.261	117.641	4.237	30
ATOM	370	CA	SER	370	80.281	116.461	2.224	
ATOM	371	CA	SER	371	81.908	113.668	0.277	
ATOM	372	CA	SER	372	85.361	115.169	0.007	
ATOM	373	CA	TRP	373	87.227	111.839	0.043	
ATOM	374	CA	ILE	374	85.522	109.971	-2.875	
ATOM	375	CA	GLY	375	87.137	111.638	-6.008	
ATOM	376	CA	CYS	376	83.856	113.431	-6.846	

END

【 0 2 2 2 】

そして、情報端末装置 2 0 0 は、公開用構造データを表示する（ステップ S C - 6）。図 3 0 は、「M M 2 0 _ H U M A N」の公開用立体構造座標サンプルの表示例を示す図である。

40

【 0 2 2 3 】

構造情報利用者は、「M M 2 0 _ H U M A N」の公開用立体構造サンプルをグラフィックで考察すると、M M P に共通した阻害剤との結合ドメインに形が似ている部分を含んでいるので、購入することにした。そして、図 3 1 の電子メールにて、目的タンパク質の立体構造座標を発注する（ステップ S C - 7）。

【 0 2 2 4 】

構造情報処理装置 1 0 0 は、契約情報管理部 1 0 2 i の処理により、発注情報に基づいて、構造情報創作者、構造情報利用者および対価に関する情報を含む契約情報を格納し、構

50

造情報創作者と構造情報利用者との間でタンパク質の構造データに対する契約が成立した場合に構造データの契約情報に契約済みフラグを設定し、契約済みフラグが設定された場合に当該構造情報利用者に対して当該構造データを送信可能にする（ステップS C - 8）

。

【 0 2 2 5 】

そして、構造情報利用者は、図 3 2 および図 3 3 に示すように、電子メールにより、発注した目的タンパク質の立体構造座標とアライメント結果の提供を受けた（ステップS B - 7）。

【 0 2 2 6 】

添付された立体構造座標は以下のとおりである。

													FAMS_ID_000038			
SEQRES	1	376	TYR	ARG	LEU	PHE	PRO	GLY	GLU	PRO	LYS	TRP	LYS	LYS	ASN	
SEQRES	2	376	THR	LEU	THR	TYR	ARG	ILE	SER	LYS	TYR	THR	PRO	SER	MET	
SEQRES	3	376	SER	SER	VAL	GLU	VAL	ASP	LYS	ALA	VAL	GLU	MET	ALA	LEU	
SEQRES	4	376	GLN	ALA	TRP	SER	SER	ALA	VAL	PRO	LEU	SER	PHE	VAL	ARG	
SEQRES	5	376	ILE	ASN	SER	GLY	GLU	ALA	ASP	ILE	MET	ILE	SER	PHE	GLU	
SEQRES	6	376	ASN	GLY	ASP	HIS	GLY	ASP	SER	TYR	PRO	PHE	ASP	GLY	PRO	
SEQRES	7	376	ARG	GLY	THR	LEU	ALA	HIS	ALA	PHE	ALA	PRO	GLY	GLU	GLY	
SEQRES	8	376	LEU	GLY	GLY	ASP	THR	HIS	PHE	ASP	ASN	PRO	GLU	LYS	TRP	
SEQRES	9	376	THR	MET	GLY	THR	ASN	GLY	PHE	ASN	LEU	PHE	THR	VAL	ALA	20
SEQRES	10	376	ALA	HIS	GLU	PHE	GLY	HIS	ALA	LEU	GLY	LEU	ALA	HIS	SER	
SEQRES	11	376	THR	ASP	PRO	SER	ALA	LEU	MET	TYR	PRO	THR	TYR	LYS	TYR	
SEQRES	12	376	LYS	ASN	PRO	TYR	GLY	PHE	HIS	LEU	PRO	LYS	ASP	ASP	VAL	
SEQRES	13	376	LYS	GLY	ILE	GLN	ALA	LEU	TYR	GLY	PRO	ARG	LYS	VAL	PHE	
SEQRES	14	376	LEU	GLY	LYS	PRO	THR	LEU	PRO	HIS	ALA	PRO	HIS	HIS	LYS	
SEQRES	15	376	PRO	SER	ILE	PRO	ASP	LEU	CYS	ASP	SER	SER	SER	SER	PHE	
SEQRES	16	376	ASP	ALA	VAL	THR	MET	LEU	GLY	LYS	GLU	LEU	LEU	LEU	PHE	
SEQRES	17	376	LYS	ASP	ARG	ILE	PHE	TRP	ARG	ARG	GLN	VAL	HIS	LEU	ARG	
SEQRES	18	376	THR	GLY	ILE	ARG	PRO	SER	THR	ILE	THR	SER	SER	PHE	PRO	
SEQRES	19	376	GLN	LEU	MET	SER	ASN	VAL	ASP	ALA	ALA	TYR	GLU	VAL	ALA	30
SEQRES	20	376	GLU	ARG	GLY	THR	ALA	TYR	PHE	PHE	LYS	GLY	PRO	HIS	TYR	
SEQRES	21	376	TRP	ILE	THR	ARG	GLY	PHE	GLN	MET	GLN	GLY	PRO	PRO	ARG	
SEQRES	22	376	THR	ILE	TYR	ASP	PHE	GLY	PHE	PRO	ARG	HIS	VAL	GLN	GLN	
SEQRES	23	376	ILE	ASP	ALA	ALA	VAL	TYR	LEU	ARG	GLU	PRO	GLN	LYS	THR	
SEQRES	24	376	LEU	PHE	PHE	VAL	GLY	ASP	GLU	TYR	TYR	SER	TYR	ASP	GLU	
SEQRES	25	376	ARG	LYS	ARG	LYS	MET	GLU	LYS	ASP	TYR	PRO	LYS	ASN	THR	
SEQRES	26	376	GLU	GLU	GLU	PHE	SER	GLY	VAL	ASN	GLY	GLN	ILE	ASP	ALA	
SEQRES	27	376	ALA	VAL	GLU	LEU	ASN	GLY	TYR	ILE	TYR	PHE	PHE	SER	GLY	
SEQRES	28	376	PRO	LYS	THR	TYR	LYS	TYR	ASP	THR	GLU	LYS	GLU	ASP	VAL	
SEQRES	29	376	VAL	SER	VAL	VAL	LYS	SER	SER	SER	TRP	ILE	GLY	CYS		40
SSBOND	1	CYS	189	CYS	376											
ATOM	1	N	TYR	1	69.108	97.854	-10.910									
ATOM	2	CA	TYR	1	68.050	96.864	-11.111									
ATOM	3	C	TYR	1	67.810	96.685	-12.621									
ATOM	4	O	TYR	1	67.551	97.665	-13.331									
ATOM	5	CB	TYR	1	66.733	97.302	-10.440									
ATOM	6	CG	TYR	1	66.090	98.582	-10.931									
ATOM	7	CD1	TYR	1	65.150	98.515	-11.971									
ATOM	8	CD2	TYR	1	66.440	99.808	-10.381									
ATOM	9	CE1	TYR	1	64.570	99.681	-12.451									50

ATOM	10	CE2	TYR	1	65.863	100.962	-10.850	
ATOM	11	CZ	TYR	1	64.930	100.891	-11.881	
ATOM	12	OH	TYR	1	64.350	102.049	-12.381	
ATOM	13	N	ARG	2	68.009	95.468	-13.110	
ATOM	14	CA	ARG	2	67.810	95.161	-14.511	
ATOM	15	C	ARG	2	66.530	94.300	-14.731	
ATOM	16	O	ARG	2	66.030	93.640	-13.811	
ATOM	17	CB	ARG	2	69.100	94.471	-15.011	
ATOM	18	CG	ARG	2	70.350	95.270	-14.681	
ATOM	19	CD	ARG	2	70.283	96.522	-15.560	10
ATOM	20	NE	ARG	2	71.531	97.306	-15.491	
ATOM	21	CZ	ARG	2	71.670	98.444	-14.841	
ATOM	22	NH1	ARG	2	70.710	99.061	-14.161	
ATOM	23	NH2	ARG	2	72.893	99.042	-14.830	
ATOM	24	N	LEU	3	65.889	94.539	-15.870	
ATOM	25	CA	LEU	3	64.711	93.801	-16.371	
ATOM	26	C	LEU	3	65.120	93.000	-17.641	
ATOM	27	O	LEU	3	65.580	93.631	-18.601	
ATOM	28	CB	LEU	3	63.583	94.782	-16.710	
ATOM	29	CG	LEU	3	63.390	95.895	-15.681	20
ATOM	30	CD1	LEU	3	62.571	97.040	-16.211	
ATOM	31	CD2	LEU	3	62.823	95.362	-14.380	
ATOM	32	N	PHE	4	65.017	91.685	-17.660	
ATOM	33	CA	PHE	4	65.470	90.885	-18.811	
ATOM	34	C	PHE	4	64.851	91.456	-20.161	
ATOM	35	O	PHE	4	63.639	91.687	-20.130	
ATOM	36	CB	PHE	4	65.071	89.415	-18.621	
ATOM	37	CG	PHE	4	65.769	88.447	-19.560	
ATOM	38	CD1	PHE	4	67.161	88.426	-19.571	
ATOM	39	CD2	PHE	4	64.951	87.641	-20.431	30
ATOM	40	CE1	PHE	4	67.783	87.532	-20.460	
ATOM	41	CE2	PHE	4	65.648	86.845	-21.320	
ATOM	42	CZ	PHE	4	66.991	86.710	-21.371	
ATOM	43	N	PRO	5	65.620	91.805	-21.251	
ATOM	44	CA	PRO	5	64.941	92.238	-22.431	
ATOM	45	C	PRO	5	63.900	91.231	-22.861	
ATOM	46	O	PRO	5	64.151	90.004	-22.881	
ATOM	47	CB	PRO	5	65.981	92.535	-23.521	
ATOM	48	CG	PRO	5	67.050	91.515	-23.221	
ATOM	49	CD	PRO	5	67.051	91.336	-21.711	40
ATOM	50	N	GLY	6	63.012	91.761	-23.661	
ATOM	51	CA	GLY	6	61.813	91.062	-24.050	
ATOM	52	C	GLY	6	60.741	91.341	-22.941	
ATOM	53	O	GLY	6	59.561	91.450	-23.261	
ATOM	54	N	GLU	7	61.233	91.662	-21.720	
ATOM	55	CA	GLU	7	60.537	91.960	-20.540	
ATOM	56	C	GLU	7	59.450	90.941	-20.161	
ATOM	57	O	GLU	7	58.419	91.518	-19.690	
ATOM	58	CB	GLU	7	60.021	93.384	-20.561	
ATOM	59	CG	GLU	7	60.941	94.557	-20.681	50

ATOM	60	CD	GLU	7	60.229	95.877	-20.760	
ATOM	61	OE1	GLU	7	59.471	96.154	-19.811	
ATOM	62	OE2	GLU	7	60.312	96.621	-21.691	
ATOM	63	N	PRO	8	59.413	89.612	-20.550	
ATOM	64	CA	PRO	8	58.285	88.930	-20.070	
ATOM	65	C	PRO	8	58.015	89.196	-18.580	
ATOM	66	O	PRO	8	58.924	89.434	-17.790	
ATOM	67	CB	PRO	8	58.303	87.462	-20.350	
ATOM	68	CG	PRO	8	59.535	87.370	-21.280	
ATOM	69	CD	PRO	8	60.424	88.648	-21.300	10
ATOM	70	N	LYS	9	56.774	89.368	-18.330	
ATOM	71	CA	LYS	9	56.185	89.541	-17.060	
ATOM	72	C	LYS	9	54.834	88.726	-17.110	
ATOM	73	O	LYS	9	54.103	88.792	-18.120	
ATOM	74	CB	LYS	9	56.056	91.025	-16.690	
ATOM	75	CG	LYS	9	54.991	91.800	-17.461	
ATOM	76	CD	LYS	9	53.573	91.612	-16.980	
ATOM	77	CE	LYS	9	52.591	92.501	-17.701	
ATOM	78	NZ	LYS	9	52.691	93.924	-17.271	
ATOM	79	N	TRP	10	54.490	88.015	-16.031	20
ATOM	80	CA	TRP	10	53.220	87.283	-16.011	
ATOM	81	C	TRP	10	52.040	88.225	-16.321	
ATOM	82	O	TRP	10	51.781	89.150	-15.551	
ATOM	83	CB	TRP	10	53.079	86.607	-14.630	
ATOM	84	CG	TRP	10	53.850	85.308	-14.461	
ATOM	85	CD1	TRP	10	54.963	85.112	-13.680	
ATOM	86	CD2	TRP	10	53.630	84.062	-15.151	
ATOM	87	NE1	TRP	10	55.450	83.845	-13.851	
ATOM	88	CE2	TRP	10	54.650	83.178	-14.741	
ATOM	89	CE3	TRP	10	52.670	83.611	-16.061	30
ATOM	90	CZ2	TRP	10	54.743	81.872	-15.220	
ATOM	91	CZ3	TRP	10	52.760	82.325	-16.541	
ATOM	92	CH2	TRP	10	53.781	81.465	-16.121	
ATOM	93	N	LYS	11	51.303	87.912	-17.390	
ATOM	94	CA	LYS	11	50.103	88.694	-17.750	
ATOM	95	C	LYS	11	49.204	88.897	-16.510	
ATOM	96	O	LYS	11	48.680	90.010	-16.411	
ATOM	97	CB	LYS	11	49.391	87.983	-18.931	
ATOM	98	CG	LYS	11	50.194	87.808	-20.220	
ATOM	99	CD	LYS	11	49.325	87.802	-21.460	40
ATOM	100	CE	LYS	11	50.019	87.195	-22.660	
ATOM	101	NZ	LYS	11	49.100	87.234	-23.831	
ATOM	102	N	LYS	12	48.811	87.851	-15.751	
ATOM	103	CA	LYS	12	48.030	88.139	-14.541	
ATOM	104	C	LYS	12	48.920	88.001	-13.271	
ATOM	105	O	LYS	12	49.824	87.157	-13.110	
ATOM	106	CB	LYS	12	46.860	87.245	-14.351	
ATOM	107	CG	LYS	12	46.861	85.879	-14.921	
ATOM	108	CD	LYS	12	45.459	85.937	-15.360	
ATOM	109	CE	LYS	12	44.990	84.500	-15.301	50

ATOM	110	NZ	LYS	12	43.759	84.457	-14.560	
ATOM	111	N	ASN	13	48.691	89.016	-12.501	
ATOM	112	CA	ASN	13	49.240	89.241	-11.211	
ATOM	113	C	ASN	13	49.194	87.987	-10.270	
ATOM	114	O	ASN	13	50.157	87.800	-9.520	
ATOM	115	CB	ASN	13	48.466	90.475	-10.660	
ATOM	116	CG	ASN	13	49.237	91.047	-9.420	
ATOM	117	OD1	ASN	13	49.248	90.393	-8.390	
ATOM	118	ND2	ASN	13	50.049	92.085	-9.370	
ATOM	119	N	THR	14	47.990	87.389	-10.031	10
ATOM	120	CA	THR	14	47.809	86.157	-9.270	
ATOM	121	C	THR	14	48.490	84.975	-10.021	
ATOM	122	O	THR	14	48.120	84.618	-11.151	
ATOM	123	CB	THR	14	46.299	85.805	-9.020	
ATOM	124	OG1	THR	14	45.631	85.345	-10.251	
ATOM	125	CG2	THR	14	45.492	86.951	-8.401	
ATOM	126	N	LEU	15	49.421	84.315	-9.331	
ATOM	127	CA	LEU	15	50.131	83.136	-9.791	
ATOM	128	C	LEU	15	50.060	82.021	-8.731	
ATOM	129	O	LEU	15	50.440	82.259	-7.571	20
ATOM	130	CB	LEU	15	51.584	83.477	-10.070	
ATOM	131	CG	LEU	15	51.878	84.533	-11.110	
ATOM	132	CD1	LEU	15	53.196	85.239	-10.780	
ATOM	133	CD2	LEU	15	51.958	83.941	-12.500	
ATOM	134	N	THR	16	50.001	80.795	-9.241	
ATOM	135	CA	THR	16	50.024	79.627	-8.380	
ATOM	136	C	THR	16	51.254	78.688	-8.720	
ATOM	137	O	THR	16	51.814	78.768	-9.810	
ATOM	138	CB	THR	16	48.574	79.018	-8.450	
ATOM	139	OG1	THR	16	48.124	78.638	-9.750	30
ATOM	140	CG2	THR	16	47.545	80.051	-7.850	
ATOM	141	N	TYR	17	51.965	78.376	-7.660	
ATOM	142	CA	TYR	17	53.204	77.617	-7.620	
ATOM	143	C	TYR	17	53.047	76.363	-6.710	
ATOM	144	O	TYR	17	52.497	76.458	-5.610	
ATOM	145	CB	TYR	17	54.259	78.585	-7.060	
ATOM	146	CG	TYR	17	54.398	78.692	-5.570	
ATOM	147	CD1	TYR	17	55.058	77.730	-4.780	
ATOM	148	CD2	TYR	17	53.928	79.843	-4.940	
ATOM	149	CE1	TYR	17	55.228	77.920	-3.400	40
ATOM	150	CE2	TYR	17	54.096	80.038	-3.560	
ATOM	151	CZ	TYR	17	54.756	79.076	-2.810	
ATOM	152	OH	TYR	17	54.965	79.307	-1.480	
ATOM	153	N	ARG	18	53.815	75.353	-7.000	
ATOM	154	CA	ARG	18	53.864	74.097	-6.310	
ATOM	155	C	ARG	18	55.314	73.598	-6.180	
ATOM	156	O	ARG	18	56.094	73.678	-7.150	
ATOM	157	CB	ARG	18	53.114	73.098	-7.210	
ATOM	158	CG	ARG	18	53.314	71.638	-6.760	
ATOM	159	CD	ARG	18	52.605	70.681	-7.670	50

ATOM	160	NE	ARG	18	52.795	69.326	-7.210	
ATOM	161	CZ	ARG	18	52.739	68.265	-8.000	
ATOM	162	NH1	ARG	18	52.428	68.422	-9.270	
ATOM	163	NH2	ARG	18	53.008	67.030	-7.530	
ATOM	164	N	ILE	19	55.648	72.973	-5.060	
ATOM	165	CA	ILE	19	56.958	72.370	-4.930	
ATOM	166	C	ILE	19	56.866	70.898	-5.380	
ATOM	167	O	ILE	19	56.286	70.076	-4.630	
ATOM	168	CB	ILE	19	57.445	72.507	-3.480	
ATOM	169	CG1	ILE	19	57.195	73.923	-2.950	10
ATOM	170	CG2	ILE	19	58.949	72.175	-3.400	
ATOM	171	CD1	ILE	19	57.764	74.229	-1.610	
ATOM	172	N	SER	20	57.309	70.565	-6.610	
ATOM	173	CA	SER	20	57.344	69.169	-7.060	
ATOM	174	C	SER	20	58.149	68.255	-6.110	
ATOM	175	O	SER	20	57.664	67.139	-5.900	
ATOM	176	CB	SER	20	57.704	69.067	-8.540	
ATOM	177	OG	SER	20	58.990	69.425	-8.941	
ATOM	178	N	LYS	21	59.260	68.690	-5.471	
ATOM	179	CA	LYS	21	59.924	67.826	-4.490	20
ATOM	180	C	LYS	21	60.631	68.622	-3.371	
ATOM	181	O	LYS	21	61.210	69.690	-3.631	
ATOM	182	CB	LYS	21	60.739	66.778	-5.160	
ATOM	183	CG	LYS	21	61.903	66.934	-5.980	
ATOM	184	CD	LYS	21	62.193	65.552	-6.570	
ATOM	185	CE	LYS	21	63.559	65.457	-7.230	
ATOM	186	NZ	LYS	21	63.751	64.040	-7.601	
ATOM	187	N	TYR	22	60.990	67.890	-2.301	
ATOM	188	CA	TYR	22	61.573	68.442	-1.070	
ATOM	189	C	TYR	22	62.949	67.767	-0.760	30
ATOM	190	O	TYR	22	63.003	66.522	-0.680	
ATOM	191	CB	TYR	22	60.550	68.129	0.021	
ATOM	192	CG	TYR	22	59.329	68.997	0.000	
ATOM	193	CD1	TYR	22	58.270	68.697	-0.851	
ATOM	194	CD2	TYR	22	59.160	70.061	0.861	
ATOM	195	CE1	TYR	22	57.111	69.424	-0.851	
ATOM	196	CE2	TYR	22	58.013	70.802	0.880	
ATOM	197	CZ	TYR	22	56.980	70.475	0.031	
ATOM	198	OH	TYR	22	55.781	71.145	0.111	
ATOM	199	N	THR	23	64.003	68.562	-0.510	40
ATOM	200	CA	THR	23	65.363	68.064	-0.200	
ATOM	201	C	THR	23	65.350	67.545	1.271	
ATOM	202	O	THR	23	65.011	68.379	2.111	
ATOM	203	CB	THR	23	66.469	69.127	-0.510	
ATOM	204	OG1	THR	23	67.810	68.590	-0.621	
ATOM	205	CG2	THR	23	66.469	70.467	0.120	
ATOM	206	N	PRO	24	65.611	66.246	1.671	
ATOM	207	CA	PRO	24	65.500	65.911	3.041	
ATOM	208	C	PRO	24	66.523	66.744	3.880	
ATOM	209	O	PRO	24	66.584	66.466	5.100	50

ATOM	210	CB	PRO	24	65.630	64.469	3.331	
ATOM	211	CG	PRO	24	66.198	63.972	2.067	
ATOM	212	CD	PRO	24	65.983	64.996	0.904	
ATOM	213	N	SER	25	67.445	67.540	3.315	
ATOM	214	CA	SER	25	68.289	68.368	4.212	
ATOM	215	C	SER	25	67.431	69.006	5.366	
ATOM	216	O	SER	25	67.843	68.800	6.518	
ATOM	217	CB	SER	25	69.056	69.452	3.430	
ATOM	218	OG	SER	25	70.004	70.218	4.203	
ATOM	219	N	MET	26	66.303	69.688	5.080	10
ATOM	220	CA	MET	26	65.454	70.219	6.126	
ATOM	221	C	MET	26	64.065	69.545	5.920	
ATOM	222	O	MET	26	63.550	69.506	4.777	
ATOM	223	CB	MET	26	65.478	71.768	6.038	
ATOM	224	CG	MET	26	66.892	72.293	6.259	
ATOM	225	SD	MET	26	67.369	72.177	8.004	
ATOM	226	CE	MET	26	69.155	72.172	8.055	
ATOM	227	N	SER	27	63.328	69.449	6.998	
ATOM	228	CA	SER	27	62.052	68.772	6.976	
ATOM	229	C	SER	27	61.024	69.662	6.158	20
ATOM	230	O	SER	27	61.244	70.825	5.854	
ATOM	231	CB	SER	27	61.534	68.419	8.332	
ATOM	232	OG	SER	27	61.145	69.363	9.265	
ATOM	233	N	SER	28	59.946	69.011	5.749	
ATOM	234	CA	SER	28	58.925	69.539	4.932	
ATOM	235	C	SER	28	58.433	70.986	5.258	
ATOM	236	O	SER	28	58.270	71.723	4.316	
ATOM	237	CB	SER	28	57.834	68.524	4.961	
ATOM	238	OG	SER	28	56.802	68.529	4.028	
ATOM	239	N	VAL	29	57.974	71.213	6.477	30
ATOM	240	CA	VAL	29	57.571	72.526	6.959	
ATOM	241	C	VAL	29	58.732	73.566	6.781	
ATOM	242	O	VAL	29	58.401	74.711	6.490	
ATOM	243	CB	VAL	29	57.070	72.366	8.398	
ATOM	244	CG1	VAL	29	56.964	73.674	9.157	
ATOM	245	CG2	VAL	29	55.716	71.620	8.406	
ATOM	246	N	GLU	30	60.002	73.251	7.139	
ATOM	247	CA	GLU	30	61.165	74.120	6.921	
ATOM	248	C	GLU	30	61.296	74.476	5.405	
ATOM	249	O	GLU	30	61.590	75.648	5.159	40
ATOM	250	CB	GLU	30	62.400	73.538	7.535	
ATOM	251	CG	GLU	30	62.632	73.953	8.950	
ATOM	252	CD	GLU	30	63.883	73.360	9.602	
ATOM	253	OE1	GLU	30	65.008	73.494	9.086	
ATOM	254	OE2	GLU	30	63.711	72.750	10.659	
ATOM	255	N	VAL	31	61.311	73.526	4.465	
ATOM	256	CA	VAL	31	61.331	73.853	3.038	
ATOM	257	C	VAL	31	60.091	74.700	2.633	
ATOM	258	O	VAL	31	60.248	75.578	1.763	
ATOM	259	CB	VAL	31	61.361	72.581	2.173	50

ATOM	260	CG1	VAL	31	61.434	72.985	0.681	
ATOM	261	CG2	VAL	31	62.529	71.718	2.517	
ATOM	262	N	ASP	32	58.887	74.388	3.147	
ATOM	263	CA	ASP	32	57.677	75.150	2.870	
ATOM	264	C	ASP	32	57.831	76.664	3.261	
ATOM	265	O	ASP	32	57.197	77.462	2.557	
ATOM	266	CB	ASP	32	56.481	74.511	3.637	
ATOM	267	CG	ASP	32	55.891	73.293	2.948	
ATOM	268	OD1	ASP	32	56.100	73.151	1.735	
ATOM	269	OD2	ASP	32	55.229	72.460	3.603	10
ATOM	270	N	LYS	33	58.111	76.992	4.530	
ATOM	271	CA	LYS	33	58.368	78.366	4.964	
ATOM	272	C	LYS	33	59.569	79.031	4.180	
ATOM	273	O	LYS	33	59.567	80.249	4.109	
ATOM	274	CB	LYS	33	58.574	78.380	6.486	
ATOM	275	CG	LYS	33	59.887	77.674	6.901	
ATOM	276	CD	LYS	33	59.923	77.469	8.384	
ATOM	277	CE	LYS	33	60.208	78.825	8.951	
ATOM	278	NZ	LYS	33	60.046	78.868	10.398	
ATOM	279	N	ALA	34	60.635	78.296	3.783	20
ATOM	280	CA	ALA	34	61.734	78.837	2.967	
ATOM	281	C	ALA	34	61.186	79.480	1.662	
ATOM	282	O	ALA	34	61.570	80.610	1.333	
ATOM	283	CB	ALA	34	62.755	77.738	2.727	
ATOM	284	N	VAL	35	60.290	78.779	0.957	
ATOM	285	CA	VAL	35	59.604	79.211	-0.215	
ATOM	286	C	VAL	35	58.479	80.264	0.117	
ATOM	287	O	VAL	35	58.411	81.225	-0.651	
ATOM	288	CB	VAL	35	59.027	78.029	-0.988	
ATOM	289	CG1	VAL	35	58.434	78.454	-2.347	30
ATOM	290	CG2	VAL	35	59.995	76.888	-1.155	
ATOM	291	N	GLU	36	57.436	79.957	0.946	
ATOM	292	CA	GLU	36	56.419	81.002	1.283	
ATOM	293	C	GLU	36	57.118	82.335	1.664	
ATOM	294	O	GLU	36	56.588	83.356	1.228	
ATOM	295	CB	GLU	36	55.401	80.654	2.424	
ATOM	296	CG	GLU	36	54.382	81.808	2.688	
ATOM	297	CD	GLU	36	53.659	82.436	1.416	
ATOM	298	OE1	GLU	36	52.959	81.691	0.658	
ATOM	299	OE2	GLU	36	53.770	83.680	1.209	40
ATOM	300	N	MET	37	58.014	82.366	2.647	
ATOM	301	CA	MET	37	58.718	83.633	2.951	
ATOM	302	C	MET	37	59.398	84.250	1.685	
ATOM	303	O	MET	37	59.219	85.469	1.518	
ATOM	304	CB	MET	37	59.832	83.403	3.971	
ATOM	305	CG	MET	37	59.317	83.184	5.341	
ATOM	306	SD	MET	37	60.619	83.188	6.537	
ATOM	307	CE	MET	37	61.416	84.774	6.525	
ATOM	308	N	ALA	38	60.144	83.480	0.838	
ATOM	309	CA	ALA	38	60.705	84.051	-0.383	50

ATOM	310	C	ALA	38	59.598	84.711	-1.270	
ATOM	311	O	ALA	38	59.844	85.829	-1.734	
ATOM	312	CB	ALA	38	61.490	82.948	-1.082	
ATOM	313	N	LEU	39	58.459	84.051	-1.574	
ATOM	314	CA	LEU	39	57.319	84.620	-2.317	
ATOM	315	C	LEU	39	56.782	85.898	-1.598	
ATOM	316	O	LEU	39	56.400	86.819	-2.328	
ATOM	317	CB	LEU	39	56.207	83.588	-2.464	
ATOM	318	CG	LEU	39	56.152	82.567	-3.536	
ATOM	319	CD1	LEU	39	55.927	83.290	-4.853	10
ATOM	320	CD2	LEU	39	57.419	81.723	-3.549	
ATOM	321	N	GLN	40	56.434	85.847	-0.299	
ATOM	322	CA	GLN	40	56.014	86.970	0.527	
ATOM	323	C	GLN	40	56.885	88.259	0.298	
ATOM	324	O	GLN	40	56.287	89.329	0.403	
ATOM	325	CB	GLN	40	56.016	86.484	1.977	
ATOM	326	CG	GLN	40	55.024	87.234	2.837	
ATOM	327	CD	GLN	40	54.752	86.442	4.094	
ATOM	328	OE1	GLN	40	55.547	86.483	5.061	
ATOM	329	NE2	GLN	40	53.647	85.664	4.083	20
ATOM	330	N	ALA	41	58.238	88.229	0.419	
ATOM	331	CA	ALA	41	59.115	89.369	0.120	
ATOM	332	C	ALA	41	58.658	90.114	-1.179	
ATOM	333	O	ALA	41	58.625	91.355	-1.120	
ATOM	334	CB	ALA	41	60.564	88.871	0.023	
ATOM	335	N	TRP	42	58.445	89.436	-2.322	
ATOM	336	CA	TRP	42	57.925	90.005	-3.561	
ATOM	337	C	TRP	42	56.412	90.451	-3.449	
ATOM	338	O	TRP	42	56.063	91.448	-4.071	
ATOM	339	CB	TRP	42	58.220	88.947	-4.633	30
ATOM	340	CG	TRP	42	59.672	88.648	-4.967	
ATOM	341	CD1	TRP	42	60.309	87.443	-4.803	
ATOM	342	CD2	TRP	42	60.677	89.555	-5.476	
ATOM	343	NE1	TRP	42	61.623	87.549	-5.170	
ATOM	344	CE2	TRP	42	61.876	88.830	-5.582	
ATOM	345	CE3	TRP	42	60.669	90.906	-5.843	
ATOM	346	CZ2	TRP	42	63.067	89.408	-6.043	
ATOM	347	CZ3	TRP	42	61.857	91.486	-6.302	
ATOM	348	CH2	TRP	42	63.037	90.733	-6.396	
ATOM	349	N	SER	43	55.531	89.775	-2.677	40
ATOM	350	CA	SER	43	54.163	90.188	-2.466	
ATOM	351	C	SER	43	54.152	91.608	-1.778	
ATOM	352	O	SER	43	53.805	92.525	-2.477	
ATOM	353	CB	SER	43	53.415	89.108	-1.685	
ATOM	354	OG	SER	43	53.185	87.840	-2.390	
ATOM	355	N	SER	44	54.866	91.847	-0.652	
ATOM	356	CA	SER	44	54.876	93.095	0.118	
ATOM	357	C	SER	44	54.978	94.399	-0.738	
ATOM	358	O	SER	44	54.306	95.349	-0.366	
ATOM	359	CB	SER	44	56.080	93.062	1.036	50

ATOM	360	OG	SER	44	56.117	92.173	2.096	
ATOM	361	N	ALA	45	55.809	94.480	-1.782	
ATOM	362	CA	ALA	45	56.002	95.697	-2.539	
ATOM	363	C	ALA	45	55.263	95.740	-3.944	
ATOM	364	O	ALA	45	55.515	96.685	-4.691	
ATOM	365	CB	ALA	45	57.520	95.814	-2.718	
ATOM	366	N	VAL	46	54.423	94.755	-4.325	
ATOM	367	CA	VAL	46	53.687	94.679	-5.623	
ATOM	368	C	VAL	46	52.446	93.731	-5.417	
ATOM	369	O	VAL	46	52.664	92.684	-4.799	10
ATOM	370	CB	VAL	46	54.648	94.227	-6.729	
ATOM	371	CG1	VAL	46	55.271	92.847	-6.439	
ATOM	372	CG2	VAL	46	53.918	94.226	-8.070	
ATOM	373	N	PRO	47	51.223	93.896	-5.990	
ATOM	374	CA	PRO	47	50.135	93.028	-5.660	
ATOM	375	C	PRO	47	50.314	91.584	-6.083	
ATOM	376	O	PRO	47	49.366	90.827	-5.824	
ATOM	377	CB	PRO	47	48.756	93.570	-6.177	
ATOM	378	CG	PRO	47	49.250	94.657	-7.147	
ATOM	379	CD	PRO	47	50.733	94.977	-6.941	20
ATOM	380	N	LEU	48	51.465	91.085	-6.594	
ATOM	381	CA	LEU	48	51.531	89.658	-6.883	
ATOM	382	C	LEU	48	51.052	88.822	-5.625	
ATOM	383	O	LEU	48	51.581	88.942	-4.506	
ATOM	384	CB	LEU	48	52.964	89.361	-7.271	
ATOM	385	CG	LEU	48	53.423	89.904	-8.618	
ATOM	386	CD1	LEU	48	54.920	90.042	-8.621	
ATOM	387	CD2	LEU	48	52.933	89.065	-9.825	
ATOM	388	N	SER	49	50.099	87.890	-5.918	
ATOM	389	CA	SER	49	49.451	86.961	-4.973	30
ATOM	390	C	SER	49	49.731	85.506	-5.456	
ATOM	391	O	SER	49	49.232	85.139	-6.535	
ATOM	392	CB	SER	49	47.946	87.302	-4.893	
ATOM	393	OG	SER	49	47.152	86.412	-4.120	
ATOM	394	N	PHE	50	50.071	84.618	-4.519	
ATOM	395	CA	PHE	50	50.455	83.254	-4.847	
ATOM	396	C	PHE	50	49.713	82.202	-3.984	
ATOM	397	O	PHE	50	49.727	82.255	-2.744	
ATOM	398	CB	PHE	50	51.959	83.177	-4.629	
ATOM	399	CG	PHE	50	52.845	84.173	-5.322	40
ATOM	400	CD1	PHE	50	53.129	84.072	-6.679	
ATOM	401	CD2	PHE	50	53.365	85.244	-4.618	
ATOM	402	CE1	PHE	50	53.900	85.026	-7.314	
ATOM	403	CE2	PHE	50	54.138	86.200	-5.245	
ATOM	404	CZ	PHE	50	54.404	86.089	-6.595	
ATOM	405	N	VAL	51	49.194	81.187	-4.685	
ATOM	406	CA	VAL	51	48.538	80.049	-4.042	
ATOM	407	C	VAL	51	49.331	78.742	-4.328	
ATOM	408	O	VAL	51	49.437	78.311	-5.490	
ATOM	409	CB	VAL	51	47.088	79.971	-4.532	50

ATOM	410	CG1	VAL	51	46.283	78.784	-4.066	
ATOM	411	CG2	VAL	51	46.377	81.308	-4.283	
ATOM	412	N	ARG	52	49.979	78.197	-3.283	
ATOM	413	CA	ARG	52	50.708	76.937	-3.334	
ATOM	414	C	ARG	52	49.734	75.746	-3.548	
ATOM	415	O	ARG	52	48.825	75.527	-2.736	
ATOM	416	CB	ARG	52	51.477	76.778	-2.024	
ATOM	417	CG	ARG	52	52.307	75.508	-1.820	
ATOM	418	CD	ARG	52	53.505	75.689	-0.970	
ATOM	419	NE	ARG	52	53.318	75.856	0.442	10
ATOM	420	CZ	ARG	52	53.218	74.849	1.319	
ATOM	421	NH1	ARG	52	53.272	73.558	1.019	
ATOM	422	NH2	ARG	52	53.015	75.231	2.589	
ATOM	423	N	ILE	53	49.937	74.980	-4.636	
ATOM	424	CA	ILE	53	49.146	73.775	-4.871	
ATOM	425	C	ILE	53	50.097	72.517	-4.902	
ATOM	426	O	ILE	53	51.319	72.638	-4.712	
ATOM	427	CB	ILE	53	48.283	73.938	-6.149	
ATOM	428	CG1	ILE	53	49.140	74.184	-7.409	
ATOM	429	CG2	ILE	53	47.253	75.089	-5.872	20
ATOM	430	CD1	ILE	53	48.410	73.993	-8.785	
ATOM	431	N	ASN	54	49.514	71.352	-4.614	
ATOM	432	CA	ASN	54	50.208	70.048	-4.525	
ATOM	433	C	ASN	54	49.900	69.045	-5.711	
ATOM	434	O	ASN	54	50.639	68.054	-5.821	
ATOM	435	CB	ASN	54	49.749	69.413	-3.201	
ATOM	436	CG	ASN	54	48.250	69.167	-3.097	
ATOM	437	OD1	ASN	54	47.678	68.365	-3.856	
ATOM	438	ND2	ASN	54	47.636	69.744	-2.062	
ATOM	439	N	SER	55	48.886	69.262	-6.574	30
ATOM	440	CA	SER	55	48.541	68.378	-7.680	
ATOM	441	C	SER	55	48.231	69.181	-8.959	
ATOM	442	O	SER	55	47.294	70.005	-8.966	
ATOM	443	CB	SER	55	47.351	67.492	-7.255	
ATOM	444	OG	SER	55	46.173	68.190	-6.872	
ATOM	445	N	GLY	56	48.807	68.730	-10.068	
ATOM	446	CA	GLY	56	48.725	69.387	-11.357	
ATOM	447	C	GLY	56	49.789	70.502	-11.549	
ATOM	448	O	GLY	56	50.824	70.540	-10.854	
ATOM	449	N	GLU	57	49.753	71.020	-12.754	40
ATOM	450	CA	GLU	57	50.562	72.142	-13.184	
ATOM	451	C	GLU	57	50.053	73.473	-12.615	
ATOM	452	O	GLU	57	48.850	73.784	-12.652	
ATOM	453	CB	GLU	57	50.510	72.242	-14.696	
ATOM	454	CG	GLU	57	50.982	71.115	-15.549	
ATOM	455	CD	GLU	57	52.475	70.864	-15.481	
ATOM	456	OE1	GLU	57	53.213	71.235	-14.579	
ATOM	457	OE2	GLU	57	52.836	70.232	-16.505	
ATOM	458	N	ALA	58	51.025	74.251	-12.196	
ATOM	459	CA	ALA	58	50.902	75.598	-11.702	50

ATOM	460	C	ALA	58	52.016	76.396	-12.359	
ATOM	461	O	ALA	58	53.173	75.906	-12.504	
ATOM	462	CB	ALA	58	50.968	75.578	-10.173	
ATOM	463	N	ASP	59	51.837	77.728	-12.420	
ATOM	464	CA	ASP	59	52.804	78.684	-12.921	
ATOM	465	C	ASP	59	54.281	78.431	-12.444	
ATOM	466	O	ASP	59	55.124	78.242	-13.318	
ATOM	467	CB	ASP	59	52.321	80.065	-12.609	
ATOM	468	CG	ASP	59	51.014	80.420	-13.273	
ATOM	469	OD1	ASP	59	50.820	80.040	-14.458	10
ATOM	470	OD2	ASP	59	50.160	81.036	-12.601	
ATOM	471	N	ILE	60	54.603	78.384	-11.127	
ATOM	472	CA	ILE	60	55.989	78.231	-10.714	
ATOM	473	C	ILE	60	56.215	76.823	-10.095	
ATOM	474	O	ILE	60	55.925	76.594	-8.925	
ATOM	475	CB	ILE	60	56.316	79.388	-9.744	
ATOM	476	CG1	ILE	60	56.262	80.760	-10.446	
ATOM	477	CG2	ILE	60	57.711	79.194	-9.115	
ATOM	478	CD1	ILE	60	56.343	82.010	-9.523	
ATOM	479	N	MET	61	56.814	75.903	-10.877	20
ATOM	480	CA	MET	61	57.162	74.581	-10.358	
ATOM	481	C	MET	61	58.602	74.647	-9.824	
ATOM	482	O	MET	61	59.553	74.793	-10.603	
ATOM	483	CB	MET	61	57.093	73.474	-11.404	
ATOM	484	CG	MET	61	55.856	73.503	-12.212	
ATOM	485	SD	MET	61	54.533	73.104	-11.149	
ATOM	486	CE	MET	61	54.514	71.406	-11.289	
ATOM	487	N	ILE	62	58.803	74.330	-8.569	
ATOM	488	CA	ILE	62	60.095	74.348	-7.963	
ATOM	489	C	ILE	62	60.475	72.914	-7.539	30
ATOM	490	O	ILE	62	59.832	72.329	-6.647	
ATOM	491	CB	ILE	62	60.015	75.302	-6.736	
ATOM	492	CG1	ILE	62	59.859	76.752	-7.233	
ATOM	493	CG2	ILE	62	61.283	75.129	-5.908	
ATOM	494	CD1	ILE	62	59.395	77.768	-6.194	
ATOM	495	N	SER	63	61.629	72.459	-7.995	
ATOM	496	CA	SER	63	62.177	71.172	-7.602	
ATOM	497	C	SER	63	63.697	71.252	-7.399	
ATOM	498	O	SER	63	64.449	71.720	-8.270	
ATOM	499	CB	SER	63	61.890	70.039	-8.557	40
ATOM	500	OG	SER	63	61.963	70.200	-9.925	
ATOM	501	N	PHE	64	64.113	70.449	-6.437	
ATOM	502	CA	PHE	64	65.492	70.229	-6.069	
ATOM	503	C	PHE	64	66.089	69.086	-6.914	
ATOM	504	O	PHE	64	65.797	67.889	-6.706	
ATOM	505	CB	PHE	64	65.547	69.901	-4.574	
ATOM	506	CG	PHE	64	65.211	71.054	-3.691	
ATOM	507	CD1	PHE	64	63.882	71.410	-3.477	
ATOM	508	CD2	PHE	64	66.200	71.809	-3.091	
ATOM	509	CE1	PHE	64	63.559	72.505	-2.676	50

ATOM	510	CE2	PHE	64	65.873	72.892	-2.298	
ATOM	511	CZ	PHE	64	64.560	73.235	-2.092	
ATOM	512	N	GLU	65	66.976	69.485	-7.833	
ATOM	513	CA	GLU	65	67.649	68.605	-8.777	
ATOM	514	C	GLU	65	69.155	69.012	-8.913	
ATOM	515	O	GLU	65	69.502	70.203	-8.932	
ATOM	516	CB	GLU	65	66.921	68.810	-10.108	
ATOM	517	CG	GLU	65	65.632	68.043	-10.292	
ATOM	518	CD	GLU	65	65.129	67.961	-11.753	
ATOM	519	OE1	GLU	65	64.424	68.879	-12.207	10
ATOM	520	OE2	GLU	65	65.441	66.968	-12.442	
ATOM	521	N	ASN	66	69.990	68.017	-9.154	
ATOM	522	CA	ASN	66	71.436	68.132	-9.382	
ATOM	523	C	ASN	66	71.889	67.590	-10.769	
ATOM	524	O	ASN	66	71.191	66.793	-11.415	
ATOM	525	CB	ASN	66	72.086	67.325	-8.234	
ATOM	526	CG	ASN	66	71.886	65.821	-8.250	
ATOM	527	OD1	ASN	66	72.449	65.162	-7.383	
ATOM	528	ND2	ASN	66	71.117	65.134	-9.097	
ATOM	529	N	GLY	67	73.122	67.948	-11.152	20
ATOM	530	CA	GLY	67	73.793	67.545	-12.387	
ATOM	531	C	GLY	67	72.928	67.856	-13.639	
ATOM	532	O	GLY	67	72.052	68.747	-13.594	
ATOM	533	N	ASP	68	72.903	66.893	-14.543	
ATOM	534	CA	ASP	68	72.179	67.047	-15.811	
ATOM	535	C	ASP	68	70.739	66.480	-15.676	
ATOM	536	O	ASP	68	70.582	65.262	-15.518	
ATOM	537	CB	ASP	68	72.919	66.375	-16.985	
ATOM	538	CG	ASP	68	72.237	66.481	-18.354	
ATOM	539	OD1	ASP	68	71.613	67.542	-18.620	30
ATOM	540	OD2	ASP	68	72.304	65.511	-19.167	
ATOM	541	N	HIS	69	69.758	67.383	-15.500	
ATOM	542	CA	HIS	69	68.333	66.960	-15.467	
ATOM	543	C	HIS	69	67.535	67.203	-16.801	
ATOM	544	O	HIS	69	66.357	66.805	-16.832	
ATOM	545	CB	HIS	69	67.674	67.677	-14.285	
ATOM	546	CG	HIS	69	68.154	69.062	-14.103	
ATOM	547	ND1	HIS	69	69.322	69.311	-13.422	
ATOM	548	CD2	HIS	69	67.724	70.254	-14.566	
ATOM	549	CE1	HIS	69	69.602	70.593	-13.487	40
ATOM	550	NE2	HIS	69	68.647	71.192	-14.185	
ATOM	551	N	GLY	70	68.168	67.693	-17.907	
ATOM	552	CA	GLY	70	67.433	67.873	-19.195	
ATOM	553	C	GLY	70	66.914	69.300	-19.582	
ATOM	554	O	GLY	70	65.963	69.332	-20.370	
ATOM	555	N	ASP	71	67.317	70.414	-18.899	
ATOM	556	CA	ASP	71	66.945	71.788	-19.259	
ATOM	557	C	ASP	71	68.108	72.639	-19.898	
ATOM	558	O	ASP	71	67.905	73.852	-20.045	
ATOM	559	CB	ASP	71	66.490	72.443	-17.945	50

ATOM	560	CG	ASP	71	67.523	72.560	-16.848	
ATOM	561	OD1	ASP	71	68.615	71.995	-17.013	
ATOM	562	OD2	ASP	71	67.280	73.175	-15.792	
ATOM	563	N	SER	72	69.192	72.043	-20.446	
ATOM	564	CA	SER	72	70.337	72.715	-21.113	
ATOM	565	C	SER	72	71.121	73.652	-20.201	
ATOM	566	O	SER	72	72.052	74.294	-20.708	
ATOM	567	CB	SER	72	69.811	73.481	-22.321	
ATOM	568	OG	SER	72	69.176	72.720	-23.331	
ATOM	569	N	TYR	73	71.071	73.438	-18.891	10
ATOM	570	CA	TYR	73	71.816	74.153	-17.921	
ATOM	571	C	TYR	73	71.942	73.295	-16.628	
ATOM	572	O	TYR	73	71.312	73.620	-15.617	
ATOM	573	CB	TYR	73	71.188	75.492	-17.581	
ATOM	574	CG	TYR	73	71.020	76.369	-18.790	
ATOM	575	CD1	TYR	73	72.051	77.190	-19.240	
ATOM	576	CD2	TYR	73	69.855	76.377	-19.529	
ATOM	577	CE1	TYR	73	71.932	77.978	-20.360	
ATOM	578	CE2	TYR	73	69.686	77.155	-20.677	
ATOM	579	CZ	TYR	73	70.742	77.966	-21.086	20
ATOM	580	OH	TYR	73	70.640	78.747	-22.202	
ATOM	581	N	PRO	74	72.664	72.094	-16.619	
ATOM	582	CA	PRO	74	72.746	71.334	-15.425	
ATOM	583	C	PRO	74	73.535	72.079	-14.318	
ATOM	584	O	PRO	74	74.366	72.952	-14.594	
ATOM	585	CB	PRO	74	73.510	70.016	-15.773	
ATOM	586	CG	PRO	74	74.376	70.497	-16.966	
ATOM	587	CD	PRO	74	73.427	71.440	-17.730	
ATOM	588	N	PHE	75	73.538	71.401	-13.164	
ATOM	589	CA	PHE	75	74.199	71.776	-11.974	30
ATOM	590	C	PHE	75	75.578	71.053	-11.922	
ATOM	591	O	PHE	75	75.758	69.913	-12.396	
ATOM	592	CB	PHE	75	73.232	71.435	-10.842	
ATOM	593	CG	PHE	75	72.222	72.503	-10.546	
ATOM	594	CD1	PHE	75	72.558	73.843	-10.529	
ATOM	595	CD2	PHE	75	70.889	72.161	-10.412	
ATOM	596	CE1	PHE	75	71.563	74.819	-10.392	
ATOM	597	CE2	PHE	75	69.901	73.141	-10.273	
ATOM	598	CZ	PHE	75	70.231	74.453	-10.267	
ATOM	599	N	ASP	76	76.479	71.659	-11.180	40
ATOM	600	CA	ASP	76	77.893	71.238	-11.047	
ATOM	601	C	ASP	76	78.290	70.438	-9.756	
ATOM	602	O	ASP	76	79.494	70.181	-9.627	
ATOM	603	CB	ASP	76	78.706	72.549	-11.021	
ATOM	604	CG	ASP	76	78.361	73.582	-9.918	
ATOM	605	OD1	ASP	76	77.265	73.510	-9.294	
ATOM	606	OD2	ASP	76	79.183	74.492	-9.682	
ATOM	607	N	GLY	77	77.369	69.821	-9.062	
ATOM	608	CA	GLY	77	77.768	69.170	-7.786	
ATOM	609	C	GLY	77	77.816	70.339	-6.721	50

ATOM	610	O	GLY	77	77.487	71.503	-7.055	
ATOM	611	N	PRO	78	78.051	70.067	-5.407	
ATOM	612	CA	PRO	78	78.012	71.143	-4.476	
ATOM	613	C	PRO	78	78.913	72.318	-4.903	
ATOM	614	O	PRO	78	79.988	72.178	-5.539	
ATOM	615	CB	PRO	78	78.326	70.614	-3.037	
ATOM	616	CG	PRO	78	78.275	69.087	-3.245	
ATOM	617	CD	PRO	78	78.498	68.776	-4.732	
ATOM	618	N	ARG	79	78.619	73.388	-4.111	
ATOM	619	CA	ARG	79	79.109	74.729	-4.151	10
ATOM	620	C	ARG	79	78.805	75.349	-5.523	
ATOM	621	O	ARG	79	77.618	75.337	-5.903	
ATOM	622	CB	ARG	79	80.606	74.643	-3.782	
ATOM	623	CG	ARG	79	80.960	74.318	-2.380	
ATOM	624	CD	ARG	79	80.402	75.327	-1.425	
ATOM	625	NE	ARG	79	80.751	74.925	-0.047	
ATOM	626	CZ	ARG	79	80.390	75.656	1.014	
ATOM	627	NH1	ARG	79	79.838	76.869	0.907	
ATOM	628	NH2	ARG	79	80.524	75.143	2.252	
ATOM	629	N	GLY	80	79.705	76.145	-6.088	20
ATOM	630	CA	GLY	80	79.520	76.721	-7.388	
ATOM	631	C	GLY	80	78.115	77.341	-7.525	
ATOM	632	O	GLY	80	77.859	78.413	-6.964	
ATOM	633	N	THR	81	77.490	76.928	-8.650	
ATOM	634	CA	THR	81	76.105	77.271	-8.994	
ATOM	635	C	THR	81	75.154	76.380	-8.175	
ATOM	636	O	THR	81	75.116	75.150	-8.299	
ATOM	637	CB	THR	81	75.791	77.141	-10.525	
ATOM	638	OG1	THR	81	76.529	77.985	-11.396	
ATOM	639	CG2	THR	81	74.271	77.356	-10.823	30
ATOM	640	N	LEU	82	74.455	77.056	-7.279	
ATOM	641	CA	LEU	82	73.443	76.495	-6.385	
ATOM	642	C	LEU	82	72.026	76.371	-7.039	
ATOM	643	O	LEU	82	71.282	75.536	-6.541	
ATOM	644	CB	LEU	82	73.369	77.413	-5.164	
ATOM	645	CG	LEU	82	74.408	78.124	-4.333	
ATOM	646	CD1	LEU	82	73.819	78.586	-3.049	
ATOM	647	CD2	LEU	82	75.552	77.195	-4.043	
ATOM	648	N	ALA	83	71.494	77.385	-7.753	
ATOM	649	CA	ALA	83	70.152	77.400	-8.326	40
ATOM	650	C	ALA	83	70.031	78.428	-9.496	
ATOM	651	O	ALA	83	70.594	79.545	-9.466	
ATOM	652	CB	ALA	83	69.185	77.742	-7.176	
ATOM	653	N	HIS	84	69.017	78.166	-10.297	
ATOM	654	CA	HIS	84	68.633	78.904	-11.484	
ATOM	655	C	HIS	84	67.092	78.774	-11.725	
ATOM	656	O	HIS	84	66.486	77.698	-11.513	
ATOM	657	CB	HIS	84	69.441	78.333	-12.642	
ATOM	658	CG	HIS	84	69.200	76.952	-13.131	
ATOM	659	ND1	HIS	84	70.218	76.125	-13.565	50

ATOM	660	CD2	HIS	84	68.053	76.262	-13.348	
ATOM	661	CE1	HIS	84	69.707	75.003	-14.027	
ATOM	662	NE2	HIS	84	68.392	75.062	-13.927	
ATOM	663	N	ALA	85	66.486	79.824	-12.289	
ATOM	664	CA	ALA	85	65.051	79.920	-12.566	
ATOM	665	C	ALA	85	64.803	80.515	-13.988	
ATOM	666	O	ALA	85	65.530	81.426	-14.418	
ATOM	667	CB	ALA	85	64.420	80.810	-11.491	
ATOM	668	N	PHE	86	63.641	80.207	-14.573	
ATOM	669	CA	PHE	86	63.296	80.707	-15.907	10
ATOM	670	C	PHE	86	62.223	81.849	-15.858	
ATOM	671	O	PHE	86	61.600	82.095	-14.829	
ATOM	672	CB	PHE	86	62.885	79.539	-16.805	
ATOM	673	CG	PHE	86	63.778	78.353	-16.765	
ATOM	674	CD1	PHE	86	63.738	77.469	-15.692	
ATOM	675	CD2	PHE	86	64.634	78.062	-17.828	
ATOM	676	CE1	PHE	86	64.525	76.314	-15.683	
ATOM	677	CE2	PHE	86	65.421	76.900	-17.812	
ATOM	678	CZ	PHE	86	65.358	76.037	-16.741	
ATOM	679	N	ALA	87	62.300	82.744	-16.860	20
ATOM	680	CA	ALA	87	61.485	83.970	-17.018	
ATOM	681	C	ALA	87	60.023	83.706	-17.406	
ATOM	682	O	ALA	87	59.835	82.770	-18.199	
ATOM	683	CB	ALA	87	62.142	84.802	-18.119	
ATOM	684	N	PRO	88	58.956	84.389	-16.815	
ATOM	685	CA	PRO	88	57.663	84.038	-17.162	
ATOM	686	C	PRO	88	57.454	83.740	-18.624	
ATOM	687	O	PRO	88	58.076	84.295	-19.535	
ATOM	688	CB	PRO	88	56.700	85.066	-16.593	
ATOM	689	CG	PRO	88	57.649	86.304	-16.623	30
ATOM	690	CD	PRO	88	58.905	85.675	-16.064	
ATOM	691	N	GLY	89	56.685	82.643	-18.718	
ATOM	692	CA	GLY	89	56.216	82.038	-19.919	
ATOM	693	C	GLY	89	55.445	80.752	-19.503	
ATOM	694	O	GLY	89	55.542	80.213	-18.373	
ATOM	695	N	GLU	90	54.998	80.081	-20.534	
ATOM	696	CA	GLU	90	54.300	78.809	-20.465	
ATOM	697	C	GLU	90	55.305	77.663	-20.212	
ATOM	698	O	GLU	90	56.331	77.606	-20.894	
ATOM	699	CB	GLU	90	53.546	78.617	-21.779	40
ATOM	700	CG	GLU	90	52.113	79.136	-21.730	
ATOM	701	CD	GLU	90	51.079	78.199	-22.368	
ATOM	702	OE1	GLU	90	51.465	77.126	-22.970	
ATOM	703	OE2	GLU	90	49.821	78.483	-22.304	
ATOM	704	N	GLY	91	54.815	76.558	-19.628	
ATOM	705	CA	GLY	91	55.704	75.414	-19.445	
ATOM	706	C	GLY	91	56.917	75.844	-18.538	
ATOM	707	O	GLY	91	56.729	76.000	-17.306	
ATOM	708	N	LEU	92	58.104	75.505	-19.101	
ATOM	709	CA	LEU	92	59.399	75.843	-18.478	50

ATOM	710	C	LEU	92	59.444	77.280	-17.857	
ATOM	711	O	LEU	92	60.081	77.390	-16.815	
ATOM	712	CB	LEU	92	60.475	75.590	-19.577	
ATOM	713	CG	LEU	92	61.964	75.214	-19.307	
ATOM	714	CD1	LEU	92	62.746	75.946	-20.312	
ATOM	715	CD2	LEU	92	62.409	75.298	-17.894	
ATOM	716	N	GLY	93	58.794	78.290	-18.440	
ATOM	717	CA	GLY	93	58.871	79.673	-17.925	
ATOM	718	C	GLY	93	58.365	79.742	-16.461	
ATOM	719	O	GLY	93	57.238	79.356	-16.151	10
ATOM	720	N	GLY	94	59.088	80.619	-15.700	
ATOM	721	CA	GLY	94	58.927	80.845	-14.252	
ATOM	722	C	GLY	94	59.095	79.574	-13.361	
ATOM	723	O	GLY	94	58.551	79.599	-12.257	
ATOM	724	N	ASP	95	60.017	78.658	-13.648	
ATOM	725	CA	ASP	95	60.239	77.410	-12.960	
ATOM	726	C	ASP	95	61.670	77.417	-12.371	
ATOM	727	O	ASP	95	62.661	77.419	-13.108	
ATOM	728	CB	ASP	95	60.065	76.243	-13.929	
ATOM	729	CG	ASP	95	58.617	75.958	-14.207	20
ATOM	730	OD1	ASP	95	57.737	76.631	-13.642	
ATOM	731	OD2	ASP	95	58.347	75.028	-14.989	
ATOM	732	N	THR	96	61.721	77.229	-11.068	
ATOM	733	CA	THR	96	62.985	77.262	-10.364	
ATOM	734	C	THR	96	63.484	75.818	-10.053	
ATOM	735	O	THR	96	62.765	75.056	-9.401	
ATOM	736	CB	THR	96	62.898	78.122	-9.051	
ATOM	737	OG1	THR	96	62.420	79.485	-9.258	
ATOM	738	CG2	THR	96	64.375	78.306	-8.550	
ATOM	739	N	HIS	97	64.796	75.615	-10.210	30
ATOM	740	CA	HIS	97	65.508	74.384	-9.885	
ATOM	741	C	HIS	97	66.714	74.686	-8.949	
ATOM	742	O	HIS	97	67.610	75.449	-9.309	
ATOM	743	CB	HIS	97	66.031	73.704	-11.138	
ATOM	744	CG	HIS	97	65.031	73.455	-12.204	
ATOM	745	ND1	HIS	97	65.361	72.947	-13.446	
ATOM	746	CD2	HIS	97	63.702	73.718	-12.249	
ATOM	747	CE1	HIS	97	64.285	72.945	-14.218	
ATOM	748	NE2	HIS	97	63.269	73.400	-13.513	
ATOM	749	N	PHE	98	66.747	74.027	-7.787	40
ATOM	750	CA	PHE	98	67.826	74.090	-6.806	
ATOM	751	C	PHE	98	68.687	72.811	-6.882	
ATOM	752	O	PHE	98	68.229	71.777	-6.392	
ATOM	753	CB	PHE	98	67.236	74.340	-5.410	
ATOM	754	CG	PHE	98	66.329	75.533	-5.245	
ATOM	755	CD1	PHE	98	64.968	75.447	-5.530	
ATOM	756	CD2	PHE	98	66.846	76.788	-4.892	
ATOM	757	CE1	PHE	98	64.146	76.582	-5.475	
ATOM	758	CE2	PHE	98	66.020	77.931	-4.839	
ATOM	759	CZ	PHE	98	64.672	77.831	-5.133	50

ATOM	760	N	ASP	99	70.002	73.043	-6.895	
ATOM	761	CA	ASP	99	71.035	72.050	-6.989	
ATOM	762	C	ASP	99	71.094	71.222	-5.637	
ATOM	763	O	ASP	99	71.249	71.749	-4.532	
ATOM	764	CB	ASP	99	72.362	72.705	-7.289	
ATOM	765	CG	ASP	99	73.504	71.730	-7.420	
ATOM	766	OD1	ASP	99	73.283	70.512	-7.448	
ATOM	767	OD2	ASP	99	74.654	72.207	-7.488	
ATOM	768	N	ASN	100	70.787	69.924	-5.820	
ATOM	769	CA	ASN	100	70.627	68.937	-4.808	10
ATOM	770	C	ASN	100	71.837	68.665	-3.855	
ATOM	771	O	ASN	100	71.570	68.898	-2.654	
ATOM	772	CB	ASN	100	70.154	67.701	-5.522	
ATOM	773	CG	ASN	100	69.742	66.465	-4.823	
ATOM	774	OD1	ASN	100	70.632	65.724	-4.366	
ATOM	775	ND2	ASN	100	68.430	66.224	-4.712	
ATOM	776	N	PRO	101	73.001	68.074	-4.144	
ATOM	777	CA	PRO	101	74.001	67.998	-3.063	
ATOM	778	C	PRO	101	74.346	69.287	-2.257	
ATOM	779	O	PRO	101	75.066	69.133	-1.305	20
ATOM	780	CB	PRO	101	75.291	67.279	-3.521	
ATOM	781	CG	PRO	101	75.066	67.230	-5.044	
ATOM	782	CD	PRO	101	73.846	68.085	-5.412	
ATOM	783	N	GLU	102	73.990	70.502	-2.689	
ATOM	784	CA	GLU	102	74.363	71.655	-1.806	
ATOM	785	C	GLU	102	73.757	71.347	-0.384	
ATOM	786	O	GLU	102	72.608	70.849	-0.354	
ATOM	787	CB	GLU	102	73.578	72.847	-2.365	
ATOM	788	CG	GLU	102	73.899	73.303	-3.778	
ATOM	789	CD	GLU	102	75.367	73.265	-4.107	30
ATOM	790	OE1	GLU	102	76.216	73.237	-3.181	
ATOM	791	OE2	GLU	102	75.691	73.227	-5.314	
ATOM	792	N	LYS	103	74.329	71.836	0.742	
ATOM	793	CA	LYS	103	73.623	71.577	2.023	
ATOM	794	C	LYS	103	72.569	72.709	2.256	
ATOM	795	O	LYS	103	72.949	73.869	2.476	
ATOM	796	CB	LYS	103	74.579	71.349	3.218	
ATOM	797	CG	LYS	103	73.828	70.527	4.331	
ATOM	798	CD	LYS	103	73.298	71.552	5.332	
ATOM	799	CE	LYS	103	73.094	70.975	6.714	40
ATOM	800	NZ	LYS	103	71.856	70.141	6.764	
ATOM	801	N	TRP	104	71.291	72.374	1.984	
ATOM	802	CA	TRP	104	70.176	73.313	2.121	
ATOM	803	C	TRP	104	69.946	73.569	3.638	
ATOM	804	O	TRP	104	69.291	72.786	4.322	
ATOM	805	CB	TRP	104	68.959	72.728	1.347	
ATOM	806	CG	TRP	104	69.183	72.839	-0.150	
ATOM	807	CD1	TRP	104	69.300	71.802	-1.018	
ATOM	808	CD2	TRP	104	69.446	74.039	-0.917	
ATOM	809	NE1	TRP	104	69.641	72.265	-2.256	50

ATOM	810	CE2	TRP	104	69.739	73.630	-2.223	
ATOM	811	CE3	TRP	104	69.463	75.406	-0.614	
ATOM	812	CZ2	TRP	104	70.060	74.535	-3.233	
ATOM	813	CZ3	TRP	104	69.768	76.295	-1.596	
ATOM	814	CH2	TRP	104	70.070	75.858	-2.901	
ATOM	815	N	THR	105	70.261	74.819	4.018	
ATOM	816	CA	THR	105	70.212	75.227	5.403	
ATOM	817	C	THR	105	69.130	76.321	5.728	
ATOM	818	O	THR	105	68.315	76.675	4.879	
ATOM	819	CB	THR	105	71.628	75.738	5.808	10
ATOM	820	OG1	THR	105	71.889	77.112	5.365	
ATOM	821	CG2	THR	105	72.783	74.809	5.285	
ATOM	822	N	MET	106	68.819	76.339	7.027	
ATOM	823	CA	MET	106	67.928	77.277	7.701	
ATOM	824	C	MET	106	68.658	78.425	8.504	
ATOM	825	O	MET	106	67.948	79.148	9.201	
ATOM	826	CB	MET	106	67.011	76.479	8.647	
ATOM	827	CG	MET	106	65.515	76.616	8.454	
ATOM	828	SD	MET	106	65.120	77.427	6.795	
ATOM	829	CE	MET	106	65.073	79.261	7.329	20
ATOM	830	N	GLY	107	69.892	78.813	8.198	
ATOM	831	CA	GLY	107	70.670	79.778	8.937	
ATOM	832	C	GLY	107	72.015	80.032	8.235	
ATOM	833	O	GLY	107	72.043	80.248	7.014	
ATOM	834	N	THR	108	72.879	80.623	9.032	
ATOM	835	CA	THR	108	74.213	81.085	8.621	
ATOM	836	C	THR	108	74.841	80.247	7.558	
ATOM	837	O	THR	108	75.497	80.802	6.657	
ATOM	838	CB	THR	108	75.202	81.044	9.853	
ATOM	839	OG1	THR	108	76.602	80.731	9.627	30
ATOM	840	CG2	THR	108	74.682	80.480	11.190	
ATOM	841	N	ASN	109	74.925	78.969	7.900	
ATOM	842	CA	ASN	109	75.546	77.975	7.132	
ATOM	843	C	ASN	109	75.398	78.135	5.649	
ATOM	844	O	ASN	109	74.319	78.503	5.168	
ATOM	845	CB	ASN	109	74.902	76.662	7.571	
ATOM	846	CG	ASN	109	74.447	76.325	8.956	
ATOM	847	OD1	ASN	109	75.087	75.635	9.807	
ATOM	848	ND2	ASN	109	73.249	76.778	9.294	
ATOM	849	N	GLY	110	76.362	77.499	4.975	40
ATOM	850	CA	GLY	110	76.409	77.653	3.571	
ATOM	851	C	GLY	110	75.036	77.150	3.051	
ATOM	852	O	GLY	110	74.725	75.967	3.277	
ATOM	853	N	PHE	111	74.646	77.814	1.967	
ATOM	854	CA	PHE	111	73.447	77.582	1.192	
ATOM	855	C	PHE	111	72.093	77.820	1.969	
ATOM	856	O	PHE	111	71.318	76.859	2.030	
ATOM	857	CB	PHE	111	73.661	76.113	0.759	
ATOM	858	CG	PHE	111	74.906	75.817	-0.085	
ATOM	859	CD1	PHE	111	75.627	76.876	-0.651	50

ATOM	860	CD2	PHE	111	75.464	74.542	-0.185	
ATOM	861	CE1	PHE	111	76.847	76.716	-1.300	
ATOM	862	CE2	PHE	111	76.680	74.346	-0.837	
ATOM	863	CZ	PHE	111	77.376	75.431	-1.367	
ATOM	864	N	ASN	112	71.888	78.948	2.665	
ATOM	865	CA	ASN	112	70.578	79.144	3.279	
ATOM	866	C	ASN	112	69.517	79.032	2.165	
ATOM	867	O	ASN	112	69.572	79.828	1.200	
ATOM	868	CB	ASN	112	70.547	80.550	3.832	
ATOM	869	CG	ASN	112	69.308	80.945	4.562	10
ATOM	870	OD1	ASN	112	68.317	81.175	3.925	
ATOM	871	ND2	ASN	112	69.341	81.052	5.873	
ATOM	872	N	LEU	113	68.532	78.143	2.327	
ATOM	873	CA	LEU	113	67.527	77.946	1.270	
ATOM	874	C	LEU	113	66.755	79.281	1.019	
ATOM	875	O	LEU	113	66.602	79.590	-0.158	
ATOM	876	CB	LEU	113	66.622	76.713	1.538	
ATOM	877	CG	LEU	113	65.321	76.686	0.669	
ATOM	878	CD1	LEU	113	65.628	76.618	-0.792	
ATOM	879	CD2	LEU	113	64.529	75.504	1.065	20
ATOM	880	N	PHE	114	66.125	79.936	2.036	
ATOM	881	CA	PHE	114	65.441	81.252	1.892	
ATOM	882	C	PHE	114	66.249	82.281	1.032	
ATOM	883	O	PHE	114	65.631	82.914	0.185	
ATOM	884	CB	PHE	114	64.958	81.770	3.284	
ATOM	885	CG	PHE	114	64.147	83.054	3.182	
ATOM	886	CD1	PHE	114	63.317	83.271	2.075	
ATOM	887	CD2	PHE	114	64.147	83.957	4.259	
ATOM	888	CE1	PHE	114	62.490	84.401	2.042	
ATOM	889	CE2	PHE	114	63.320	85.088	4.224	30
ATOM	890	CZ	PHE	114	62.504	85.301	3.110	
ATOM	891	N	THR	115	67.517	82.578	1.399	
ATOM	892	CA	THR	115	68.365	83.471	0.616	
ATOM	893	C	THR	115	68.240	83.153	-0.906	
ATOM	894	O	THR	115	68.118	84.112	-1.665	
ATOM	895	CB	THR	115	69.836	83.602	1.155	
ATOM	896	OG1	THR	115	70.834	82.860	0.378	
ATOM	897	CG2	THR	115	70.054	83.053	2.593	
ATOM	898	N	VAL	116	68.556	81.924	-1.338	
ATOM	899	CA	VAL	116	68.454	81.476	-2.718	40
ATOM	900	C	VAL	116	67.007	81.602	-3.304	
ATOM	901	O	VAL	116	66.934	81.957	-4.475	
ATOM	902	CB	VAL	116	68.988	80.023	-2.851	
ATOM	903	CG1	VAL	116	69.206	79.559	-4.318	
ATOM	904	CG2	VAL	116	70.280	79.845	-2.069	
ATOM	905	N	ALA	117	65.970	80.958	-2.719	
ATOM	906	CA	ALA	117	64.569	81.110	-3.155	
ATOM	907	C	ALA	117	64.238	82.605	-3.510	
ATOM	908	O	ALA	117	63.768	82.799	-4.644	
ATOM	909	CB	ALA	117	63.651	80.529	-2.064	50

ATOM	910	N	ALA	118	64.548	83.609	-2.674	
ATOM	911	CA	ALA	118	64.366	85.030	-2.979	
ATOM	912	C	ALA	118	65.108	85.435	-4.307	
ATOM	913	O	ALA	118	64.493	86.137	-5.119	
ATOM	914	CB	ALA	118	64.851	85.832	-1.763	
ATOM	915	N	HIS	119	66.409	85.110	-4.507	
ATOM	916	CA	HIS	119	67.147	85.409	-5.760	
ATOM	917	C	HIS	119	66.464	84.836	-7.075	
ATOM	918	O	HIS	119	66.051	85.681	-7.889	
ATOM	919	CB	HIS	119	68.593	84.858	-5.655	10
ATOM	920	CG	HIS	119	69.436	85.287	-6.861	
ATOM	921	ND1	HIS	119	70.392	86.274	-6.757	
ATOM	922	CD2	HIS	119	69.447	84.897	-8.160	
ATOM	923	CE1	HIS	119	70.952	86.474	-7.933	
ATOM	924	NE2	HIS	119	70.390	85.655	-8.815	
ATOM	925	N	GLU	120	66.263	83.499	-7.249	
ATOM	926	CA	GLU	120	65.629	82.897	-8.413	
ATOM	927	C	GLU	120	64.197	83.425	-8.676	
ATOM	928	O	GLU	120	63.841	83.529	-9.855	
ATOM	929	CB	GLU	120	65.557	81.396	-8.162	20
ATOM	930	CG	GLU	120	66.787	80.676	-7.732	
ATOM	931	CD	GLU	120	68.052	81.146	-8.425	
ATOM	932	OE1	GLU	120	68.101	81.261	-9.670	
ATOM	933	OE2	GLU	120	69.025	81.392	-7.705	
ATOM	934	N	PHE	121	63.319	83.494	-7.664	
ATOM	935	CA	PHE	121	61.997	84.065	-7.788	
ATOM	936	C	PHE	121	62.018	85.500	-8.403	
ATOM	937	O	PHE	121	61.036	85.813	-9.092	
ATOM	938	CB	PHE	121	61.301	84.125	-6.430	
ATOM	939	CG	PHE	121	60.974	82.912	-5.641	30
ATOM	940	CD1	PHE	121	60.828	82.988	-4.310	
ATOM	941	CD2	PHE	121	60.816	81.768	-6.426	
ATOM	942	CE1	PHE	121	60.557	81.747	-3.571	
ATOM	943	CE2	PHE	121	60.498	80.571	-5.709	
ATOM	944	CZ	PHE	121	60.409	80.626	-4.342	
ATOM	945	N	GLY	122	63.007	86.372	-8.100	
ATOM	946	CA	GLY	122	63.094	87.682	-8.749	
ATOM	947	C	GLY	122	63.089	87.619	-10.307	
ATOM	948	O	GLY	122	62.095	88.053	-10.883	
ATOM	949	N	HIS	123	64.032	86.893	-10.916	40
ATOM	950	CA	HIS	123	64.116	86.652	-12.359	
ATOM	951	C	HIS	123	62.870	85.929	-12.947	
ATOM	952	O	HIS	123	62.631	86.086	-14.148	
ATOM	953	CB	HIS	123	65.354	85.786	-12.627	
ATOM	954	CG	HIS	123	66.581	86.177	-11.898	
ATOM	955	ND1	HIS	123	67.713	86.642	-12.534	
ATOM	956	CD2	HIS	123	66.889	86.119	-10.581	
ATOM	957	CE1	HIS	123	68.669	86.840	-11.645	
ATOM	958	NE2	HIS	123	68.193	86.529	-10.454	
ATOM	959	N	ALA	124	62.312	84.932	-12.255	50

ATOM	960	CA	ALA	124	61.079	84.205	-12.632	
ATOM	961	C	ALA	124	59.853	85.157	-12.952	
ATOM	962	O	ALA	124	58.857	84.653	-13.571	
ATOM	963	CB	ALA	124	60.773	83.211	-11.498	
ATOM	964	N	LEU	125	59.701	86.264	-12.190	
ATOM	965	CA	LEU	125	58.712	87.321	-12.368	
ATOM	966	C	LEU	125	59.195	88.389	-13.397	
ATOM	967	O	LEU	125	58.507	89.397	-13.576	
ATOM	968	CB	LEU	125	58.420	87.998	-11.019	
ATOM	969	CG	LEU	125	58.211	87.127	-9.809	10
ATOM	970	CD1	LEU	125	58.076	88.032	-8.602	
ATOM	971	CD2	LEU	125	56.995	86.209	-9.951	
ATOM	972	N	GLY	126	60.307	88.170	-14.138	
ATOM	973	CA	GLY	126	60.935	89.084	-15.134	
ATOM	974	C	GLY	126	62.183	89.898	-14.620	
ATOM	975	O	GLY	126	62.476	90.890	-15.261	
ATOM	976	N	LEU	127	62.836	89.543	-13.512	
ATOM	977	CA	LEU	127	63.960	90.319	-13.032	
ATOM	978	C	LEU	127	65.384	89.723	-13.285	
ATOM	979	O	LEU	127	65.849	88.826	-12.586	20
ATOM	980	CB	LEU	127	63.749	90.617	-11.536	
ATOM	981	CG	LEU	127	62.743	91.594	-10.953	
ATOM	982	CD1	LEU	127	62.701	91.351	-9.487	
ATOM	983	CD2	LEU	127	63.092	93.052	-11.202	
ATOM	984	N	ALA	128	66.179	90.592	-13.886	
ATOM	985	CA	ALA	128	67.580	90.403	-14.211	
ATOM	986	C	ALA	128	68.521	90.925	-13.059	
ATOM	987	O	ALA	128	68.290	92.006	-12.493	
ATOM	988	CB	ALA	128	67.850	91.106	-15.555	
ATOM	989	N	HIS	129	69.721	90.350	-13.091	30
ATOM	990	CA	HIS	129	70.807	90.591	-12.173	
ATOM	991	C	HIS	129	71.074	92.099	-12.003	
ATOM	992	O	HIS	129	71.371	92.814	-12.970	
ATOM	993	CB	HIS	129	72.080	89.969	-12.784	
ATOM	994	CG	HIS	129	71.957	88.464	-12.901	
ATOM	995	ND1	HIS	129	72.440	87.732	-13.964	
ATOM	996	CD2	HIS	129	71.328	87.575	-12.112	
ATOM	997	CE1	HIS	129	72.111	86.477	-13.828	
ATOM	998	NE2	HIS	129	71.417	86.355	-12.710	
ATOM	999	N	SER	130	71.159	92.462	-10.771	40
ATOM	1000	CA	SER	130	71.464	93.773	-10.303	
ATOM	1001	C	SER	130	72.961	93.996	-10.046	
ATOM	1002	O	SER	130	73.630	93.192	-9.369	
ATOM	1003	CB	SER	130	70.747	93.940	-8.956	
ATOM	1004	OG	SER	130	70.954	95.204	-8.302	
ATOM	1005	N	THR	131	73.445	95.135	-10.567	
ATOM	1006	CA	THR	131	74.833	95.522	-10.301	
ATOM	1007	C	THR	131	75.088	96.131	-8.863	
ATOM	1008	O	THR	131	76.288	96.188	-8.508	
ATOM	1009	CB	THR	131	75.314	96.550	-11.357	50

ATOM 1010	OG1	THR	131	74.819	97.882	-11.155	
ATOM 1011	CG2	THR	131	74.965	96.238	-12.848	
ATOM 1012	N	ASP	132	74.080	96.383	-8.019	
ATOM 1013	CA	ASP	132	74.400	96.890	-6.690	
ATOM 1014	C	ASP	132	74.499	95.674	-5.734	
ATOM 1015	O	ASP	132	73.460	94.983	-5.625	
ATOM 1016	CB	ASP	132	73.374	97.942	-6.266	
ATOM 1017	CG	ASP	132	73.754	98.715	-5.002	
ATOM 1018	OD1	ASP	132	74.455	98.188	-4.129	
ATOM 1019	OD2	ASP	132	73.329	99.879	-4.872	10
ATOM 1020	N	PRO	133	75.716	95.184	-5.348	
ATOM 1021	CA	PRO	133	75.741	94.018	-4.564	
ATOM 1022	C	PRO	133	74.844	94.061	-3.290	
ATOM 1023	O	PRO	133	74.678	92.972	-2.714	
ATOM 1024	CB	PRO	133	77.170	93.573	-4.174	
ATOM 1025	CG	PRO	133	77.968	94.697	-4.880	
ATOM 1026	CD	PRO	133	77.060	95.844	-5.294	
ATOM 1027	N	SER	134	74.216	95.179	-2.861	
ATOM 1028	CA	SER	134	73.410	95.056	-1.611	
ATOM 1029	C	SER	134	71.946	94.552	-1.837	20
ATOM 1030	O	SER	134	71.379	94.103	-0.835	
ATOM 1031	CB	SER	134	73.571	96.191	-0.654	
ATOM 1032	OG	SER	134	72.880	96.224	0.540	
ATOM 1033	N	ALA	135	71.604	94.134	-3.041	
ATOM 1034	CA	ALA	135	70.356	93.569	-3.425	
ATOM 1035	C	ALA	135	70.496	92.061	-3.620	
ATOM 1036	O	ALA	135	71.571	91.524	-3.948	
ATOM 1037	CB	ALA	135	69.906	94.280	-4.704	
ATOM 1038	N	LEU	136	69.428	91.388	-3.235	
ATOM 1039	CA	LEU	136	69.340	89.926	-3.446	30
ATOM 1040	C	LEU	136	69.434	89.575	-4.973	
ATOM 1041	O	LEU	136	69.803	88.435	-5.252	
ATOM 1042	CB	LEU	136	68.103	89.330	-2.777	
ATOM 1043	CG	LEU	136	67.712	89.566	-1.340	
ATOM 1044	CD1	LEU	136	66.617	88.619	-0.962	
ATOM 1045	CD2	LEU	136	68.878	89.417	-0.400	
ATOM 1046	N	MET	137	69.001	90.469	-5.916	
ATOM 1047	CA	MET	137	69.134	90.292	-7.313	
ATOM 1048	C	MET	137	70.620	90.268	-7.816	
ATOM 1049	O	MET	137	70.814	89.791	-8.941	40
ATOM 1050	CB	MET	137	68.314	91.390	-8.017	
ATOM 1051	CG	MET	137	66.785	91.257	-7.843	
ATOM 1052	SD	MET	137	66.073	89.822	-8.528	
ATOM 1053	CE	MET	137	66.855	89.854	-10.062	
ATOM 1054	N	TYR	138	71.650	90.502	-6.975	
ATOM 1055	CA	TYR	138	73.049	90.420	-7.480	
ATOM 1056	C	TYR	138	73.384	88.911	-7.669	
ATOM 1057	O	TYR	138	73.241	88.164	-6.677	
ATOM 1058	CB	TYR	138	73.930	91.075	-6.422	
ATOM 1059	CG	TYR	138	75.322	91.302	-6.882	50

ATOM	1060	CD1	TYR	138	75.606	92.387	-7.721	
ATOM	1061	CD2	TYR	138	76.385	90.541	-6.388	
ATOM	1062	CE1	TYR	138	76.907	92.723	-8.036	
ATOM	1063	CE2	TYR	138	77.694	90.866	-6.705	
ATOM	1064	CZ	TYR	138	77.934	91.965	-7.519	
ATOM	1065	OH	TYR	138	79.214	92.343	-7.751	
ATOM	1066	N	PRO	139	73.829	88.430	-8.869	
ATOM	1067	CA	PRO	139	74.020	87.035	-9.012	
ATOM	1068	C	PRO	139	74.845	86.306	-7.985	
ATOM	1069	O	PRO	139	74.455	85.175	-7.690	10
ATOM	1070	CB	PRO	139	74.526	86.648	-10.422	
ATOM	1071	CG	PRO	139	74.857	88.050	-10.999	
ATOM	1072	CD	PRO	139	74.789	89.087	-9.870	
ATOM	1073	N	THR	140	75.893	86.820	-7.324	
ATOM	1074	CA	THR	140	76.643	85.913	-6.402	
ATOM	1075	C	THR	140	75.877	85.634	-5.055	
ATOM	1076	O	THR	140	75.102	86.480	-4.576	
ATOM	1077	CB	THR	140	78.076	86.496	-6.151	
ATOM	1078	OG1	THR	140	78.071	87.887	-5.829	
ATOM	1079	CG2	THR	140	79.018	86.369	-7.356	20
ATOM	1080	N	TYR	141	76.241	84.528	-4.370	
ATOM	1081	CA	TYR	141	75.733	84.129	-3.053	
ATOM	1082	C	TYR	141	76.468	84.790	-1.867	
ATOM	1083	O	TYR	141	77.693	84.666	-1.736	
ATOM	1084	CB	TYR	141	75.836	82.630	-2.921	
ATOM	1085	CG	TYR	141	75.235	82.016	-1.734	
ATOM	1086	CD1	TYR	141	73.812	81.803	-1.590	
ATOM	1087	CD2	TYR	141	76.159	81.774	-0.668	
ATOM	1088	CE1	TYR	141	73.316	81.340	-0.376	
ATOM	1089	CE2	TYR	141	75.640	81.346	0.558	30
ATOM	1090	CZ	TYR	141	74.268	81.123	0.663	
ATOM	1091	OH	TYR	141	73.895	80.655	1.886	
ATOM	1092	N	LYS	142	75.751	85.741	-1.287	
ATOM	1093	CA	LYS	142	76.193	86.453	-0.153	
ATOM	1094	C	LYS	142	74.925	86.715	0.753	
ATOM	1095	O	LYS	142	74.210	87.696	0.498	
ATOM	1096	CB	LYS	142	76.815	87.699	-0.791	
ATOM	1097	CG	LYS	142	77.676	88.719	-0.026	
ATOM	1098	CD	LYS	142	79.103	88.460	-0.319	
ATOM	1099	CE	LYS	142	80.179	89.041	0.411	40
ATOM	1100	NZ	LYS	142	81.404	88.778	-0.579	
ATOM	1101	N	TYR	143	74.861	86.093	1.925	
ATOM	1102	CA	TYR	143	73.774	86.311	2.964	
ATOM	1103	C	TYR	143	74.556	86.952	4.158	
ATOM	1104	O	TYR	143	75.793	86.683	4.280	
ATOM	1105	CB	TYR	143	73.167	84.883	3.106	
ATOM	1106	CG	TYR	143	72.071	84.983	4.275	
ATOM	1107	CD1	TYR	143	70.785	85.327	3.853	
ATOM	1108	CD2	TYR	143	72.244	84.614	5.619	
ATOM	1109	CE1	TYR	143	69.722	85.338	4.759	50

ATOM 1110	CE2	TYR	143	71.181	84.576	6.538	
ATOM 1111	CZ	TYR	143	69.908	84.947	6.086	
ATOM 1112	OH	TYR	143	68.802	84.963	6.885	
ATOM 1113	N	LYS	144	74.053	88.020	4.840	
ATOM 1114	CA	LYS	144	74.938	88.675	5.857	
ATOM 1115	C	LYS	144	75.038	87.743	7.047	
ATOM 1116	O	LYS	144	74.926	88.282	8.154	
ATOM 1117	CB	LYS	144	74.512	90.038	6.250	
ATOM 1118	CG	LYS	144	74.712	91.208	5.393	
ATOM 1119	CD	LYS	144	73.485	92.130	5.285	10
ATOM 1120	CE	LYS	144	73.819	93.608	5.501	
ATOM 1121	NZ	LYS	144	75.202	93.826	5.946	
ATOM 1122	N	ASN	145	76.019	86.826	6.885	
ATOM 1123	CA	ASN	145	76.244	85.687	7.759	
ATOM 1124	C	ASN	145	74.870	85.007	7.719	
ATOM 1125	O	ASN	145	74.693	84.386	6.645	
ATOM 1126	CB	ASN	145	76.772	86.043	9.142	
ATOM 1127	CG	ASN	145	78.260	86.321	9.123	
ATOM 1128	OD1	ASN	145	78.711	87.407	9.516	
ATOM 1129	ND2	ASN	145	79.072	85.362	8.684	20
ATOM 1130	N	PRO	146	74.255	84.513	8.815	
ATOM 1131	CA	PRO	146	72.878	84.127	8.566	
ATOM 1132	C	PRO	146	72.169	85.452	8.783	
ATOM 1133	O	PRO	146	71.007	85.393	9.232	
ATOM 1134	CB	PRO	146	72.462	83.318	9.815	
ATOM 1135	CG	PRO	146	73.595	83.439	10.830	
ATOM 1136	CD	PRO	146	74.839	83.767	10.031	
ATOM 1137	N	TYR	147	72.633	86.581	8.259	
ATOM 1138	CA	TYR	147	72.003	87.862	8.711	
ATOM 1139	C	TYR	147	70.451	87.880	8.705	30
ATOM 1140	O	TYR	147	69.835	87.939	9.781	
ATOM 1141	CB	TYR	147	72.452	89.086	7.943	
ATOM 1142	CG	TYR	147	71.854	90.428	8.335	
ATOM 1143	CD1	TYR	147	70.615	90.812	7.837	
ATOM 1144	CD2	TYR	147	72.376	91.187	9.389	
ATOM 1145	CE1	TYR	147	69.980	91.983	8.315	
ATOM 1146	CE2	TYR	147	71.768	92.338	9.877	
ATOM 1147	CZ	TYR	147	70.560	92.720	9.322	
ATOM 1148	OH	TYR	147	70.041	93.885	9.735	
ATOM 1149	N	GLY	148	69.872	87.752	7.511	40
ATOM 1150	CA	GLY	148	68.489	87.829	7.236	
ATOM 1151	C	GLY	148	68.322	87.938	5.693	
ATOM 1152	O	GLY	148	69.275	88.171	4.919	
ATOM 1153	N	PHE	149	67.094	88.060	5.341	
ATOM 1154	CA	PHE	149	66.764	88.091	3.943	
ATOM 1155	C	PHE	149	65.866	89.342	3.860	
ATOM 1156	O	PHE	149	64.650	89.238	4.139	
ATOM 1157	CB	PHE	149	65.895	86.807	3.827	
ATOM 1158	CG	PHE	149	66.245	85.545	4.664	
ATOM 1159	CD1	PHE	149	65.753	85.506	5.980	50

ATOM	1160	CD2	PHE	149	67.006	84.451	4.196	
ATOM	1161	CE1	PHE	149	65.995	84.393	6.802	
ATOM	1162	CE2	PHE	149	67.243	83.332	5.021	
ATOM	1163	CZ	PHE	149	66.729	83.304	6.319	
ATOM	1164	N	HIS	150	66.391	90.451	3.446	
ATOM	1165	CA	HIS	150	65.585	91.599	3.479	
ATOM	1166	C	HIS	150	65.941	92.480	2.164	
ATOM	1167	O	HIS	150	67.040	93.058	2.122	
ATOM	1168	CB	HIS	150	65.798	92.211	4.967	
ATOM	1169	CG	HIS	150	66.218	91.676	6.440	10
ATOM	1170	ND1	HIS	150	65.968	90.495	7.185	
ATOM	1171	CD2	HIS	150	67.064	92.467	7.188	
ATOM	1172	CE1	HIS	150	66.651	90.586	8.346	
ATOM	1173	NE2	HIS	150	67.326	91.762	8.378	
ATOM	1174	N	LEU	151	64.962	92.700	1.234	
ATOM	1175	CA	LEU	151	65.163	93.426	-0.061	
ATOM	1176	C	LEU	151	65.363	94.910	0.075	
ATOM	1177	O	LEU	151	64.679	95.516	0.889	
ATOM	1178	CB	LEU	151	63.934	93.181	-0.932	
ATOM	1179	CG	LEU	151	63.335	91.932	-1.515	20
ATOM	1180	CD1	LEU	151	62.399	92.344	-2.646	
ATOM	1181	CD2	LEU	151	64.398	91.009	-2.062	
ATOM	1182	N	PRO	152	66.567	95.406	-0.328	
ATOM	1183	CA	PRO	152	66.770	96.791	-0.309	
ATOM	1184	C	PRO	152	66.026	97.386	-1.516	
ATOM	1185	O	PRO	152	65.142	96.745	-2.081	
ATOM	1186	CB	PRO	152	68.298	97.116	-0.447	
ATOM	1187	CG	PRO	152	68.912	95.747	-0.594	
ATOM	1188	CD	PRO	152	67.835	94.691	-0.721	
ATOM	1189	N	LYS	153	66.158	98.674	-1.595	30
ATOM	1190	CA	LYS	153	65.521	99.541	-2.533	
ATOM	1191	C	LYS	153	65.628	99.015	-4.019	
ATOM	1192	O	LYS	153	64.597	99.100	-4.685	
ATOM	1193	CB	LYS	153	66.044	100.982	-2.397	
ATOM	1194	CG	LYS	153	65.233	102.028	-3.156	
ATOM	1195	CD	LYS	153	63.787	102.214	-2.758	
ATOM	1196	CE	LYS	153	62.980	102.584	-4.010	
ATOM	1197	NZ	LYS	153	61.592	102.991	-3.662	
ATOM	1198	N	ASP	154	66.803	98.694	-4.560	
ATOM	1199	CA	ASP	154	66.924	98.290	-5.939	40
ATOM	1200	C	ASP	154	65.945	97.087	-6.210	
ATOM	1201	O	ASP	154	65.359	97.101	-7.306	
ATOM	1202	CB	ASP	154	68.381	97.975	-6.303	
ATOM	1203	CG	ASP	154	68.586	97.904	-7.848	
ATOM	1204	OD1	ASP	154	68.380	98.930	-8.548	
ATOM	1205	OD2	ASP	154	68.932	96.835	-8.374	
ATOM	1206	N	ASP	155	65.993	95.954	-5.464	
ATOM	1207	CA	ASP	155	65.006	94.862	-5.685	
ATOM	1208	C	ASP	155	63.557	95.431	-5.896	
ATOM	1209	O	ASP	155	62.894	94.961	-6.833	50

ATOM	1210	CB	ASP	155	65.002	93.835	-4.549	
ATOM	1211	CG	ASP	155	66.358	93.285	-4.236	
ATOM	1212	OD1	ASP	155	67.006	92.756	-5.167	
ATOM	1213	OD2	ASP	155	66.767	93.362	-3.060	
ATOM	1214	N	VAL	156	63.067	96.345	-5.048	
ATOM	1215	CA	VAL	156	61.708	96.942	-5.077	
ATOM	1216	C	VAL	156	61.423	97.745	-6.417	
ATOM	1217	O	VAL	156	60.530	97.293	-7.130	
ATOM	1218	CB	VAL	156	61.618	97.780	-3.804	
ATOM	1219	CG1	VAL	156	60.224	98.451	-3.691	10
ATOM	1220	CG2	VAL	156	61.665	96.931	-2.493	
ATOM	1221	N	LYS	157	62.200	98.791	-6.791	
ATOM	1222	CA	LYS	157	62.030	99.505	-8.085	
ATOM	1223	C	LYS	157	61.943	98.613	-9.280	
ATOM	1224	O	LYS	157	61.368	99.080	-10.259	
ATOM	1225	CB	LYS	157	63.218	100.420	-8.306	
ATOM	1226	CG	LYS	157	63.473	101.711	-7.619	
ATOM	1227	CD	LYS	157	64.036	102.746	-8.486	
ATOM	1228	CE	LYS	157	64.277	104.106	-7.844	
ATOM	1229	NZ	LYS	157	64.898	103.878	-6.490	20
ATOM	1230	N	GLY	158	62.847	97.620	-9.481	
ATOM	1231	CA	GLY	158	62.803	96.628	-10.559	
ATOM	1232	C	GLY	158	61.471	95.871	-10.661	
ATOM	1233	O	GLY	158	60.946	95.826	-11.787	
ATOM	1234	N	ILE	159	60.999	95.126	-9.613	
ATOM	1235	CA	ILE	159	59.662	94.481	-9.672	
ATOM	1236	C	ILE	159	58.545	95.548	-9.901	
ATOM	1237	O	ILE	159	57.577	95.172	-10.583	
ATOM	1238	CB	ILE	159	59.468	93.545	-8.464	
ATOM	1239	CG1	ILE	159	58.352	92.554	-8.634	30
ATOM	1240	CG2	ILE	159	59.056	94.378	-7.230	
ATOM	1241	CD1	ILE	159	58.826	91.348	-9.477	
ATOM	1242	N	GLN	160	58.453	96.624	-9.098	
ATOM	1243	CA	GLN	160	57.528	97.722	-9.278	
ATOM	1244	C	GLN	160	57.578	98.282	-10.710	
ATOM	1245	O	GLN	160	56.690	99.084	-10.996	
ATOM	1246	CB	GLN	160	57.925	98.811	-8.265	
ATOM	1247	CG	GLN	160	57.762	98.385	-6.808	
ATOM	1248	CD	GLN	160	57.889	99.540	-5.848	
ATOM	1249	OE1	GLN	160	58.178	100.666	-6.253	40
ATOM	1250	NE2	GLN	160	57.669	99.277	-4.572	
ATOM	1251	N	ALA	161	58.771	98.417	-11.319	
ATOM	1252	CA	ALA	161	58.814	98.851	-12.719	
ATOM	1253	C	ALA	161	57.901	97.905	-13.566	
ATOM	1254	O	ALA	161	57.205	98.421	-14.454	
ATOM	1255	CB	ALA	161	60.271	98.927	-13.217	
ATOM	1256	N	LEU	162	58.027	96.557	-13.441	
ATOM	1257	CA	LEU	162	57.206	95.557	-14.134	
ATOM	1258	C	LEU	162	55.664	95.642	-13.809	
ATOM	1259	O	LEU	162	54.916	95.976	-14.734	50

ATOM 1260	CB	LEU	162	57.777	94.157	-13.824	
ATOM 1261	CG	LEU	162	59.267	94.102	-14.237	
ATOM 1262	CD1	LEU	162	59.901	92.771	-13.799	
ATOM 1263	CD2	LEU	162	59.380	94.287	-15.764	
ATOM 1264	N	TYR	163	55.202	95.404	-12.588	
ATOM 1265	CA	TYR	163	53.788	95.456	-12.201	
ATOM 1266	C	TYR	163	53.364	96.881	-11.686	
ATOM 1267	O	TYR	163	52.176	97.154	-11.693	
ATOM 1268	CB	TYR	163	53.559	94.398	-11.129	
ATOM 1269	CG	TYR	163	53.848	93.023	-11.597	10
ATOM 1270	CD1	TYR	163	52.991	92.351	-12.472	
ATOM 1271	CD2	TYR	163	55.032	92.393	-11.218	
ATOM 1272	CE1	TYR	163	53.313	91.092	-12.960	
ATOM 1273	CE2	TYR	163	55.363	91.136	-11.699	
ATOM 1274	CZ	TYR	163	54.503	90.492	-12.568	
ATOM 1275	OH	TYR	163	54.802	89.252	-13.066	
ATOM 1276	N	GLY	164	54.272	97.585	-10.954	
ATOM 1277	CA	GLY	164	54.101	98.927	-10.413	
ATOM 1278	C	GLY	164	53.443	98.736	-9.054	
ATOM 1279	O	GLY	164	52.263	98.366	-9.048	20
ATOM 1280	N	PRO	165	54.055	99.226	-7.948	
ATOM 1281	CA	PRO	165	53.381	99.048	-6.703	
ATOM 1282	C	PRO	165	52.228	100.071	-6.516	
ATOM 1283	O	PRO	165	51.086	99.619	-6.624	
ATOM 1284	CB	PRO	165	54.411	99.334	-5.650	
ATOM 1285	CG	PRO	165	55.341	100.370	-6.289	
ATOM 1286	CD	PRO	165	55.189	100.200	-7.801	
ATOM 1287	N	ARG	166	52.554	101.355	-6.601	
ATOM 1288	CA	ARG	166	51.659	102.521	-6.372	
ATOM 1289	C	ARG	166	50.967	103.039	-7.650	30
ATOM 1290	O	ARG	166	50.253	104.023	-7.518	
ATOM 1291	CB	ARG	166	52.595	103.655	-5.901	
ATOM 1292	CG	ARG	166	53.292	103.279	-4.591	
ATOM 1293	CD	ARG	166	54.330	104.312	-4.087	
ATOM 1294	NE	ARG	166	55.360	104.565	-5.097	
ATOM 1295	CZ	ARG	166	56.375	105.395	-4.921	
ATOM 1296	NH1	ARG	166	56.534	106.066	-3.774	
ATOM 1297	NH2	ARG	166	57.154	105.529	-5.975	
ATOM 1298	N	LYS	167	51.006	102.330	-8.802	
ATOM 1299	CA	LYS	167	50.429	102.803	-10.009	40
ATOM 1300	C	LYS	167	50.814	104.317	-10.083	
ATOM 1301	O	LYS	167	51.951	104.562	-10.543	
ATOM 1302	CB	LYS	167	48.936	102.491	-10.003	
ATOM 1303	CG	LYS	167	48.168	102.682	-11.273	
ATOM 1304	CD	LYS	167	48.909	102.360	-12.555	
ATOM 1305	CE	LYS	167	48.070	101.991	-13.740	
ATOM 1306	NZ	LYS	167	47.269	103.105	-14.337	
ATOM 1307	N	VAL	168	49.867	105.284	-10.107	
ATOM 1308	CA	VAL	168	50.280	106.646	-10.022	
ATOM 1309	C	VAL	168	50.911	106.798	-8.598	50

ATOM 1310	O	VAL	168	50.153	106.633	-7.662	
ATOM 1311	CB	VAL	168	49.098	107.596	-10.285	
ATOM 1312	CG1	VAL	168	49.490	109.035	-9.958	
ATOM 1313	CG2	VAL	168	48.601	107.497	-11.714	
ATOM 1314	N	PHE	169	52.070	107.464	-8.477	
ATOM 1315	CA	PHE	169	52.804	107.598	-7.222	
ATOM 1316	C	PHE	169	51.777	107.996	-6.148	
ATOM 1317	O	PHE	169	51.073	109.013	-6.303	
ATOM 1318	CB	PHE	169	53.778	108.764	-7.436	
ATOM 1319	CG	PHE	169	54.471	109.287	-6.203	10
ATOM 1320	CD1	PHE	169	54.191	110.587	-5.799	
ATOM 1321	CD2	PHE	169	55.437	108.521	-5.562	
ATOM 1322	CE1	PHE	169	54.898	111.126	-4.746	
ATOM 1323	CE2	PHE	169	56.133	109.077	-4.511	
ATOM 1324	CZ	PHE	169	55.868	110.377	-4.105	
ATOM 1325	N	LEU	170	51.790	107.258	-5.036	
ATOM 1326	CA	LEU	170	50.847	107.374	-3.919	
ATOM 1327	C	LEU	170	49.480	106.622	-4.162	
ATOM 1328	O	LEU	170	49.117	105.820	-3.302	
ATOM 1329	CB	LEU	170	50.599	108.832	-3.490	20
ATOM 1330	CG	LEU	170	51.833	109.629	-3.108	
ATOM 1331	CD1	LEU	170	51.364	111.011	-2.684	
ATOM 1332	CD2	LEU	170	52.607	108.942	-1.975	
ATOM 1333	N	GLY	171	48.791	106.782	-5.306	
ATOM 1334	CA	GLY	171	47.455	106.217	-5.609	
ATOM 1335	C	GLY	171	47.236	104.730	-5.499	
ATOM 1336	O	GLY	171	46.379	104.373	-4.671	
ATOM 1337	N	LYS	172	47.804	103.864	-6.379	
ATOM 1338	CA	LYS	172	47.441	102.436	-6.255	
ATOM 1339	C	LYS	172	48.196	101.689	-5.166	30
ATOM 1340	O	LYS	172	49.378	101.458	-5.423	
ATOM 1341	CB	LYS	172	47.440	101.673	-7.585	
ATOM 1342	CG	LYS	172	47.211	100.133	-7.529	
ATOM 1343	CD	LYS	172	45.833	99.907	-7.006	
ATOM 1344	CE	LYS	172	44.660	98.836	-7.292	
ATOM 1345	NZ	LYS	172	44.095	98.565	-5.999	
ATOM 1346	N	PRO	173	47.708	101.368	-3.927	
ATOM 1347	CA	PRO	173	48.612	100.735	-3.004	
ATOM 1348	C	PRO	173	49.375	99.504	-3.652	
ATOM 1349	O	PRO	173	48.777	98.596	-4.246	40
ATOM 1350	CB	PRO	173	47.857	100.384	-1.713	
ATOM 1351	CG	PRO	173	46.348	100.549	-2.092	
ATOM 1352	CD	PRO	173	46.290	101.378	-3.375	
ATOM 1353	N	THR	174	50.548	99.377	-3.070	
ATOM 1354	CA	THR	174	51.542	98.363	-3.336	
ATOM 1355	C	THR	174	51.475	97.372	-2.169	
ATOM 1356	O	THR	174	52.072	97.663	-1.108	
ATOM 1357	CB	THR	174	52.986	98.997	-3.333	
ATOM 1358	OG1	THR	174	54.086	98.214	-2.787	
ATOM 1359	CG2	THR	174	53.138	100.492	-3.108	50

ATOM 1360	N	LEU	175	50.893	96.210	-2.322	
ATOM 1361	CA	LEU	175	50.711	95.257	-1.187	
ATOM 1362	C	LEU	175	50.331	96.068	0.122	
ATOM 1363	O	LEU	175	49.099	96.300	0.217	
ATOM 1364	CB	LEU	175	51.771	94.211	-1.076	
ATOM 1365	CG	LEU	175	51.780	92.878	-0.393	
ATOM 1366	CD1	LEU	175	51.062	92.851	0.939	
ATOM 1367	CD2	LEU	175	51.116	91.931	-1.370	
ATOM 1368	N	PRO	176	51.120	96.227	1.256	
ATOM 1369	CA	PRO	176	50.544	97.187	2.190	10
ATOM 1370	C	PRO	176	50.370	98.592	1.598	
ATOM 1371	O	PRO	176	51.333	99.216	1.129	
ATOM 1372	CB	PRO	176	51.285	97.224	3.537	
ATOM 1373	CG	PRO	176	51.870	95.774	3.575	
ATOM 1374	CD	PRO	176	52.045	95.319	2.116	
ATOM 1375	N	HIS	177	49.168	99.095	1.873	
ATOM 1376	CA	HIS	177	48.626	100.403	1.575	
ATOM 1377	C	HIS	177	49.592	101.575	1.867	
ATOM 1378	O	HIS	177	49.349	102.644	1.280	
ATOM 1379	CB	HIS	177	47.360	100.522	2.426	20
ATOM 1380	CG	HIS	177	46.134	99.795	1.960	
ATOM 1381	ND1	HIS	177	44.973	99.811	2.583	
ATOM 1382	CD2	HIS	177	46.019	98.981	0.843	
ATOM 1383	CE1	HIS	177	44.144	99.041	1.907	
ATOM 1384	NE2	HIS	177	44.788	98.556	0.872	
ATOM 1385	N	ALA	178	50.445	101.530	2.926	
ATOM 1386	CA	ALA	178	51.382	102.577	3.092	
ATOM 1387	C	ALA	178	52.603	102.020	2.346	
ATOM 1388	O	ALA	178	53.323	101.257	2.999	
ATOM 1389	CB	ALA	178	51.598	102.932	4.568	30
ATOM 1390	N	PRO	179	52.826	102.326	1.062	
ATOM 1391	CA	PRO	179	53.977	101.708	0.439	
ATOM 1392	C	PRO	179	55.209	101.686	1.260	
ATOM 1393	O	PRO	179	55.785	102.714	1.664	
ATOM 1394	CB	PRO	179	54.185	102.284	-0.984	
ATOM 1395	CG	PRO	179	53.417	103.634	-0.909	
ATOM 1396	CD	PRO	179	52.546	103.656	0.333	
ATOM 1397	N	HIS	180	55.830	100.526	0.996	
ATOM 1398	CA	HIS	180	57.056	100.079	1.510	
ATOM 1399	C	HIS	180	58.287	100.872	1.067	40
ATOM 1400	O	HIS	180	58.655	100.900	-0.130	
ATOM 1401	CB	HIS	180	57.320	98.584	1.308	
ATOM 1402	CG	HIS	180	56.169	97.743	1.782	
ATOM 1403	ND1	HIS	180	56.112	97.260	3.067	
ATOM 1404	CD2	HIS	180	55.026	97.362	1.142	
ATOM 1405	CE1	HIS	180	54.957	96.590	3.190	
ATOM 1406	NE2	HIS	180	54.279	96.654	2.060	
ATOM 1407	N	HIS	181	59.140	100.987	2.131	
ATOM 1408	CA	HIS	181	60.458	101.584	2.125	
ATOM 1409	C	HIS	181	61.526	100.516	2.454	50

ATOM 1410	O	HIS	181	61.422	99.848	3.520	
ATOM 1411	CB	HIS	181	60.508	102.750	3.103	
ATOM 1412	CG	HIS	181	59.972	104.099	2.659	
ATOM 1413	ND1	HIS	181	60.564	105.290	2.798	
ATOM 1414	CD2	HIS	181	58.772	104.303	2.008	
ATOM 1415	CE1	HIS	181	59.776	106.191	2.259	
ATOM 1416	NE2	HIS	181	58.710	105.587	1.789	
ATOM 1417	N	LYS	182	62.336	100.193	1.455	
ATOM 1418	CA	LYS	182	63.432	99.274	1.698	
ATOM 1419	C	LYS	182	64.842	99.820	1.489	10
ATOM 1420	O	LYS	182	64.996	100.631	0.580	
ATOM 1421	CB	LYS	182	63.234	97.908	1.103	
ATOM 1422	CG	LYS	182	61.903	97.218	1.276	
ATOM 1423	CD	LYS	182	61.756	96.056	0.310	
ATOM 1424	CE	LYS	182	60.375	95.454	0.582	
ATOM 1425	NZ	LYS	182	60.047	94.421	-0.389	
ATOM 1426	N	PRO	183	65.803	99.765	2.485	
ATOM 1427	CA	PRO	183	67.050	100.387	2.404	
ATOM 1428	C	PRO	183	67.700	100.347	1.026	
ATOM 1429	O	PRO	183	68.463	99.433	0.789	20
ATOM 1430	CB	PRO	183	67.901	99.999	3.570	
ATOM 1431	CG	PRO	183	67.424	98.507	3.671	
ATOM 1432	CD	PRO	183	65.941	98.637	3.534	
ATOM 1433	N	SER	184	68.161	101.512	0.758	
ATOM 1434	CA	SER	184	68.933	101.835	-0.450	
ATOM 1435	C	SER	184	70.451	101.705	-0.116	
ATOM 1436	O	SER	184	70.902	102.342	0.857	
ATOM 1437	CB	SER	184	68.631	103.254	-0.938	
ATOM 1438	OG	SER	184	68.497	103.423	-2.334	
ATOM 1439	N	ILE	185	71.245	101.008	-0.944	30
ATOM 1440	CA	ILE	185	72.698	100.891	-0.708	
ATOM 1441	C	ILE	185	73.294	102.325	-1.018	
ATOM 1442	O	ILE	185	73.118	102.760	-2.203	
ATOM 1443	CB	ILE	185	73.305	99.918	-1.775	
ATOM 1444	CG1	ILE	185	72.582	98.530	-1.629	
ATOM 1445	CG2	ILE	185	74.864	99.691	-1.588	
ATOM 1446	CD1	ILE	185	71.496	98.220	-2.678	
ATOM 1447	N	PRO	186	73.829	103.076	-0.007	
ATOM 1448	CA	PRO	186	74.276	104.397	-0.274	
ATOM 1449	C	PRO	186	75.185	104.464	-1.500	40
ATOM 1450	O	PRO	186	75.811	103.499	-1.945	
ATOM 1451	CB	PRO	186	74.848	105.058	1.031	
ATOM 1452	CG	PRO	186	74.278	104.090	2.114	
ATOM 1453	CD	PRO	186	74.172	102.709	1.415	
ATOM 1454	N	ASP	187	75.078	105.681	-2.055	
ATOM 1455	CA	ASP	187	75.756	106.152	-3.218	
ATOM 1456	C	ASP	187	76.963	107.011	-2.749	
ATOM 1457	O	ASP	187	76.845	108.108	-2.163	
ATOM 1458	CB	ASP	187	74.795	106.961	-4.093	
ATOM 1459	CG	ASP	187	73.787	106.107	-4.779	50

ATOM 1460	OD1	ASP	187	72.931	106.587	-5.560	
ATOM 1461	OD2	ASP	187	73.849	104.886	-4.449	
ATOM 1462	N	LEU	188	78.045	106.645	-3.335	
ATOM 1463	CA	LEU	188	79.387	107.182	-3.116	
ATOM 1464	C	LEU	188	79.467	108.737	-3.377	
ATOM 1465	O	LEU	188	79.153	109.453	-2.421	
ATOM 1466	CB	LEU	188	80.260	106.318	-4.007	
ATOM 1467	CG	LEU	188	81.733	106.678	-4.160	
ATOM 1468	CD1	LEU	188	82.466	106.436	-2.845	
ATOM 1469	CD2	LEU	188	82.299	105.803	-5.263	10
ATOM 1470	N	CYS	189	79.256	109.163	-4.646	
ATOM 1471	CA	CYS	189	79.201	110.558	-5.020	
ATOM 1472	C	CYS	189	77.887	111.289	-4.695	
ATOM 1473	O	CYS	189	77.908	112.521	-4.859	
ATOM 1474	CB	CYS	189	79.421	110.694	-6.533	
ATOM 1475	SG	CYS	189	81.063	110.087	-7.122	
ATOM 1476	N	ASP	190	76.763	110.619	-4.435	
ATOM 1477	CA	ASP	190	75.504	111.325	-4.230	
ATOM 1478	C	ASP	190	75.751	112.380	-3.156	
ATOM 1479	O	ASP	190	76.149	112.118	-2.041	20
ATOM 1480	CB	ASP	190	74.421	110.320	-3.810	
ATOM 1481	CG	ASP	190	73.170	111.050	-3.363	
ATOM 1482	OD1	ASP	190	72.893	112.132	-3.926	
ATOM 1483	OD2	ASP	190	72.450	110.508	-2.484	
ATOM 1484	N	SER	191	75.348	113.592	-3.565	
ATOM 1485	CA	SER	191	75.516	114.837	-2.818	
ATOM 1486	C	SER	191	74.727	114.889	-1.468	
ATOM 1487	O	SER	191	75.223	115.586	-0.572	
ATOM 1488	CB	SER	191	75.073	115.982	-3.738	
ATOM 1489	OG	SER	191	73.738	115.938	-4.200	30
ATOM 1490	N	SER	192	73.611	114.159	-1.276	
ATOM 1491	CA	SER	192	72.827	114.230	0.001	
ATOM 1492	C	SER	192	73.261	113.162	1.073	
ATOM 1493	O	SER	192	72.628	113.142	2.134	
ATOM 1494	CB	SER	192	71.371	113.913	-0.400	
ATOM 1495	OG	SER	192	70.579	115.033	-0.789	
ATOM 1496	N	SER	193	74.466	112.576	0.981	
ATOM 1497	CA	SER	193	74.991	111.545	1.833	
ATOM 1498	C	SER	193	75.493	112.090	3.156	
ATOM 1499	O	SER	193	76.449	112.878	3.191	40
ATOM 1500	CB	SER	193	76.140	110.850	1.067	
ATOM 1501	OG	SER	193	76.848	109.850	1.808	
ATOM 1502	N	SER	194	75.204	111.277	4.162	
ATOM 1503	CA	SER	194	75.572	111.502	5.536	
ATOM 1504	C	SER	194	75.857	110.159	6.219	
ATOM 1505	O	SER	194	74.923	109.402	6.531	
ATOM 1506	CB	SER	194	74.442	112.282	6.134	
ATOM 1507	OG	SER	194	74.528	112.756	7.427	
ATOM 1508	N	PHE	195	77.059	110.079	6.792	
ATOM 1509	CA	PHE	195	77.575	108.862	7.416	50

ATOM 1510	C	PHE	195	77.363	108.856	8.960	
ATOM 1511	O	PHE	195	77.653	109.834	9.660	
ATOM 1512	CB	PHE	195	79.082	108.730	7.104	
ATOM 1513	CG	PHE	195	79.337	108.565	5.613	
ATOM 1514	CD1	PHE	195	79.017	107.386	4.967	
ATOM 1515	CD2	PHE	195	79.760	109.633	4.844	
ATOM 1516	CE1	PHE	195	79.103	107.290	3.592	
ATOM 1517	CE2	PHE	195	79.842	109.530	3.467	
ATOM 1518	CZ	PHE	195	79.505	108.363	2.849	
ATOM 1519	N	ASP	196	76.997	107.681	9.462	10
ATOM 1520	CA	ASP	196	76.835	107.410	10.898	
ATOM 1521	C	ASP	196	78.209	107.521	11.656	
ATOM 1522	O	ASP	196	78.255	108.269	12.642	
ATOM 1523	CB	ASP	196	76.214	106.033	11.066	
ATOM 1524	CG	ASP	196	74.774	105.880	10.763	
ATOM 1525	OD1	ASP	196	74.149	106.812	10.227	
ATOM 1526	OD2	ASP	196	74.234	104.800	11.013	
ATOM 1527	N	ALA	197	79.245	106.719	11.302	
ATOM 1528	CA	ALA	197	80.572	106.683	11.910	
ATOM 1529	C	ALA	197	81.684	106.552	10.848	20
ATOM 1530	O	ALA	197	81.422	106.240	9.686	
ATOM 1531	CB	ALA	197	80.583	105.451	12.822	
ATOM 1532	N	VAL	198	82.807	107.178	11.165	
ATOM 1533	CA	VAL	198	84.013	107.113	10.374	
ATOM 1534	C	VAL	198	85.235	106.966	11.310	
ATOM 1535	O	VAL	198	85.363	107.676	12.323	
ATOM 1536	CB	VAL	198	84.139	108.417	9.542	
ATOM 1537	CG1	VAL	198	85.475	108.401	8.738	
ATOM 1538	CG2	VAL	198	82.895	108.625	8.645	
ATOM 1539	N	THR	199	86.137	106.044	10.978	30
ATOM 1540	CA	THR	199	87.390	105.833	11.675	
ATOM 1541	C	THR	199	88.571	105.591	10.708	
ATOM 1542	O	THR	199	88.506	104.670	9.900	
ATOM 1543	CB	THR	199	87.124	104.658	12.671	
ATOM 1544	OG1	THR	199	88.019	104.650	13.812	
ATOM 1545	CG2	THR	199	87.144	103.274	11.970	
ATOM 1546	N	MET	200	89.706	106.220	10.985	
ATOM 1547	CA	MET	200	90.919	105.983	10.198	
ATOM 1548	C	MET	200	91.405	104.537	10.588	
ATOM 1549	O	MET	200	91.606	104.300	11.803	40
ATOM 1550	CB	MET	200	92.078	106.927	10.525	
ATOM 1551	CG	MET	200	92.470	107.074	11.953	
ATOM 1552	SD	MET	200	93.993	108.024	12.060	
ATOM 1553	CE	MET	200	94.398	107.567	13.724	
ATOM 1554	N	LEU	201	91.421	103.539	9.696	
ATOM 1555	CA	LEU	201	91.983	102.265	10.096	
ATOM 1556	C	LEU	201	93.116	101.759	9.155	
ATOM 1557	O	LEU	201	92.809	100.948	8.265	
ATOM 1558	CB	LEU	201	90.859	101.205	10.243	
ATOM 1559	CG	LEU	201	91.155	99.711	10.578	50

ATOM 1560	CD1	LEU	201	92.253	99.554	11.627	
ATOM 1561	CD2	LEU	201	89.891	98.997	11.049	
ATOM 1562	N	GLY	202	94.346	101.752	9.700	
ATOM 1563	CA	GLY	202	95.532	101.202	8.992	
ATOM 1564	C	GLY	202	96.003	102.020	7.774	
ATOM 1565	O	GLY	202	96.356	101.357	6.792	
ATOM 1566	N	LYS	203	96.180	103.375	7.862	
ATOM 1567	CA	LYS	203	96.530	104.137	6.619	
ATOM 1568	C	LYS	203	95.451	103.828	5.520	
ATOM 1569	O	LYS	203	95.624	104.328	4.405	10
ATOM 1570	CB	LYS	203	97.956	103.796	6.149	
ATOM 1571	CG	LYS	203	98.954	104.126	7.259	
ATOM 1572	CD	LYS	203	100.386	104.451	6.770	
ATOM 1573	CE	LYS	203	101.369	104.642	7.919	
ATOM 1574	NZ	LYS	203	101.354	105.995	8.440	
ATOM 1575	N	GLU	204	94.271	103.853	6.033	
ATOM 1576	CA	GLU	204	93.014	103.556	5.492	
ATOM 1577	C	GLU	204	92.022	104.314	6.475	
ATOM 1578	O	GLU	204	92.417	104.840	7.568	
ATOM 1579	CB	GLU	204	92.914	102.082	5.738	20
ATOM 1580	CG	GLU	204	93.808	101.225	4.845	
ATOM 1581	CD	GLU	204	93.431	99.746	4.640	
ATOM 1582	OE1	GLU	204	92.540	99.215	5.311	
ATOM 1583	OE2	GLU	204	94.023	99.112	3.765	
ATOM 1584	N	LEU	205	90.779	104.565	6.077	
ATOM 1585	CA	LEU	205	89.673	105.202	6.800	
ATOM 1586	C	LEU	205	88.363	104.420	6.382	
ATOM 1587	O	LEU	205	87.953	104.424	5.209	
ATOM 1588	CB	LEU	205	89.556	106.641	6.193	
ATOM 1589	CG	LEU	205	90.732	107.648	6.363	30
ATOM 1590	CD1	LEU	205	90.482	108.849	5.544	
ATOM 1591	CD2	LEU	205	91.005	108.057	7.798	
ATOM 1592	N	LEU	206	87.673	103.843	7.366	
ATOM 1593	CA	LEU	206	86.457	103.020	7.225	
ATOM 1594	C	LEU	206	85.216	103.873	7.671	
ATOM 1595	O	LEU	206	84.958	104.005	8.875	
ATOM 1596	CB	LEU	206	86.634	101.693	8.020	
ATOM 1597	CG	LEU	206	87.495	100.539	7.414	
ATOM 1598	CD1	LEU	206	87.706	99.433	8.466	
ATOM 1599	CD2	LEU	206	86.946	99.913	6.113	40
ATOM 1600	N	LEU	207	84.438	104.362	6.695	
ATOM 1601	CA	LEU	207	83.189	105.117	6.864	
ATOM 1602	C	LEU	207	82.004	104.101	6.827	
ATOM 1603	O	LEU	207	81.726	103.543	5.755	
ATOM 1604	CB	LEU	207	83.143	106.146	5.711	
ATOM 1605	CG	LEU	207	84.204	107.267	5.713	
ATOM 1606	CD1	LEU	207	85.429	106.803	4.992	
ATOM 1607	CD2	LEU	207	83.702	108.482	4.952	
ATOM 1608	N	PHE	208	81.136	104.159	7.828	
ATOM 1609	CA	PHE	208	80.026	103.218	7.993	50

ATOM	1610	C	PHE	208	78.659	103.918	7.814	
ATOM	1611	O	PHE	208	78.355	104.941	8.464	
ATOM	1612	CB	PHE	208	80.198	102.632	9.416	
ATOM	1613	CG	PHE	208	81.407	101.721	9.603	
ATOM	1614	CD1	PHE	208	81.434	100.400	9.103	
ATOM	1615	CD2	PHE	208	82.552	102.201	10.261	
ATOM	1616	CE1	PHE	208	82.575	99.586	9.258	
ATOM	1617	CE2	PHE	208	83.698	101.389	10.421	
ATOM	1618	CZ	PHE	208	83.705	100.099	9.921	
ATOM	1619	N	LYS	209	77.829	103.337	6.951	10
ATOM	1620	CA	LYS	209	76.452	103.768	6.699	
ATOM	1621	C	LYS	209	75.522	102.539	6.689	
ATOM	1622	O	LYS	209	75.434	101.831	5.667	
ATOM	1623	CB	LYS	209	76.341	104.623	5.431	
ATOM	1624	CG	LYS	209	74.950	105.188	5.075	
ATOM	1625	CD	LYS	209	74.452	106.198	6.126	
ATOM	1626	CE	LYS	209	73.270	107.066	5.650	
ATOM	1627	NZ	LYS	209	72.212	106.295	4.941	
ATOM	1628	N	ASP	210	74.644	102.513	7.693	
ATOM	1629	CA	ASP	210	73.683	101.435	7.932	20
ATOM	1630	C	ASP	210	74.478	100.089	7.996	
ATOM	1631	O	ASP	210	75.396	99.956	8.817	
ATOM	1632	CB	ASP	210	72.564	101.514	6.867	
ATOM	1633	CG	ASP	210	71.565	102.597	7.089	
ATOM	1634	OD1	ASP	210	71.484	103.147	8.220	
ATOM	1635	OD2	ASP	210	70.831	102.920	6.111	
ATOM	1636	N	ARG	211	74.118	99.124	7.172	
ATOM	1637	CA	ARG	211	74.727	97.827	7.042	
ATOM	1638	C	ARG	211	75.983	97.805	6.082	
ATOM	1639	O	ARG	211	76.492	96.696	5.896	30
ATOM	1640	CB	ARG	211	73.653	96.957	6.414	
ATOM	1641	CG	ARG	211	72.635	96.245	7.282	
ATOM	1642	CD	ARG	211	71.262	96.278	6.597	
ATOM	1643	NE	ARG	211	70.933	95.061	5.851	
ATOM	1644	CZ	ARG	211	70.376	95.028	4.639	
ATOM	1645	NH1	ARG	211	70.106	96.128	3.967	
ATOM	1646	NH2	ARG	211	70.048	93.875	4.108	
ATOM	1647	N	ILE	212	76.505	98.952	5.566	
ATOM	1648	CA	ILE	212	77.620	98.913	4.577	
ATOM	1649	C	ILE	212	78.765	99.882	4.975	40
ATOM	1650	O	ILE	212	78.535	101.091	5.086	
ATOM	1651	CB	ILE	212	77.134	99.162	3.097	
ATOM	1652	CG1	ILE	212	76.036	98.153	2.651	
ATOM	1653	CG2	ILE	212	78.338	99.005	2.098	
ATOM	1654	CD1	ILE	212	75.786	98.248	1.060	
ATOM	1655	N	PHE	213	79.978	99.404	4.695	
ATOM	1656	CA	PHE	213	81.242	100.101	4.850	
ATOM	1657	C	PHE	213	81.712	100.604	3.448	
ATOM	1658	O	PHE	213	81.729	99.875	2.462	
ATOM	1659	CB	PHE	213	82.342	99.168	5.392	50

ATOM 1660	CG	PHE	213	82.932	98.017	4.605	
ATOM 1661	CD1	PHE	213	83.860	98.268	3.601	
ATOM 1662	CD2	PHE	213	82.522	96.730	4.892	
ATOM 1663	CE1	PHE	213	84.388	97.230	2.871	
ATOM 1664	CE2	PHE	213	83.057	95.692	4.160	
ATOM 1665	CZ	PHE	213	83.978	95.947	3.162	
ATOM 1666	N	TRP	214	82.140	101.868	3.404	
ATOM 1667	CA	TRP	214	82.693	102.563	2.245	
ATOM 1668	C	TRP	214	84.207	102.741	2.626	
ATOM 1669	O	TRP	214	84.561	103.703	3.311	10
ATOM 1670	CB	TRP	214	82.000	103.949	2.244	
ATOM 1671	CG	TRP	214	80.878	104.103	1.241	
ATOM 1672	CD1	TRP	214	79.612	104.494	1.566	
ATOM 1673	CD2	TRP	214	80.841	103.838	-0.171	
ATOM 1674	NE1	TRP	214	78.791	104.491	0.472	
ATOM 1675	CE2	TRP	214	79.522	104.092	-0.610	
ATOM 1676	CE3	TRP	214	81.808	103.406	-1.081	
ATOM 1677	CZ2	TRP	214	79.135	103.934	-1.938	
ATOM 1678	CZ3	TRP	214	81.426	103.241	-2.395	
ATOM 1679	CH2	TRP	214	80.125	103.497	-2.810	20
ATOM 1680	N	ARG	215	85.059	101.810	2.117	
ATOM 1681	CA	ARG	215	86.471	101.756	2.439	
ATOM 1682	C	ARG	215	87.482	102.384	1.404	
ATOM 1683	O	ARG	215	87.981	101.620	0.545	
ATOM 1684	CB	ARG	215	86.802	100.279	2.529	
ATOM 1685	CG	ARG	215	88.150	99.826	3.066	
ATOM 1686	CD	ARG	215	88.081	98.335	3.207	
ATOM 1687	NE	ARG	215	89.284	97.707	3.735	
ATOM 1688	CZ	ARG	215	89.399	96.400	3.962	
ATOM 1689	NH1	ARG	215	88.391	95.600	3.731	30
ATOM 1690	NH2	ARG	215	90.527	95.885	4.400	
ATOM 1691	N	ARG	216	87.468	103.656	1.155	
ATOM 1692	CA	ARG	216	88.574	104.199	0.322	
ATOM 1693	C	ARG	216	89.800	104.383	1.185	
ATOM 1694	O	ARG	216	90.876	104.104	0.652	
ATOM 1695	CB	ARG	216	88.259	105.456	-0.363	
ATOM 1696	CG	ARG	216	89.145	106.126	-1.332	
ATOM 1697	CD	ARG	216	88.477	107.357	-1.899	
ATOM 1698	NE	ARG	216	89.566	108.257	-2.341	
ATOM 1699	CZ	ARG	216	89.962	108.134	-3.620	40
ATOM 1700	NH1	ARG	216	89.213	107.301	-4.350	
ATOM 1701	NH2	ARG	216	91.008	108.769	-4.124	
ATOM 1702	N	GLN	217	89.655	105.153	2.282	
ATOM 1703	CA	GLN	217	90.732	105.291	3.269	
ATOM 1704	C	GLN	217	91.922	106.088	2.618	
ATOM 1705	O	GLN	217	92.805	106.494	3.383	
ATOM 1706	CB	GLN	217	91.267	103.864	3.294	
ATOM 1707	CG	GLN	217	90.382	102.867	4.015	
ATOM 1708	CD	GLN	217	90.862	101.420	3.964	
ATOM 1709	OE1	GLN	217	91.568	100.957	3.053	50

ATOM 1710	NE2	GLN	217	90.425	100.695	4.982	
ATOM 1711	N	VAL	218	91.689	106.729	1.491	
ATOM 1712	CA	VAL	218	92.656	107.444	0.696	
ATOM 1713	C	VAL	218	94.039	106.692	0.596	
ATOM 1714	O	VAL	218	94.954	107.289	0.009	
ATOM 1715	CB	VAL	218	92.796	108.935	1.183	
ATOM 1716	CG1	VAL	218	93.722	109.792	0.240	
ATOM 1717	CG2	VAL	218	91.445	109.632	1.421	
ATOM 1718	N	HIS	219	94.136	105.340	0.800	
ATOM 1719	CA	HIS	219	95.428	104.658	0.590	10
ATOM 1720	C	HIS	219	95.348	104.010	-0.802	
ATOM 1721	O	HIS	219	94.654	102.988	-0.967	
ATOM 1722	CB	HIS	219	95.713	103.600	1.665	
ATOM 1723	CG	HIS	219	97.083	102.977	1.692	
ATOM 1724	ND1	HIS	219	98.091	103.184	2.558	
ATOM 1725	CD2	HIS	219	97.538	102.076	0.760	
ATOM 1726	CE1	HIS	219	99.118	102.459	2.177	
ATOM 1727	NE2	HIS	219	98.784	101.792	1.090	
ATOM 1728	N	LEU	220	95.821	104.778	-1.775	
ATOM 1729	CA	LEU	220	95.967	104.409	-3.157	20
ATOM 1730	C	LEU	220	94.699	103.753	-3.792	
ATOM 1731	O	LEU	220	94.907	102.993	-4.760	
ATOM 1732	CB	LEU	220	97.244	103.564	-3.326	
ATOM 1733	CG	LEU	220	97.320	102.339	-2.426	
ATOM 1734	CD1	LEU	220	96.480	101.169	-2.893	
ATOM 1735	CD2	LEU	220	98.787	101.944	-2.318	
ATOM 1736	N	ARG	221	93.487	104.301	-3.633	
ATOM 1737	CA	ARG	221	92.330	103.564	-4.172	
ATOM 1738	C	ARG	221	91.688	104.428	-5.282	
ATOM 1739	O	ARG	221	91.428	105.622	-5.058	30
ATOM 1740	CB	ARG	221	91.311	103.242	-3.069	
ATOM 1741	CG	ARG	221	91.837	102.137	-2.196	
ATOM 1742	CD	ARG	221	90.609	101.177	-2.067	
ATOM 1743	NE	ARG	221	91.067	99.893	-1.490	
ATOM 1744	CZ	ARG	221	91.108	99.931	-0.131	
ATOM 1745	NH1	ARG	221	90.649	101.045	0.450	
ATOM 1746	NH2	ARG	221	91.613	98.929	0.561	
ATOM 1747	N	THR	222	91.354	103.755	-6.405	
ATOM 1748	CA	THR	222	90.671	104.495	-7.434	
ATOM 1749	C	THR	222	89.179	104.217	-7.209	40
ATOM 1750	O	THR	222	88.621	103.188	-7.632	
ATOM 1751	CB	THR	222	91.111	104.112	-8.884	
ATOM 1752	OG1	THR	222	92.453	104.391	-9.228	
ATOM 1753	CG2	THR	222	90.188	104.797	-9.955	
ATOM 1754	N	GLY	223	88.621	105.136	-6.443	
ATOM 1755	CA	GLY	223	87.231	105.117	-5.952	
ATOM 1756	C	GLY	223	87.068	104.305	-4.630	
ATOM 1757	O	GLY	223	87.871	103.398	-4.359	
ATOM 1758	N	ILE	224	85.854	104.367	-4.050	
ATOM 1759	CA	ILE	224	85.660	103.719	-2.764	50

ATOM 1760	C	ILE	224	84.923	102.376	-3.086	
ATOM 1761	O	ILE	224	83.880	102.410	-3.764	
ATOM 1762	CB	ILE	224	84.850	104.603	-1.745	
ATOM 1763	CG1	ILE	224	85.773	105.802	-1.309	
ATOM 1764	CG2	ILE	224	84.448	103.777	-0.493	
ATOM 1765	CD1	ILE	224	84.955	106.919	-0.625	
ATOM 1766	N	ARG	225	85.311	101.291	-2.412	
ATOM 1767	CA	ARG	225	84.575	100.079	-2.621	
ATOM 1768	C	ARG	225	83.439	99.876	-1.529	
ATOM 1769	O	ARG	225	83.829	99.724	-0.355	10
ATOM 1770	CB	ARG	225	85.515	98.886	-2.596	
ATOM 1771	CG	ARG	225	84.824	97.546	-2.921	
ATOM 1772	CD	ARG	225	85.816	96.355	-2.945	
ATOM 1773	NE	ARG	225	85.174	95.175	-3.521	
ATOM 1774	CZ	ARG	225	84.868	94.118	-2.833	
ATOM 1775	NH1	ARG	225	85.052	94.108	-1.545	
ATOM 1776	NH2	ARG	225	84.192	93.157	-3.396	
ATOM 1777	N	PRO	226	82.073	100.009	-1.779	
ATOM 1778	CA	PRO	226	81.159	99.618	-0.799	
ATOM 1779	C	PRO	226	81.115	98.045	-0.707	20
ATOM 1780	O	PRO	226	81.253	97.356	-1.743	
ATOM 1781	CB	PRO	226	79.742	100.093	-1.198	
ATOM 1782	CG	PRO	226	79.872	100.147	-2.732	
ATOM 1783	CD	PRO	226	81.314	100.556	-3.012	
ATOM 1784	N	SER	227	80.781	97.577	0.439	
ATOM 1785	CA	SER	227	80.628	96.129	0.781	
ATOM 1786	C	SER	227	79.973	96.058	2.149	
ATOM 1787	O	SER	227	80.410	96.845	3.018	
ATOM 1788	CB	SER	227	81.988	95.441	0.704	
ATOM 1789	OG	SER	227	81.967	94.021	0.659	30
ATOM 1790	N	THR	228	79.367	94.940	2.554	
ATOM 1791	CA	THR	228	78.705	94.960	3.847	
ATOM 1792	C	THR	228	79.716	94.876	5.043	
ATOM 1793	O	THR	228	80.710	94.148	5.009	
ATOM 1794	CB	THR	228	77.736	93.753	3.946	
ATOM 1795	OG1	THR	228	78.409	92.472	4.176	
ATOM 1796	CG2	THR	228	76.742	93.607	2.775	
ATOM 1797	N	ILE	229	79.297	95.504	6.158	
ATOM 1798	CA	ILE	229	79.987	95.512	7.485	
ATOM 1799	C	ILE	229	80.127	94.024	7.977	40
ATOM 1800	O	ILE	229	81.171	93.680	8.529	
ATOM 1801	CB	ILE	229	79.266	96.386	8.508	
ATOM 1802	CG1	ILE	229	79.156	97.810	8.046	
ATOM 1803	CG2	ILE	229	79.987	96.345	9.848	
ATOM 1804	CD1	ILE	229	78.401	98.777	8.958	
ATOM 1805	N	THR	230	79.065	93.197	7.846	
ATOM 1806	CA	THR	230	79.026	91.789	8.150	
ATOM 1807	C	THR	230	80.159	91.025	7.359	
ATOM 1808	O	THR	230	80.803	90.194	8.018	
ATOM 1809	CB	THR	230	77.605	91.178	7.952	50

ATOM 1810	OG1	THR	230	76.539	91.852	8.637	
ATOM 1811	CG2	THR	230	77.656	89.740	8.588	
ATOM 1812	N	SER	231	80.212	91.054	6.021	
ATOM 1813	CA	SER	231	81.358	90.391	5.329	
ATOM 1814	C	SER	231	82.725	90.884	5.876	
ATOM 1815	O	SER	231	83.634	90.042	5.918	
ATOM 1816	CB	SER	231	81.220	90.541	3.817	
ATOM 1817	OG	SER	231	80.419	89.526	3.162	
ATOM 1818	N	SER	232	82.949	92.195	6.057	
ATOM 1819	CA	SER	232	84.143	92.734	6.630	10
ATOM 1820	C	SER	232	84.528	92.115	8.013	
ATOM 1821	O	SER	232	85.666	91.637	8.085	
ATOM 1822	CB	SER	232	83.982	94.266	6.669	
ATOM 1823	OG	SER	232	85.222	94.997	6.838	
ATOM 1824	N	PHE	233	83.616	91.957	8.994	
ATOM 1825	CA	PHE	233	84.114	91.455	10.315	
ATOM 1826	C	PHE	233	83.049	90.584	11.106	
ATOM 1827	O	PHE	233	81.872	91.016	11.078	
ATOM 1828	CB	PHE	233	84.719	92.532	11.216	
ATOM 1829	CG	PHE	233	85.846	93.276	10.585	20
ATOM 1830	CD1	PHE	233	87.143	92.811	10.782	
ATOM 1831	CD2	PHE	233	85.658	94.405	9.810	
ATOM 1832	CE1	PHE	233	88.219	93.477	10.209	
ATOM 1833	CE2	PHE	233	86.740	95.072	9.236	
ATOM 1834	CZ	PHE	233	88.011	94.600	9.443	
ATOM 1835	N	PRO	234	83.360	89.533	11.959	
ATOM 1836	CA	PRO	234	82.279	88.801	12.517	
ATOM 1837	C	PRO	234	81.224	89.520	13.382	
ATOM 1838	O	PRO	234	80.092	89.589	12.891	
ATOM 1839	CB	PRO	234	82.794	87.585	13.343	30
ATOM 1840	CG	PRO	234	84.222	87.454	12.847	
ATOM 1841	CD	PRO	234	84.568	88.615	11.947	
ATOM 1842	N	GLN	235	81.509	90.087	14.584	
ATOM 1843	CA	GLN	235	80.372	90.655	15.364	
ATOM 1844	C	GLN	235	79.734	91.883	14.676	
ATOM 1845	O	GLN	235	78.503	91.851	14.548	
ATOM 1846	CB	GLN	235	80.757	90.876	16.782	
ATOM 1847	CG	GLN	235	81.142	89.661	17.530	
ATOM 1848	CD	GLN	235	80.705	89.713	18.969	
ATOM 1849	OE1	GLN	235	79.545	90.034	19.278	40
ATOM 1850	NE2	GLN	235	81.627	89.424	19.868	
ATOM 1851	N	LEU	236	80.390	93.028	14.862	
ATOM 1852	CA	LEU	236	80.061	94.290	14.257	
ATOM 1853	C	LEU	236	78.517	94.517	13.982	
ATOM 1854	O	LEU	236	78.049	93.998	12.948	
ATOM 1855	CB	LEU	236	80.809	94.444	12.954	
ATOM 1856	CG	LEU	236	82.259	94.834	13.071	
ATOM 1857	CD1	LEU	236	82.756	95.165	11.682	
ATOM 1858	CD2	LEU	236	82.469	96.047	13.976	
ATOM 1859	N	MET	237	77.712	94.942	14.934	50

ATOM 1860	CA	MET	237	76.305	95.241	14.655	
ATOM 1861	C	MET	237	76.267	96.337	13.545	
ATOM 1862	O	MET	237	76.868	97.390	13.650	
ATOM 1863	CB	MET	237	75.674	95.634	15.993	
ATOM 1864	CG	MET	237	74.159	95.692	15.848	
ATOM 1865	SD	MET	237	73.530	94.013	15.633	
ATOM 1866	CE	MET	237	73.099	93.706	17.310	
ATOM 1867	N	SER	238	75.186	96.237	12.732	
ATOM 1868	CA	SER	238	74.851	97.173	11.645	
ATOM 1869	C	SER	238	74.290	98.509	12.278	10
ATOM 1870	O	SER	238	73.650	98.372	13.339	
ATOM 1871	CB	SER	238	73.894	96.425	10.661	
ATOM 1872	OG	SER	238	74.478	95.412	9.832	
ATOM 1873	N	ASN	239	74.214	99.644	11.560	
ATOM 1874	CA	ASN	239	73.764	100.883	12.221	
ATOM 1875	C	ASN	239	74.748	101.272	13.397	
ATOM 1876	O	ASN	239	74.280	101.707	14.449	
ATOM 1877	CB	ASN	239	72.279	100.742	12.680	
ATOM 1878	CG	ASN	239	71.544	102.058	12.800	
ATOM 1879	OD1	ASN	239	71.932	103.062	12.195	20
ATOM 1880	ND2	ASN	239	70.487	102.051	13.597	
ATOM 1881	N	VAL	240	76.063	101.350	13.123	
ATOM 1882	CA	VAL	240	77.077	101.780	14.061	
ATOM 1883	C	VAL	240	77.068	103.304	14.148	
ATOM 1884	O	VAL	240	77.263	104.013	13.154	
ATOM 1885	CB	VAL	240	78.460	101.299	13.624	
ATOM 1886	CG1	VAL	240	79.583	101.759	14.589	
ATOM 1887	CG2	VAL	240	78.485	99.770	13.334	
ATOM 1888	N	ASP	241	76.776	103.791	15.357	
ATOM 1889	CA	ASP	241	76.808	105.218	15.680	30
ATOM 1890	C	ASP	241	78.258	105.830	15.626	
ATOM 1891	O	ASP	241	78.369	106.922	15.053	
ATOM 1892	CB	ASP	241	76.177	105.377	17.074	
ATOM 1893	CG	ASP	241	74.693	105.136	17.197	
ATOM 1894	OD1	ASP	241	74.034	105.098	16.133	
ATOM 1895	OD2	ASP	241	74.291	105.007	18.361	
ATOM 1896	N	ALA	242	79.276	105.291	16.347	
ATOM 1897	CA	ALA	242	80.652	105.779	16.323	
ATOM 1898	C	ALA	242	81.679	104.611	16.420	
ATOM 1899	O	ALA	242	81.754	103.923	17.440	40
ATOM 1900	CB	ALA	242	80.791	106.732	17.520	
ATOM 1901	N	ALA	243	82.695	104.707	15.575	
ATOM 1902	CA	ALA	243	83.845	103.801	15.531	
ATOM 1903	C	ALA	243	85.174	104.610	15.614	
ATOM 1904	O	ALA	243	85.346	105.589	14.860	
ATOM 1905	CB	ALA	243	83.764	102.984	14.226	
ATOM 1906	N	TYR	244	86.051	104.269	16.572	
ATOM 1907	CA	TYR	244	87.385	104.872	16.730	
ATOM 1908	C	TYR	244	88.435	103.722	16.962	
ATOM 1909	O	TYR	244	88.329	103.017	17.960	50

ATOM 1910	CB	TYR	244	87.458	105.929	17.849	
ATOM 1911	CG	TYR	244	87.613	105.425	19.295	
ATOM 1912	CD1	TYR	244	86.481	105.140	20.080	
ATOM 1913	CD2	TYR	244	88.877	105.331	19.908	
ATOM 1914	CE1	TYR	244	86.603	104.778	21.434	
ATOM 1915	CE2	TYR	244	89.006	104.972	21.265	
ATOM 1916	CZ	TYR	244	87.862	104.705	22.018	
ATOM 1917	OH	TYR	244	87.935	104.407	23.362	
ATOM 1918	N	GLU	245	89.652	103.950	16.465	
ATOM 1919	CA	GLU	245	90.778	103.024	16.449	10
ATOM 1920	C	GLU	245	92.054	103.563	17.185	
ATOM 1921	O	GLU	245	92.430	104.727	16.973	
ATOM 1922	CB	GLU	245	91.137	102.868	14.949	
ATOM 1923	CG	GLU	245	92.090	101.680	14.584	
ATOM 1924	CD	GLU	245	93.554	102.031	14.815	
ATOM 1925	OE1	GLU	245	93.953	103.149	14.476	
ATOM 1926	OE2	GLU	245	94.272	101.217	15.389	
ATOM 1927	N	VAL	246	92.678	102.763	18.063	
ATOM 1928	CA	VAL	246	93.927	103.062	18.757	
ATOM 1929	C	VAL	246	95.041	102.253	18.058	20
ATOM 1930	O	VAL	246	95.204	101.067	18.323	
ATOM 1931	CB	VAL	246	93.843	102.808	20.290	
ATOM 1932	CG1	VAL	246	95.151	103.195	21.053	
ATOM 1933	CG2	VAL	246	92.624	103.517	20.894	
ATOM 1934	N	ALA	247	95.822	102.969	17.245	
ATOM 1935	CA	ALA	247	96.885	102.433	16.383	
ATOM 1936	C	ALA	247	98.004	101.717	17.188	
ATOM 1937	O	ALA	247	98.496	100.705	16.659	
ATOM 1938	CB	ALA	247	97.426	103.602	15.543	
ATOM 1939	N	GLU	248	98.663	102.356	18.185	30
ATOM 1940	CA	GLU	248	99.651	101.701	19.041	
ATOM 1941	C	GLU	248	99.150	100.300	19.497	
ATOM 1942	O	GLU	248	99.980	99.383	19.429	
ATOM 1943	CB	GLU	248	99.995	102.656	20.190	
ATOM 1944	CG	GLU	248	101.092	102.142	21.122	
ATOM 1945	CD	GLU	248	101.554	103.171	22.145	
ATOM 1946	OE1	GLU	248	100.725	103.708	22.882	
ATOM 1947	OE2	GLU	248	102.755	103.428	22.205	
ATOM 1948	N	ARG	249	97.958	100.154	20.136	
ATOM 1949	CA	ARG	249	97.471	98.835	20.462	40
ATOM 1950	C	ARG	249	97.061	97.951	19.215	
ATOM 1951	O	ARG	249	96.889	96.751	19.440	
ATOM 1952	CB	ARG	249	96.309	98.863	21.477	
ATOM 1953	CG	ARG	249	96.847	99.333	22.842	
ATOM 1954	CD	ARG	249	95.821	99.237	23.915	
ATOM 1955	NE	ARG	249	94.726	100.181	23.772	
ATOM 1956	CZ	ARG	249	94.711	101.384	24.359	
ATOM 1957	NH1	ARG	249	95.710	101.853	25.076	
ATOM 1958	NH2	ARG	249	93.595	102.116	24.259	
ATOM 1959	N	GLY	250	96.962	98.483	17.975	50

ATOM 1960	CA	GLY	250	96.489	97.729	16.803	
ATOM 1961	C	GLY	250	95.004	97.314	16.935	
ATOM 1962	O	GLY	250	94.703	96.177	16.579	
ATOM 1963	N	THR	251	94.104	98.183	17.467	
ATOM 1964	CA	THR	251	92.705	97.946	17.677	
ATOM 1965	C	THR	251	91.857	99.141	17.192	
ATOM 1966	O	THR	251	92.345	100.237	16.960	
ATOM 1967	CB	THR	251	92.477	97.625	19.201	
ATOM 1968	OG1	THR	251	91.159	97.049	19.510	
ATOM 1969	CG2	THR	251	92.743	98.797	20.160	10
ATOM 1970	N	ALA	252	90.604	98.824	16.996	
ATOM 1971	CA	ALA	252	89.524	99.723	16.623	
ATOM 1972	C	ALA	252	88.227	99.289	17.377	
ATOM 1973	O	ALA	252	87.785	98.143	17.241	
ATOM 1974	CB	ALA	252	89.322	99.659	15.103	
ATOM 1975	N	TYR	253	87.465	100.285	17.754	
ATOM 1976	CA	TYR	253	86.256	100.194	18.550	
ATOM 1977	C	TYR	253	85.013	100.490	17.651	
ATOM 1978	O	TYR	253	85.050	101.375	16.794	
ATOM 1979	CB	TYR	253	86.328	101.233	19.671	20
ATOM 1980	CG	TYR	253	87.518	101.083	20.576	
ATOM 1981	CD1	TYR	253	88.544	102.029	20.561	
ATOM 1982	CD2	TYR	253	87.644	99.943	21.365	
ATOM 1983	CE1	TYR	253	89.687	101.790	21.319	
ATOM 1984	CE2	TYR	253	88.753	99.704	22.173	
ATOM 1985	CZ	TYR	253	89.769	100.649	22.115	
ATOM 1986	OH	TYR	253	90.875	100.372	22.865	
ATOM 1987	N	PHE	254	83.891	99.976	18.085	
ATOM 1988	CA	PHE	254	82.592	100.163	17.486	
ATOM 1989	C	PHE	254	81.555	100.399	18.605	30
ATOM 1990	O	PHE	254	81.425	99.564	19.486	
ATOM 1991	CB	PHE	254	82.262	98.901	16.713	
ATOM 1992	CG	PHE	254	83.168	98.612	15.600	
ATOM 1993	CD1	PHE	254	83.076	99.287	14.407	
ATOM 1994	CD2	PHE	254	84.192	97.694	15.775	
ATOM 1995	CE1	PHE	254	83.996	99.065	13.399	
ATOM 1996	CE2	PHE	254	85.113	97.464	14.774	
ATOM 1997	CZ	PHE	254	85.013	98.157	13.580	
ATOM 1998	N	PHE	255	80.678	101.342	18.352	
ATOM 1999	CA	PHE	255	79.722	101.732	19.358	40
ATOM 2000	C	PHE	255	78.281	101.837	18.807	
ATOM 2001	O	PHE	255	78.024	102.559	17.836	
ATOM 2002	CB	PHE	255	80.190	103.085	19.917	
ATOM 2003	CG	PHE	255	81.419	103.075	20.790	
ATOM 2004	CD1	PHE	255	82.688	103.109	20.204	
ATOM 2005	CD2	PHE	255	81.336	103.074	22.178	
ATOM 2006	CE1	PHE	255	83.864	103.146	20.984	
ATOM 2007	CE2	PHE	255	82.496	103.109	22.964	
ATOM 2008	CZ	PHE	255	83.765	103.147	22.358	
ATOM 2009	N	LYS	256	77.416	100.982	19.348	50

ATOM 2010	CA	LYS	256	75.987	100.970	19.058	
ATOM 2011	C	LYS	256	75.216	100.896	20.420	
ATOM 2012	O	LYS	256	75.132	99.824	21.040	
ATOM 2013	CB	LYS	256	75.573	99.838	18.137	
ATOM 2014	CG	LYS	256	74.191	100.040	17.546	
ATOM 2015	CD	LYS	256	73.828	99.040	16.438	
ATOM 2016	CE	LYS	256	72.289	98.881	16.363	
ATOM 2017	NZ	LYS	256	71.703	98.121	15.215	
ATOM 2018	N	GLY	257	74.421	101.942	20.670	
ATOM 2019	CA	GLY	257	73.656	102.186	21.923	10
ATOM 2020	C	GLY	257	74.650	102.124	23.083	
ATOM 2021	O	GLY	257	75.624	102.895	22.999	
ATOM 2022	N	PRO	258	74.370	101.569	24.303	
ATOM 2023	CA	PRO	258	75.390	101.461	25.295	
ATOM 2024	C	PRO	258	76.440	100.298	25.047	
ATOM 2025	O	PRO	258	77.080	99.947	26.033	
ATOM 2026	CB	PRO	258	74.704	101.144	26.652	
ATOM 2027	CG	PRO	258	73.454	100.381	26.177	
ATOM 2028	CD	PRO	258	73.066	101.014	24.846	
ATOM 2029	N	HIS	259	76.327	99.458	24.014	20
ATOM 2030	CA	HIS	259	77.377	98.401	23.847	
ATOM 2031	C	HIS	259	78.545	98.805	22.877	
ATOM 2032	O	HIS	259	78.321	99.649	21.993	
ATOM 2033	CB	HIS	259	76.671	97.141	23.342	
ATOM 2034	CG	HIS	259	75.838	96.468	24.412	
ATOM 2035	ND1	HIS	259	76.324	95.991	25.615	
ATOM 2036	CD2	HIS	259	74.500	96.243	24.420	
ATOM 2037	CE1	HIS	259	75.283	95.547	26.332	
ATOM 2038	NE2	HIS	259	74.174	95.641	25.612	
ATOM 2039	N	TYR	260	79.778	98.261	23.048	30
ATOM 2040	CA	TYR	260	80.807	98.583	22.051	
ATOM 2041	C	TYR	260	81.649	97.260	21.875	
ATOM 2042	O	TYR	260	82.009	96.617	22.880	
ATOM 2043	CB	TYR	260	81.734	99.689	22.447	
ATOM 2044	CG	TYR	260	82.792	99.352	23.408	
ATOM 2045	CD1	TYR	260	82.534	99.181	24.767	
ATOM 2046	CD2	TYR	260	84.100	99.201	22.956	
ATOM 2047	CE1	TYR	260	83.570	98.865	25.661	
ATOM 2048	CE2	TYR	260	85.131	98.888	23.832	
ATOM 2049	CZ	TYR	260	84.863	98.720	25.181	40
ATOM 2050	OH	TYR	260	85.895	98.396	26.033	
ATOM 2051	N	TRP	261	82.247	97.067	20.711	
ATOM 2052	CA	TRP	261	82.978	95.870	20.322	
ATOM 2053	C	TRP	261	84.468	96.234	19.923	
ATOM 2054	O	TRP	261	84.679	96.985	18.959	
ATOM 2055	CB	TRP	261	82.290	95.438	19.039	
ATOM 2056	CG	TRP	261	80.841	95.121	19.081	
ATOM 2057	CD1	TRP	261	80.222	93.906	19.082	
ATOM 2058	CD2	TRP	261	79.801	96.093	19.238	
ATOM 2059	NE1	TRP	261	78.859	94.054	19.248	50

ATOM 2060	CE2	TRP	261	78.576	95.385	19.358	
ATOM 2061	CE3	TRP	261	79.785	97.484	19.314	
ATOM 2062	CZ2	TRP	261	77.362	96.022	19.549	
ATOM 2063	CZ3	TRP	261	78.590	98.116	19.502	
ATOM 2064	CH2	TRP	261	77.388	97.394	19.626	
ATOM 2065	N	ILE	262	85.499	95.837	20.713	
ATOM 2066	CA	ILE	262	86.954	96.021	20.444	
ATOM 2067	C	ILE	262	87.394	94.936	19.393	
ATOM 2068	O	ILE	262	87.399	93.745	19.743	
ATOM 2069	CB	ILE	262	87.750	95.772	21.782	10
ATOM 2070	CG1	ILE	262	87.369	96.841	22.815	
ATOM 2071	CG2	ILE	262	89.275	95.860	21.461	
ATOM 2072	CD1	ILE	262	88.023	96.661	24.207	
ATOM 2073	N	THR	263	88.134	95.348	18.323	
ATOM 2074	CA	THR	263	88.493	94.598	17.159	
ATOM 2075	C	THR	263	90.042	94.641	16.851	
ATOM 2076	O	THR	263	90.434	95.590	16.176	
ATOM 2077	CB	THR	263	87.489	95.057	16.044	
ATOM 2078	OG1	THR	263	86.040	95.006	16.456	
ATOM 2079	CG2	THR	263	87.567	94.357	14.710	20
ATOM 2080	N	ARG	264	90.809	93.554	17.145	
ATOM 2081	CA	ARG	264	92.257	93.573	16.881	
ATOM 2082	C	ARG	264	92.591	92.784	15.572	
ATOM 2083	O	ARG	264	92.480	91.549	15.618	
ATOM 2084	CB	ARG	264	92.985	92.973	18.094	
ATOM 2085	CG	ARG	264	94.519	92.983	17.876	
ATOM 2086	CD	ARG	264	95.302	92.997	19.189	
ATOM 2087	NE	ARG	264	95.017	94.190	19.987	
ATOM 2088	CZ	ARG	264	95.217	94.287	21.302	
ATOM 2089	NH1	ARG	264	95.743	93.258	21.978	30
ATOM 2090	NH2	ARG	264	94.838	95.398	21.945	
ATOM 2091	N	GLY	265	92.819	93.458	14.413	
ATOM 2092	CA	GLY	265	93.245	92.692	13.209	
ATOM 2093	C	GLY	265	92.221	91.608	12.736	
ATOM 2094	O	GLY	265	92.547	90.429	12.927	
ATOM 2095	N	PHE	266	91.027	91.945	12.258	
ATOM 2096	CA	PHE	266	89.976	90.996	11.820	
ATOM 2097	C	PHE	266	89.426	90.048	12.965	
ATOM 2098	O	PHE	266	88.759	89.070	12.585	
ATOM 2099	CB	PHE	266	90.503	90.169	10.608	40
ATOM 2100	CG	PHE	266	89.418	89.422	9.806	
ATOM 2101	CD1	PHE	266	88.997	88.130	10.153	
ATOM 2102	CD2	PHE	266	88.894	90.011	8.646	
ATOM 2103	CE1	PHE	266	88.071	87.439	9.369	
ATOM 2104	CE2	PHE	266	87.966	89.346	7.840	
ATOM 2105	CZ	PHE	266	87.554	88.045	8.232	
ATOM 2106	N	GLN	267	89.206	90.522	14.196	
ATOM 2107	CA	GLN	267	88.608	89.682	15.277	
ATOM 2108	C	GLN	267	88.164	90.442	16.601	
ATOM 2109	O	GLN	267	88.478	91.621	16.801	50

ATOM 2110	CB	GLN	267	89.625	88.565	15.605	
ATOM 2111	CG	GLN	267	91.022	88.961	16.020	
ATOM 2112	CD	GLN	267	91.820	87.704	16.350	
ATOM 2113	OE1	GLN	267	92.500	87.131	15.494	
ATOM 2114	NE2	GLN	267	91.803	87.206	17.597	
ATOM 2115	N	MET	268	87.397	89.799	17.527	
ATOM 2116	CA	MET	268	86.804	90.316	18.799	
ATOM 2117	C	MET	268	87.092	89.334	20.010	
ATOM 2118	O	MET	268	87.099	88.108	19.776	
ATOM 2119	CB	MET	268	85.314	90.216	18.449	10
ATOM 2120	CG	MET	268	84.899	91.582	17.785	
ATOM 2121	SD	MET	268	84.279	92.704	19.075	
ATOM 2122	CE	MET	268	82.503	92.538	18.795	
ATOM 2123	N	GLN	269	87.178	89.742	21.315	
ATOM 2124	CA	GLN	269	87.403	88.840	22.482	
ATOM 2125	C	GLN	269	86.525	89.074	23.780	
ATOM 2126	O	GLN	269	86.907	89.951	24.583	
ATOM 2127	CB	GLN	269	88.899	88.933	22.918	
ATOM 2128	CG	GLN	269	89.194	87.783	23.919	
ATOM 2129	CD	GLN	269	90.663	87.762	24.317	20
ATOM 2130	OE1	GLN	269	91.258	86.648	24.274	
ATOM 2131	NE2	GLN	269	91.254	88.939	24.427	
ATOM 2132	N	GLY	270	85.496	88.213	24.048	
ATOM 2133	CA	GLY	270	84.649	88.521	25.202	
ATOM 2134	C	GLY	270	84.289	90.033	25.152	
ATOM 2135	O	GLY	270	83.856	90.560	26.191	
ATOM 2136	N	PRO	271	84.290	90.712	23.917	
ATOM 2137	CA	PRO	271	84.072	92.120	23.797	
ATOM 2138	C	PRO	271	82.651	92.809	23.674	
ATOM 2139	O	PRO	271	82.757	94.047	23.387	30
ATOM 2140	CB	PRO	271	84.777	92.676	22.502	
ATOM 2141	CG	PRO	271	84.694	91.361	21.621	
ATOM 2142	CD	PRO	271	84.503	90.164	22.562	
ATOM 2143	N	PRO	272	81.398	92.283	23.479	
ATOM 2144	CA	PRO	272	80.291	93.216	23.458	
ATOM 2145	C	PRO	272	80.040	93.768	24.861	
ATOM 2146	O	PRO	272	79.323	93.133	25.655	
ATOM 2147	CB	PRO	272	78.981	92.529	22.991	
ATOM 2148	CG	PRO	272	79.638	91.368	22.208	
ATOM 2149	CD	PRO	272	80.803	90.945	23.053	40
ATOM 2150	N	ARG	273	81.016	94.534	25.277	
ATOM 2151	CA	ARG	273	81.016	95.142	26.539	
ATOM 2152	C	ARG	273	80.372	96.535	26.556	
ATOM 2153	O	ARG	273	80.678	97.396	25.727	
ATOM 2154	CB	ARG	273	82.430	95.040	27.149	
ATOM 2155	CG	ARG	273	83.406	95.924	26.316	
ATOM 2156	CD	ARG	273	84.874	95.738	26.759	
ATOM 2157	NE	ARG	273	85.104	96.181	28.158	
ATOM 2158	CZ	ARG	273	86.013	95.604	28.936	
ATOM 2159	NH1	ARG	273	86.846	94.721	28.402	50

ATOM 2160	NH2	ARG	273	86.201	96.022	30.176	
ATOM 2161	N	THR	274	79.812	96.830	27.733	
ATOM 2162	CA	THR	274	79.038	98.024	28.035	
ATOM 2163	C	THR	274	79.879	99.272	28.239	
ATOM 2164	O	THR	274	80.957	99.238	28.843	
ATOM 2165	CB	THR	274	78.217	97.729	29.348	
ATOM 2166	OG1	THR	274	77.688	96.436	29.473	
ATOM 2167	CG2	THR	274	77.214	98.890	29.694	
ATOM 2168	N	ILE	275	79.457	100.300	27.510	
ATOM 2169	CA	ILE	275	80.074	101.599	27.660	10
ATOM 2170	C	ILE	275	79.910	102.181	29.104	
ATOM 2171	O	ILE	275	80.626	103.152	29.376	
ATOM 2172	CB	ILE	275	79.583	102.678	26.638	
ATOM 2173	CG1	ILE	275	78.044	102.854	26.798	
ATOM 2174	CG2	ILE	275	80.024	102.406	25.169	
ATOM 2175	CD1	ILE	275	77.381	103.974	25.976	
ATOM 2176	N	TYR	276	78.746	102.012	29.797	
ATOM 2177	CA	TYR	276	78.606	102.453	31.187	
ATOM 2178	C	TYR	276	79.929	102.113	31.979	
ATOM 2179	O	TYR	276	80.147	102.801	32.982	20
ATOM 2180	CB	TYR	276	77.361	101.873	31.854	
ATOM 2181	CG	TYR	276	76.075	102.421	31.325	
ATOM 2182	CD1	TYR	276	75.529	101.991	30.116	
ATOM 2183	CD2	TYR	276	75.360	103.332	32.075	
ATOM 2184	CE1	TYR	276	74.308	102.453	29.684	
ATOM 2185	CE2	TYR	276	74.139	103.794	31.657	
ATOM 2186	CZ	TYR	276	73.611	103.346	30.469	
ATOM 2187	OH	TYR	276	72.346	103.720	30.098	
ATOM 2188	N	ASP	277	80.541	100.915	31.798	
ATOM 2189	CA	ASP	277	81.823	100.539	32.400	30
ATOM 2190	C	ASP	277	82.886	101.681	32.222	
ATOM 2191	O	ASP	277	83.718	101.812	33.117	
ATOM 2192	CB	ASP	277	82.304	99.220	31.761	
ATOM 2193	CG	ASP	277	83.518	98.576	32.394	
ATOM 2194	OD1	ASP	277	84.031	97.540	31.959	
ATOM 2195	OD2	ASP	277	84.027	99.173	33.377	
ATOM 2196	N	PHE	278	82.952	102.360	31.044	
ATOM 2197	CA	PHE	278	83.830	103.512	30.800	
ATOM 2198	C	PHE	278	83.571	104.715	31.746	
ATOM 2199	O	PHE	278	84.435	105.606	31.780	40
ATOM 2200	CB	PHE	278	83.756	104.070	29.348	
ATOM 2201	CG	PHE	278	84.265	103.003	28.376	
ATOM 2202	CD1	PHE	278	85.622	102.687	28.328	
ATOM 2203	CD2	PHE	278	83.397	102.339	27.519	
ATOM 2204	CE1	PHE	278	86.110	101.715	27.430	
ATOM 2205	CE2	PHE	278	83.868	101.373	26.623	
ATOM 2206	CZ	PHE	278	85.218	101.059	26.577	
ATOM 2207	N	GLY	279	82.491	104.760	32.552	
ATOM 2208	CA	GLY	279	82.121	105.859	33.442	
ATOM 2209	C	GLY	279	81.043	106.818	32.870	50

ATOM	2210	O	GLY	279	81.227	108.014	33.093	
ATOM	2211	N	PHE	280	80.221	106.436	31.842	
ATOM	2212	CA	PHE	280	79.199	107.345	31.326	
ATOM	2213	C	PHE	280	77.927	107.271	32.175	
ATOM	2214	O	PHE	280	77.401	106.118	32.381	
ATOM	2215	CB	PHE	280	78.866	106.906	29.890	
ATOM	2216	CG	PHE	280	79.797	107.337	28.810	
ATOM	2217	CD1	PHE	280	80.055	108.672	28.553	
ATOM	2218	CD2	PHE	280	80.392	106.380	27.998	
ATOM	2219	CE1	PHE	280	80.892	109.046	27.494	10
ATOM	2220	CE2	PHE	280	81.232	106.749	26.936	
ATOM	2221	CZ	PHE	280	81.479	108.080	26.685	
ATOM	2222	N	PRO	281	77.374	108.380	32.780	
ATOM	2223	CA	PRO	281	76.168	108.243	33.547	
ATOM	2224	C	PRO	281	75.067	107.564	32.735	
ATOM	2225	O	PRO	281	75.080	107.547	31.510	
ATOM	2226	CB	PRO	281	75.669	109.579	34.160	
ATOM	2227	CG	PRO	281	76.754	110.529	33.630	
ATOM	2228	CD	PRO	281	77.814	109.840	32.802	
ATOM	2229	N	ARG	282	74.137	107.080	33.495	20
ATOM	2230	CA	ARG	282	72.898	106.385	33.106	
ATOM	2231	C	ARG	282	72.042	107.132	32.026	
ATOM	2232	O	ARG	282	71.433	106.408	31.207	
ATOM	2233	CB	ARG	282	72.124	106.212	34.412	
ATOM	2234	CG	ARG	282	71.234	105.002	34.423	
ATOM	2235	CD	ARG	282	70.709	104.721	35.830	
ATOM	2236	NE	ARG	282	70.083	103.396	35.875	
ATOM	2237	CZ	ARG	282	70.381	102.450	36.763	
ATOM	2238	NH1	ARG	282	71.292	102.669	37.713	
ATOM	2239	NH2	ARG	282	69.818	101.250	36.652	30
ATOM	2240	N	HIS	283	71.903	108.486	32.056	
ATOM	2241	CA	HIS	283	71.177	109.213	30.988	
ATOM	2242	C	HIS	283	71.885	109.149	29.586	
ATOM	2243	O	HIS	283	71.292	109.656	28.626	
ATOM	2244	CB	HIS	283	71.043	110.663	31.425	
ATOM	2245	CG	HIS	283	70.019	111.059	32.414	
ATOM	2246	ND1	HIS	283	68.839	111.654	32.211	
ATOM	2247	CD2	HIS	283	70.156	110.878	33.780	
ATOM	2248	CE1	HIS	283	68.269	111.839	33.392	
ATOM	2249	NE2	HIS	283	69.079	111.368	34.323	40
ATOM	2250	N	VAL	284	73.110	108.604	29.439	
ATOM	2251	CA	VAL	284	73.804	108.417	28.132	
ATOM	2252	C	VAL	284	73.393	106.986	27.632	
ATOM	2253	O	VAL	284	73.888	105.982	28.138	
ATOM	2254	CB	VAL	284	75.329	108.600	28.221	
ATOM	2255	CG1	VAL	284	75.945	108.455	26.806	
ATOM	2256	CG2	VAL	284	75.737	109.926	28.837	
ATOM	2257	N	GLN	285	72.466	106.945	26.740	
ATOM	2258	CA	GLN	285	71.968	105.743	26.093	
ATOM	2259	C	GLN	285	72.816	105.374	24.805	50

ATOM 2260	O	GLN	285	72.963	104.160	24.588	
ATOM 2261	CB	GLN	285	70.469	105.901	25.832	
ATOM 2262	CG	GLN	285	70.240	107.113	24.923	
ATOM 2263	CD	GLN	285	68.814	107.182	24.410	
ATOM 2264	OE1	GLN	285	68.619	107.196	23.183	
ATOM 2265	NE2	GLN	285	67.836	107.227	25.308	
ATOM 2266	N	GLN	286	73.238	106.335	23.945	
ATOM 2267	CA	GLN	286	74.085	106.078	22.784	
ATOM 2268	C	GLN	286	74.991	107.299	22.463	
ATOM 2269	O	GLN	286	74.543	108.452	22.540	10
ATOM 2270	CB	GLN	286	73.183	105.737	21.594	
ATOM 2271	CG	GLN	286	72.224	106.866	21.280	
ATOM 2272	CD	GLN	286	71.482	106.658	19.973	
ATOM 2273	OE1	GLN	286	71.590	107.515	19.079	
ATOM 2274	NE2	GLN	286	70.742	105.561	19.851	
ATOM 2275	N	ILE	287	76.173	107.043	21.914	
ATOM 2276	CA	ILE	287	77.157	108.080	21.583	
ATOM 2277	C	ILE	287	77.136	108.419	20.057	
ATOM 2278	O	ILE	287	77.035	107.538	19.193	
ATOM 2279	CB	ILE	287	78.591	107.666	22.004	20
ATOM 2280	CG1	ILE	287	79.207	106.520	21.243	
ATOM 2281	CG2	ILE	287	78.655	107.422	23.525	
ATOM 2282	CD1	ILE	287	80.718	106.505	21.352	
ATOM 2283	N	ASP	288	77.376	109.714	19.730	
ATOM 2284	CA	ASP	288	77.419	110.256	18.373	
ATOM 2285	C	ASP	288	78.751	109.930	17.577	
ATOM 2286	O	ASP	288	78.618	109.493	16.435	
ATOM 2287	CB	ASP	288	77.128	111.762	18.351	
ATOM 2288	CG	ASP	288	75.755	112.066	18.787	
ATOM 2289	OD1	ASP	288	74.912	111.158	18.782	30
ATOM 2290	OD2	ASP	288	75.506	113.228	19.141	
ATOM 2291	N	ALA	289	79.951	110.315	18.073	
ATOM 2292	CA	ALA	289	81.264	110.148	17.424	
ATOM 2293	C	ALA	289	82.392	109.972	18.486	
ATOM 2294	O	ALA	289	82.152	110.031	19.698	
ATOM 2295	CB	ALA	289	81.487	111.397	16.542	
ATOM 2296	N	ALA	290	83.499	109.389	18.069	
ATOM 2297	CA	ALA	290	84.664	109.223	18.921	
ATOM 2298	C	ALA	290	85.985	109.402	18.123	
ATOM 2299	O	ALA	290	86.136	108.807	17.043	40
ATOM 2300	CB	ALA	290	84.576	107.833	19.572	
ATOM 2301	N	VAL	291	86.997	109.998	18.769	
ATOM 2302	CA	VAL	291	88.328	110.148	18.185	
ATOM 2303	C	VAL	291	89.461	110.044	19.263	
ATOM 2304	O	VAL	291	89.568	110.886	20.155	
ATOM 2305	CB	VAL	291	88.414	111.498	17.427	
ATOM 2306	CG1	VAL	291	88.118	112.693	18.327	
ATOM 2307	CG2	VAL	291	89.826	111.682	16.823	
ATOM 2308	N	TYR	292	90.404	109.158	18.997	
ATOM 2309	CA	TYR	292	91.602	108.958	19.800	50

ATOM 2310	C	TYR	292	92.673	109.987	19.370	
ATOM 2311	O	TYR	292	93.144	109.926	18.219	
ATOM 2312	CB	TYR	292	92.144	107.536	19.615	
ATOM 2313	CG	TYR	292	93.539	107.348	20.144	
ATOM 2314	CD1	TYR	292	93.807	107.377	21.506	
ATOM 2315	CD2	TYR	292	94.611	107.235	19.263	
ATOM 2316	CE1	TYR	292	95.098	107.309	21.976	
ATOM 2317	CE2	TYR	292	95.906	107.172	19.724	
ATOM 2318	CZ	TYR	292	96.140	107.213	21.087	
ATOM 2319	OH	TYR	292	97.404	107.174	21.618	10
ATOM 2320	N	LEU	293	92.902	110.980	20.240	
ATOM 2321	CA	LEU	293	93.870	112.009	19.872	
ATOM 2322	C	LEU	293	95.269	111.482	20.185	
ATOM 2323	O	LEU	293	95.464	111.007	21.327	
ATOM 2324	CB	LEU	293	93.490	113.342	20.575	
ATOM 2325	CG	LEU	293	94.404	114.477	20.115	
ATOM 2326	CD1	LEU	293	94.242	114.628	18.594	
ATOM 2327	CD2	LEU	293	94.051	115.758	20.889	
ATOM 2328	N	ARG	294	95.894	111.041	19.146	
ATOM 2329	CA	ARG	294	97.216	110.477	19.209	20
ATOM 2330	C	ARG	294	98.165	111.355	20.089	
ATOM 2331	O	ARG	294	98.875	110.789	20.916	
ATOM 2332	CB	ARG	294	97.695	110.318	17.764	
ATOM 2333	CG	ARG	294	98.724	109.289	17.444	
ATOM 2334	CD	ARG	294	100.091	109.438	17.880	
ATOM 2335	NE	ARG	294	100.546	108.348	18.758	
ATOM 2336	CZ	ARG	294	101.833	108.037	18.962	
ATOM 2337	NH1	ARG	294	102.213	106.766	18.793	
ATOM 2338	NH2	ARG	294	102.719	108.895	19.457	
ATOM 2339	N	GLU	295	98.280	112.655	19.791	30
ATOM 2340	CA	GLU	295	99.218	113.565	20.472	
ATOM 2341	C	GLU	295	99.006	113.695	22.035	
ATOM 2342	O	GLU	295	99.934	113.240	22.744	
ATOM 2343	CB	GLU	295	99.365	114.894	19.701	
ATOM 2344	CG	GLU	295	97.962	115.589	19.695	
ATOM 2345	CD	GLU	295	97.979	117.053	19.290	
ATOM 2346	OE1	GLU	295	98.508	117.372	18.223	
ATOM 2347	OE2	GLU	295	97.433	117.869	20.036	
ATOM 2348	N	PRO	296	97.941	114.280	22.665	
ATOM 2349	CA	PRO	296	97.866	114.162	24.067	40
ATOM 2350	C	PRO	296	97.417	112.719	24.561	
ATOM 2351	O	PRO	296	97.303	112.587	25.795	
ATOM 2352	CB	PRO	296	96.963	115.196	24.708	
ATOM 2353	CG	PRO	296	95.933	115.366	23.528	
ATOM 2354	CD	PRO	296	96.744	115.197	22.249	
ATOM 2355	N	GLN	297	97.168	111.690	23.745	
ATOM 2356	CA	GLN	297	96.736	110.376	24.243	
ATOM 2357	C	GLN	297	95.363	110.403	25.026	
ATOM 2358	O	GLN	297	95.204	109.635	25.974	
ATOM 2359	CB	GLN	297	97.829	109.782	25.101	50

ATOM 2360	CG	GLN	297	99.184	109.636	24.497	
ATOM 2361	CD	GLN	297	100.423	109.485	25.336	
ATOM 2362	OE1	GLN	297	100.520	109.472	26.568	
ATOM 2363	NE2	GLN	297	101.542	109.359	24.588	
ATOM 2364	N	LYS	298	94.327	111.103	24.483	
ATOM 2365	CA	LYS	298	92.962	111.169	24.989	
ATOM 2366	C	LYS	298	91.940	111.127	23.794	
ATOM 2367	O	LYS	298	91.919	112.024	22.948	
ATOM 2368	CB	LYS	298	92.642	112.344	25.863	
ATOM 2369	CG	LYS	298	93.662	112.845	26.810	10
ATOM 2370	CD	LYS	298	93.290	114.197	27.394	
ATOM 2371	CE	LYS	298	94.366	114.499	28.492	
ATOM 2372	NZ	LYS	298	93.933	115.797	29.128	
ATOM 2373	N	THR	299	90.898	110.323	24.045	
ATOM 2374	CA	THR	299	89.768	110.152	23.130	
ATOM 2375	C	THR	299	88.612	111.068	23.573	
ATOM 2376	O	THR	299	88.092	110.933	24.686	
ATOM 2377	CB	THR	299	89.281	108.672	23.066	
ATOM 2378	OG1	THR	299	90.205	107.710	22.565	
ATOM 2379	CG2	THR	299	87.966	108.533	22.206	20
ATOM 2380	N	LEU	300	88.112	111.874	22.647	
ATOM 2381	CA	LEU	300	86.967	112.740	22.871	
ATOM 2382	C	LEU	300	85.653	112.063	22.379	
ATOM 2383	O	LEU	300	85.520	111.670	21.207	
ATOM 2384	CB	LEU	300	87.185	114.113	22.252	
ATOM 2385	CG	LEU	300	88.390	114.953	22.779	
ATOM 2386	CD1	LEU	300	89.660	114.575	22.087	
ATOM 2387	CD2	LEU	300	88.170	116.426	22.482	
ATOM 2388	N	PHE	301	84.760	111.844	23.347	
ATOM 2389	CA	PHE	301	83.456	111.219	23.143	30
ATOM 2390	C	PHE	301	82.391	112.328	22.943	
ATOM 2391	O	PHE	301	81.908	112.936	23.900	
ATOM 2392	CB	PHE	301	83.101	110.267	24.298	
ATOM 2393	CG	PHE	301	83.971	109.059	24.447	
ATOM 2394	CD1	PHE	301	83.871	107.997	23.550	
ATOM 2395	CD2	PHE	301	84.950	108.999	25.437	
ATOM 2396	CE1	PHE	301	84.745	106.893	23.635	
ATOM 2397	CE2	PHE	301	85.823	107.900	25.527	
ATOM 2398	CZ	PHE	301	85.720	106.852	24.624	
ATOM 2399	N	PHE	302	81.746	112.221	21.783	40
ATOM 2400	CA	PHE	302	80.672	113.113	21.360	
ATOM 2401	C	PHE	302	79.279	112.499	21.627	
ATOM 2402	O	PHE	302	79.069	111.331	21.305	
ATOM 2403	CB	PHE	302	80.868	113.438	19.874	
ATOM 2404	CG	PHE	302	82.133	114.201	19.563	
ATOM 2405	CD1	PHE	302	82.178	115.604	19.681	
ATOM 2406	CD2	PHE	302	83.296	113.517	19.211	
ATOM 2407	CE1	PHE	302	83.367	116.304	19.456	
ATOM 2408	CE2	PHE	302	84.489	114.210	18.986	
ATOM 2409	CZ	PHE	302	84.521	115.606	19.111	50

ATOM 2410	N	VAL	303	78.606	113.061	22.614	
ATOM 2411	CA	VAL	303	77.245	112.719	22.972	
ATOM 2412	C	VAL	303	76.383	114.025	22.910	
ATOM 2413	O	VAL	303	76.287	114.773	23.891	
ATOM 2414	CB	VAL	303	77.198	112.014	24.354	
ATOM 2415	CG1	VAL	303	75.765	111.716	24.832	
ATOM 2416	CG2	VAL	303	77.967	110.689	24.347	
ATOM 2417	N	GLY	304	75.548	114.155	21.855	
ATOM 2418	CA	GLY	304	74.768	115.377	21.720	
ATOM 2419	C	GLY	304	75.789	116.528	21.603	10
ATOM 2420	O	GLY	304	76.373	116.676	20.519	
ATOM 2421	N	ASP	305	75.611	117.541	22.434	
ATOM 2422	CA	ASP	305	76.429	118.743	22.490	
ATOM 2423	C	ASP	305	77.526	118.708	23.629	
ATOM 2424	O	ASP	305	77.790	119.770	24.205	
ATOM 2425	CB	ASP	305	75.443	119.911	22.671	
ATOM 2426	CG	ASP	305	74.533	119.941	23.886	
ATOM 2427	OD1	ASP	305	74.828	119.372	24.932	
ATOM 2428	OD2	ASP	305	73.482	120.558	23.765	
ATOM 2429	N	GLU	306	77.956	117.532	24.161	20
ATOM 2430	CA	GLU	306	78.952	117.367	25.158	
ATOM 2431	C	GLU	306	80.198	116.570	24.640	
ATOM 2432	O	GLU	306	80.073	115.472	24.057	
ATOM 2433	CB	GLU	306	78.306	116.520	26.246	
ATOM 2434	CG	GLU	306	77.004	117.070	26.773	
ATOM 2435	CD	GLU	306	77.114	117.781	28.101	
ATOM 2436	OE1	GLU	306	77.423	118.994	28.114	
ATOM 2437	OE2	GLU	306	76.859	117.127	29.134	
ATOM 2438	N	TYR	307	81.412	117.161	24.814	
ATOM 2439	CA	TYR	307	82.649	116.439	24.455	30
ATOM 2440	C	TYR	307	83.221	115.849	25.802	
ATOM 2441	O	TYR	307	83.454	116.596	26.779	
ATOM 2442	CB	TYR	307	83.743	117.280	23.854	
ATOM 2443	CG	TYR	307	84.411	118.261	24.772	
ATOM 2444	CD1	TYR	307	85.520	117.757	25.450	
ATOM 2445	CD2	TYR	307	84.042	119.581	25.012	
ATOM 2446	CE1	TYR	307	86.231	118.542	26.354	
ATOM 2447	CE2	TYR	307	84.732	120.387	25.918	
ATOM 2448	CZ	TYR	307	85.821	119.849	26.612	
ATOM 2449	OH	TYR	307	86.511	120.565	27.592	40
ATOM 2450	N	TYR	308	83.502	114.550	25.791	
ATOM 2451	CA	TYR	308	83.945	113.830	26.976	
ATOM 2452	C	TYR	308	85.429	113.407	26.843	
ATOM 2453	O	TYR	308	85.762	112.507	26.052	
ATOM 2454	CB	TYR	308	83.088	112.567	27.013	
ATOM 2455	CG	TYR	308	81.641	112.776	27.356	
ATOM 2456	CD1	TYR	308	81.236	113.444	28.515	
ATOM 2457	CD2	TYR	308	80.667	112.363	26.457	
ATOM 2458	CE1	TYR	308	79.894	113.700	28.763	
ATOM 2459	CE2	TYR	308	79.328	112.618	26.690	50

ATOM 2460	CZ	TYR	308	78.947	113.287	27.847	
ATOM 2461	OH	TYR	308	77.615	113.553	28.056	
ATOM 2462	N	SER	309	86.282	113.943	27.715	
ATOM 2463	CA	SER	309	87.708	113.664	27.587	
ATOM 2464	C	SER	309	88.168	112.515	28.515	
ATOM 2465	O	SER	309	88.492	112.736	29.662	
ATOM 2466	CB	SER	309	88.465	114.963	27.851	
ATOM 2467	OG	SER	309	87.931	116.144	27.224	
ATOM 2468	N	TYR	310	88.526	111.465	27.841	
ATOM 2469	CA	TYR	310	88.920	110.192	28.374	10
ATOM 2470	C	TYR	310	90.435	109.931	28.332	
ATOM 2471	O	TYR	310	91.046	110.055	27.265	
ATOM 2472	CB	TYR	310	88.220	109.162	27.482	
ATOM 2473	CG	TYR	310	88.550	107.736	27.820	
ATOM 2474	CD1	TYR	310	88.128	107.165	29.007	
ATOM 2475	CD2	TYR	310	89.289	106.960	26.934	
ATOM 2476	CE1	TYR	310	88.427	105.847	29.314	
ATOM 2477	CE2	TYR	310	89.592	105.643	27.222	
ATOM 2478	CZ	TYR	310	89.159	105.085	28.414	
ATOM 2479	OH	TYR	310	89.449	103.768	28.700	20
ATOM 2480	N	ASP	311	90.963	109.546	29.479	
ATOM 2481	CA	ASP	311	92.319	109.187	29.527	
ATOM 2482	C	ASP	311	92.386	107.683	29.078	
ATOM 2483	O	ASP	311	91.897	106.786	29.764	
ATOM 2484	CB	ASP	311	92.971	109.409	30.903	
ATOM 2485	CG	ASP	311	94.442	109.022	30.934	
ATOM 2486	OD1	ASP	311	95.137	109.185	29.904	
ATOM 2487	OD2	ASP	311	94.917	108.567	32.011	
ATOM 2488	N	GLU	312	92.739	107.525	27.790	
ATOM 2489	CA	GLU	312	92.794	106.247	27.068	30
ATOM 2490	C	GLU	312	93.696	105.206	27.816	
ATOM 2491	O	GLU	312	93.207	104.084	28.002	
ATOM 2492	CB	GLU	312	93.272	106.600	25.630	
ATOM 2493	CG	GLU	312	93.031	105.464	24.659	
ATOM 2494	CD	GLU	312	91.587	105.047	24.659	
ATOM 2495	OE1	GLU	312	90.712	105.901	24.355	
ATOM 2496	OE2	GLU	312	91.339	103.860	24.983	
ATOM 2497	N	ARG	313	94.902	105.574	28.295	
ATOM 2498	CA	ARG	313	95.756	104.728	29.079	
ATOM 2499	C	ARG	313	95.098	104.170	30.396	40
ATOM 2500	O	ARG	313	95.178	102.953	30.569	
ATOM 2501	CB	ARG	313	97.066	105.379	29.436	
ATOM 2502	CG	ARG	313	97.262	106.828	29.190	
ATOM 2503	CD	ARG	313	98.468	107.402	29.828	
ATOM 2504	NE	ARG	313	99.589	106.501	30.006	
ATOM 2505	CZ	ARG	313	100.779	106.671	29.384	
ATOM 2506	NH1	ARG	313	100.895	107.696	28.524	
ATOM 2507	NH2	ARG	313	101.792	105.870	29.682	
ATOM 2508	N	LYS	314	94.624	105.007	31.365	
ATOM 2509	CA	LYS	314	94.112	104.444	32.637	50

ATOM 2510	C	LYS	314	92.562	104.456	32.788	
ATOM 2511	O	LYS	314	92.096	104.099	33.885	
ATOM 2512	CB	LYS	314	94.649	105.108	33.847	
ATOM 2513	CG	LYS	314	95.622	106.142	34.228	
ATOM 2514	CD	LYS	314	95.155	106.974	35.427	
ATOM 2515	CE	LYS	314	96.208	107.872	36.026	
ATOM 2516	NZ	LYS	314	95.599	109.019	36.760	
ATOM 2517	N	ARG	315	91.736	104.583	31.715	
ATOM 2518	CA	ARG	315	90.285	104.701	31.773	
ATOM 2519	C	ARG	315	89.765	105.744	32.794	10
ATOM 2520	O	ARG	315	88.591	105.647	33.217	
ATOM 2521	CB	ARG	315	89.544	103.378	32.047	
ATOM 2522	CG	ARG	315	90.358	102.208	32.475	
ATOM 2523	CD	ARG	315	89.538	101.086	32.985	
ATOM 2524	NE	ARG	315	88.210	100.956	32.423	
ATOM 2525	CZ	ARG	315	87.823	99.891	31.683	
ATOM 2526	NH1	ARG	315	88.738	98.943	31.423	
ATOM 2527	NH2	ARG	315	86.558	99.789	31.296	
ATOM 2528	N	LYS	316	90.441	106.886	32.882	
ATOM 2529	CA	LYS	316	90.042	107.897	33.821	20
ATOM 2530	C	LYS	316	89.450	109.025	33.027	
ATOM 2531	O	LYS	316	90.191	109.807	32.422	
ATOM 2532	CB	LYS	316	91.184	108.447	34.622	
ATOM 2533	CG	LYS	316	91.000	108.675	36.076	
ATOM 2534	CD	LYS	316	91.315	110.148	36.443	
ATOM 2535	CE	LYS	316	92.307	110.337	37.614	
ATOM 2536	NZ	LYS	316	92.785	109.075	38.253	
ATOM 2537	N	MET	317	88.126	109.108	33.088	
ATOM 2538	CA	MET	317	87.513	110.217	32.432	
ATOM 2539	C	MET	317	88.078	111.490	33.159	30
ATOM 2540	O	MET	317	87.776	111.703	34.339	
ATOM 2541	CB	MET	317	86.028	109.984	32.564	
ATOM 2542	CG	MET	317	85.313	109.591	31.333	
ATOM 2543	SD	MET	317	85.490	110.695	29.924	
ATOM 2544	CE	MET	317	84.395	109.901	28.784	
ATOM 2545	N	GLU	318	88.588	112.426	32.401	
ATOM 2546	CA	GLU	318	89.243	113.650	32.882	
ATOM 2547	C	GLU	318	88.285	114.392	33.860	
ATOM 2548	O	GLU	318	87.084	114.419	33.523	
ATOM 2549	CB	GLU	318	89.551	114.556	31.704	40
ATOM 2550	CG	GLU	318	90.836	114.316	30.909	
ATOM 2551	CD	GLU	318	91.844	113.628	31.779	
ATOM 2552	OE1	GLU	318	92.367	112.561	31.534	
ATOM 2553	OE2	GLU	318	92.000	114.305	32.814	
ATOM 2554	N	LYS	319	88.800	115.224	34.812	
ATOM 2555	CA	LYS	319	87.904	115.838	35.805	
ATOM 2556	C	LYS	319	86.600	116.403	35.134	
ATOM 2557	O	LYS	319	86.567	117.550	34.648	
ATOM 2558	CB	LYS	319	88.665	116.949	36.520	
ATOM 2559	CG	LYS	319	89.639	116.522	37.601	50

ATOM 2560	CD	LYS	319	90.240	117.626	38.506	
ATOM 2561	CE	LYS	319	91.452	117.039	39.203	
ATOM 2562	NZ	LYS	319	92.023	118.010	40.111	
ATOM 2563	N	ASP	320	85.493	115.709	35.523	
ATOM 2564	CA	ASP	320	84.102	115.996	35.158	
ATOM 2565	C	ASP	320	83.809	115.813	33.683	
ATOM 2566	O	ASP	320	82.891	115.034	33.410	
ATOM 2567	CB	ASP	320	83.668	117.371	35.683	
ATOM 2568	CG	ASP	320	83.819	117.572	37.145	
ATOM 2569	OD1	ASP	320	84.226	118.671	37.569	10
ATOM 2570	OD2	ASP	320	83.915	116.572	37.885	
ATOM 2571	N	TYR	321	84.383	116.684	32.871	
ATOM 2572	CA	TYR	321	84.301	116.623	31.410	
ATOM 2573	C	TYR	321	82.889	116.722	30.687	
ATOM 2574	O	TYR	321	82.953	116.373	29.486	
ATOM 2575	CB	TYR	321	84.933	115.246	31.090	
ATOM 2576	CG	TYR	321	84.251	113.939	31.273	
ATOM 2577	CD1	TYR	321	84.396	113.154	32.417	
ATOM 2578	CD2	TYR	321	83.387	113.466	30.276	
ATOM 2579	CE1	TYR	321	83.712	111.947	32.566	20
ATOM 2580	CE2	TYR	321	82.705	112.261	30.400	
ATOM 2581	CZ	TYR	321	82.873	111.506	31.552	
ATOM 2582	OH	TYR	321	82.168	110.314	31.599	
ATOM 2583	N	PRO	322	81.630	116.982	31.181	
ATOM 2584	CA	PRO	322	80.548	117.082	30.205	
ATOM 2585	C	PRO	322	80.566	118.473	29.603	
ATOM 2586	O	PRO	322	79.887	119.396	30.102	
ATOM 2587	CB	PRO	322	79.202	116.930	30.969	
ATOM 2588	CG	PRO	322	79.692	116.113	32.160	
ATOM 2589	CD	PRO	322	80.999	116.752	32.528	30
ATOM 2590	N	LYS	323	81.594	118.684	28.875	
ATOM 2591	CA	LYS	323	81.804	119.970	28.332	
ATOM 2592	C	LYS	323	80.946	120.194	27.046	
ATOM 2593	O	LYS	323	80.032	119.364	26.784	
ATOM 2594	CB	LYS	323	83.249	120.185	28.080	
ATOM 2595	CG	LYS	323	84.067	120.308	29.332	
ATOM 2596	CD	LYS	323	83.222	120.903	30.458	
ATOM 2597	CE	LYS	323	84.056	121.326	31.648	
ATOM 2598	NZ	LYS	323	84.445	122.770	31.565	
ATOM 2599	N	ASN	324	80.756	121.477	26.802	40
ATOM 2600	CA	ASN	324	80.016	121.945	25.670	
ATOM 2601	C	ASN	324	80.888	121.808	24.399	
ATOM 2602	O	ASN	324	82.048	122.258	24.381	
ATOM 2603	CB	ASN	324	79.570	123.386	25.917	
ATOM 2604	CG	ASN	324	78.689	123.444	27.173	
ATOM 2605	OD1	ASN	324	77.664	122.742	27.297	
ATOM 2606	ND2	ASN	324	79.166	124.170	28.177	
ATOM 2607	N	THR	325	80.399	121.037	23.423	
ATOM 2608	CA	THR	325	81.098	120.926	22.126	
ATOM 2609	C	THR	325	81.408	122.375	21.556	50

ATOM 2610	O	THR	325	82.518	122.549	21.051	
ATOM 2611	CB	THR	325	80.324	119.985	21.141	
ATOM 2612	OG1	THR	325	80.223	118.618	21.683	
ATOM 2613	CG2	THR	325	81.084	119.902	19.769	
ATOM 2614	N	GLU	326	80.541	123.417	21.739	
ATOM 2615	CA	GLU	326	80.768	124.806	21.350	
ATOM 2616	C	GLU	326	82.094	125.385	21.969	
ATOM 2617	O	GLU	326	82.855	125.977	21.186	
ATOM 2618	CB	GLU	326	79.495	125.577	21.751	
ATOM 2619	CG	GLU	326	79.626	127.094	21.595	10
ATOM 2620	CD	GLU	326	78.649	127.934	22.381	
ATOM 2621	OE1	GLU	326	77.471	127.431	22.188	
ATOM 2622	OE2	GLU	326	78.985	128.935	23.074	
ATOM 2623	N	GLU	327	82.287	125.357	23.290	
ATOM 2624	CA	GLU	327	83.501	125.782	23.959	
ATOM 2625	C	GLU	327	84.814	125.009	23.508	
ATOM 2626	O	GLU	327	85.762	125.687	23.082	
ATOM 2627	CB	GLU	327	83.270	125.688	25.508	
ATOM 2628	CG	GLU	327	83.241	124.259	26.141	
ATOM 2629	CD	GLU	327	83.323	124.223	27.707	20
ATOM 2630	OE1	GLU	327	82.306	124.516	28.414	
ATOM 2631	OE2	GLU	327	84.419	123.863	28.224	
ATOM 2632	N	GLU	328	84.949	123.660	23.646	
ATOM 2633	CA	GLU	328	86.155	122.953	23.110	
ATOM 2634	C	GLU	328	86.453	123.116	21.569	
ATOM 2635	O	GLU	328	87.514	123.668	21.226	
ATOM 2636	CB	GLU	328	86.285	121.543	23.552	
ATOM 2637	CG	GLU	328	87.103	121.261	24.764	
ATOM 2638	CD	GLU	328	88.561	121.745	24.609	
ATOM 2639	OE1	GLU	328	89.405	120.994	24.025	30
ATOM 2640	OE2	GLU	328	88.859	122.872	25.102	
ATOM 2641	N	PHE	329	85.582	122.677	20.670	
ATOM 2642	CA	PHE	329	85.800	122.758	19.249	
ATOM 2643	C	PHE	329	84.903	123.916	18.748	
ATOM 2644	O	PHE	329	83.740	123.725	18.354	
ATOM 2645	CB	PHE	329	85.477	121.442	18.525	
ATOM 2646	CG	PHE	329	86.292	120.324	19.073	
ATOM 2647	CD1	PHE	329	87.591	120.126	18.605	
ATOM 2648	CD2	PHE	329	85.796	119.487	20.063	
ATOM 2649	CE1	PHE	329	88.385	119.118	19.110	40
ATOM 2650	CE2	PHE	329	86.584	118.473	20.577	
ATOM 2651	CZ	PHE	329	87.887	118.289	20.098	
ATOM 2652	N	SER	330	85.597	125.020	18.509	
ATOM 2653	CA	SER	330	84.990	126.275	18.128	
ATOM 2654	C	SER	330	84.752	126.301	16.596	
ATOM 2655	O	SER	330	85.727	126.294	15.832	
ATOM 2656	CB	SER	330	85.888	127.407	18.633	
ATOM 2657	OG	SER	330	87.275	127.273	18.411	
ATOM 2658	N	GLY	331	83.525	126.543	16.257	
ATOM 2659	CA	GLY	331	83.046	126.722	14.880	50

ATOM 2660	C	GLY	331	82.198	125.531	14.330	
ATOM 2661	O	GLY	331	81.480	125.746	13.354	
ATOM 2662	N	VAL	332	82.285	124.275	14.866	
ATOM 2663	CA	VAL	332	81.450	123.222	14.275	
ATOM 2664	C	VAL	332	79.927	123.460	14.558	
ATOM 2665	O	VAL	332	79.321	124.131	13.702	
ATOM 2666	CB	VAL	332	81.957	121.804	14.572	
ATOM 2667	CG1	VAL	332	83.454	121.750	14.725	
ATOM 2668	CG2	VAL	332	81.430	121.257	15.916	
ATOM 2669	N	ASN	333	79.362	123.073	15.697	10
ATOM 2670	CA	ASN	333	77.972	123.271	16.013	
ATOM 2671	C	ASN	333	77.706	122.488	17.361	
ATOM 2672	O	ASN	333	78.531	122.573	18.292	
ATOM 2673	CB	ASN	333	77.090	122.846	14.791	
ATOM 2674	CG	ASN	333	75.598	123.282	14.865	
ATOM 2675	OD1	ASN	333	75.293	124.471	14.855	
ATOM 2676	ND2	ASN	333	74.681	122.300	14.907	
ATOM 2677	N	GLY	334	76.426	122.330	17.650	
ATOM 2678	CA	GLY	334	75.955	121.572	18.754	
ATOM 2679	C	GLY	334	76.245	120.030	18.655	20
ATOM 2680	O	GLY	334	76.822	119.538	19.613	
ATOM 2681	N	GLN	335	76.038	119.349	17.512	
ATOM 2682	CA	GLN	335	76.186	117.911	17.367	
ATOM 2683	C	GLN	335	77.079	117.515	16.159	
ATOM 2684	O	GLN	335	76.963	118.042	15.042	
ATOM 2685	CB	GLN	335	74.755	117.324	17.214	
ATOM 2686	CG	GLN	335	74.808	115.771	17.113	
ATOM 2687	CD	GLN	335	73.403	115.278	16.866	
ATOM 2688	OE1	GLN	335	72.500	115.604	17.588	
ATOM 2689	NE2	GLN	335	73.256	114.581	15.782	30
ATOM 2690	N	ILE	336	77.844	116.434	16.378	
ATOM 2691	CA	ILE	336	78.703	115.789	15.383	
ATOM 2692	C	ILE	336	78.233	114.311	15.052	
ATOM 2693	O	ILE	336	78.059	113.470	15.943	
ATOM 2694	CB	ILE	336	80.206	115.683	15.849	
ATOM 2695	CG1	ILE	336	80.770	116.985	16.326	
ATOM 2696	CG2	ILE	336	81.145	115.023	14.768	
ATOM 2697	CD1	ILE	336	81.336	118.165	15.451	
ATOM 2698	N	ASP	337	78.096	114.083	13.776	
ATOM 2699	CA	ASP	337	77.770	112.787	13.142	40
ATOM 2700	C	ASP	337	78.975	111.779	13.175	
ATOM 2701	O	ASP	337	78.795	110.721	13.779	
ATOM 2702	CB	ASP	337	77.353	113.079	11.690	
ATOM 2703	CG	ASP	337	75.875	113.373	11.523	
ATOM 2704	OD1	ASP	337	75.225	113.659	12.540	
ATOM 2705	OD2	ASP	337	75.354	113.341	10.390	
ATOM 2706	N	ALA	338	80.204	112.138	12.730	
ATOM 2707	CA	ALA	338	81.414	111.342	12.781	
ATOM 2708	C	ALA	338	82.690	112.258	12.887	
ATOM 2709	O	ALA	338	82.653	113.459	12.653	50

ATOM 2710	CB	ALA	338	81.438	110.483	11.504	
ATOM 2711	N	ALA	339	83.773	111.720	13.414	
ATOM 2712	CA	ALA	339	85.048	112.416	13.531	
ATOM 2713	C	ALA	339	86.228	111.420	13.452	
ATOM 2714	O	ALA	339	86.270	110.442	14.221	
ATOM 2715	CB	ALA	339	85.022	113.181	14.871	
ATOM 2716	N	VAL	340	87.316	111.862	12.830	
ATOM 2717	CA	VAL	340	88.579	111.136	12.683	
ATOM 2718	C	VAL	340	89.797	112.079	12.902	
ATOM 2719	O	VAL	340	89.656	113.210	13.372	10
ATOM 2720	CB	VAL	340	88.665	110.577	11.279	
ATOM 2721	CG1	VAL	340	87.779	109.419	11.054	
ATOM 2722	CG2	VAL	340	88.500	111.661	10.222	
ATOM 2723	N	GLU	341	90.982	111.462	12.982	
ATOM 2724	CA	GLU	341	92.221	112.200	13.080	
ATOM 2725	C	GLU	341	93.183	111.842	11.900	
ATOM 2726	O	GLU	341	94.112	111.053	12.123	
ATOM 2727	CB	GLU	341	92.857	111.878	14.438	
ATOM 2728	CG	GLU	341	94.022	112.812	14.701	
ATOM 2729	CD	GLU	341	94.951	112.393	15.835	20
ATOM 2730	OE1	GLU	341	95.072	111.194	16.113	
ATOM 2731	OE2	GLU	341	95.591	113.270	16.419	
ATOM 2732	N	LEU	342	93.308	112.740	10.914	
ATOM 2733	CA	LEU	342	94.105	112.444	9.717	
ATOM 2734	C	LEU	342	95.055	113.623	9.410	
ATOM 2735	O	LEU	342	94.593	114.755	9.152	
ATOM 2736	CB	LEU	342	93.185	112.143	8.516	
ATOM 2737	CG	LEU	342	93.958	111.599	7.308	
ATOM 2738	CD1	LEU	342	94.985	110.521	7.598	
ATOM 2739	CD2	LEU	342	93.118	111.294	6.135	30
ATOM 2740	N	ASN	343	96.318	113.249	9.140	
ATOM 2741	CA	ASN	343	97.435	114.198	8.906	
ATOM 2742	C	ASN	343	97.531	115.258	10.060	
ATOM 2743	O	ASN	343	98.046	116.360	9.803	
ATOM 2744	CB	ASN	343	97.304	114.882	7.542	
ATOM 2745	CG	ASN	343	96.921	114.045	6.356	
ATOM 2746	OD1	ASN	343	95.752	113.767	6.063	
ATOM 2747	ND2	ASN	343	97.910	113.666	5.558	
ATOM 2748	N	GLY	344	97.351	114.874	11.324	
ATOM 2749	CA	GLY	344	97.403	115.782	12.480	40
ATOM 2750	C	GLY	344	96.079	116.619	12.735	
ATOM 2751	O	GLY	344	95.952	117.119	13.858	
ATOM 2752	N	TYR	345	95.138	116.748	11.772	
ATOM 2753	CA	TYR	345	93.900	117.522	11.875	
ATOM 2754	C	TYR	345	92.664	116.593	12.029	
ATOM 2755	O	TYR	345	92.422	115.740	11.168	
ATOM 2756	CB	TYR	345	93.746	118.364	10.621	
ATOM 2757	CG	TYR	345	94.876	119.303	10.383	
ATOM 2758	CD1	TYR	345	95.053	120.379	11.216	
ATOM 2759	CD2	TYR	345	95.813	119.133	9.311	50

ATOM 2760	CE1	TYR	345	96.104	121.329	11.171	
ATOM 2761	CE2	TYR	345	96.899	120.074	9.184	
ATOM 2762	CZ	TYR	345	97.014	121.127	10.098	
ATOM 2763	OH	TYR	345	98.033	122.001	10.002	
ATOM 2764	N	ILE	346	91.751	116.981	12.925	
ATOM 2765	CA	ILE	346	90.467	116.303	13.147	
ATOM 2766	C	ILE	346	89.467	116.622	12.008	
ATOM 2767	O	ILE	346	89.161	117.801	11.769	
ATOM 2768	CB	ILE	346	89.885	116.699	14.516	
ATOM 2769	CG1	ILE	346	90.828	116.288	15.626	10
ATOM 2770	CG2	ILE	346	88.476	116.046	14.737	
ATOM 2771	CD1	ILE	346	90.330	116.636	17.030	
ATOM 2772	N	TYR	347	88.739	115.587	11.582	
ATOM 2773	CA	TYR	347	87.697	115.764	10.594	
ATOM 2774	C	TYR	347	86.312	115.433	11.174	
ATOM 2775	O	TYR	347	85.845	114.287	11.207	
ATOM 2776	CB	TYR	347	88.034	114.901	9.439	
ATOM 2777	CG	TYR	347	89.139	115.126	8.511	
ATOM 2778	CD1	TYR	347	90.355	114.574	8.882	
ATOM 2779	CD2	TYR	347	89.038	115.870	7.338	20
ATOM 2780	CE1	TYR	347	91.480	114.746	8.091	
ATOM 2781	CE2	TYR	347	90.162	116.059	6.542	
ATOM 2782	CZ	TYR	347	91.379	115.487	6.927	
ATOM 2783	OH	TYR	347	92.531	115.642	6.162	
ATOM 2784	N	PHE	348	85.618	116.543	11.470	
ATOM 2785	CA	PHE	348	84.325	116.588	12.101	
ATOM 2786	C	PHE	348	83.286	116.619	10.972	
ATOM 2787	O	PHE	348	83.116	117.628	10.274	
ATOM 2788	CB	PHE	348	84.261	117.927	12.810	
ATOM 2789	CG	PHE	348	84.782	117.936	14.177	30
ATOM 2790	CD1	PHE	348	84.160	117.290	15.246	
ATOM 2791	CD2	PHE	348	86.003	118.573	14.399	
ATOM 2792	CE1	PHE	348	84.728	117.269	16.519	
ATOM 2793	CE2	PHE	348	86.574	118.579	15.669	
ATOM 2794	CZ	PHE	348	85.944	117.925	16.727	
ATOM 2795	N	PHE	349	82.383	115.692	11.053	
ATOM 2796	CA	PHE	349	81.384	115.452	10.083	
ATOM 2797	C	PHE	349	79.909	115.600	10.612	
ATOM 2798	O	PHE	349	79.684	115.180	11.745	
ATOM 2799	CB	PHE	349	81.612	113.945	9.797	40
ATOM 2800	CG	PHE	349	82.715	113.666	8.781	
ATOM 2801	CD1	PHE	349	84.002	113.543	9.279	
ATOM 2802	CD2	PHE	349	82.543	113.702	7.412	
ATOM 2803	CE1	PHE	349	85.092	113.477	8.411	
ATOM 2804	CE2	PHE	349	83.631	113.636	6.559	
ATOM 2805	CZ	PHE	349	84.897	113.530	7.052	
ATOM 2806	N	SER	350	79.163	116.588	10.107	
ATOM 2807	CA	SER	350	77.741	116.766	10.440	
ATOM 2808	C	SER	350	76.907	117.003	9.138	
ATOM 2809	O	SER	350	77.011	118.106	8.564	50

ATOM 2810	CB	SER	350	77.605	117.932	11.429	
ATOM 2811	OG	SER	350	78.112	119.182	10.939	
ATOM 2812	N	GLY	351	76.116	116.022	8.671	
ATOM 2813	CA	GLY	351	75.366	116.270	7.397	
ATOM 2814	C	GLY	351	76.419	116.171	6.211	
ATOM 2815	O	GLY	351	77.454	115.502	6.495	
ATOM 2816	N	PRO	352	76.134	116.380	4.898	
ATOM 2817	CA	PRO	352	77.252	116.367	4.050	
ATOM 2818	C	PRO	352	78.303	117.515	4.329	
ATOM 2819	O	PRO	352	79.045	117.821	3.380	10
ATOM 2820	CB	PRO	352	76.791	116.490	2.571	
ATOM 2821	CG	PRO	352	75.699	117.576	2.828	
ATOM 2822	CD	PRO	352	75.062	117.214	4.154	
ATOM 2823	N	LYS	353	78.269	118.349	5.414	
ATOM 2824	CA	LYS	353	79.360	119.352	5.583	
ATOM 2825	C	LYS	353	80.461	118.843	6.566	
ATOM 2826	O	LYS	353	80.133	118.358	7.657	
ATOM 2827	CB	LYS	353	78.738	120.657	6.083	
ATOM 2828	CG	LYS	353	77.934	120.835	7.351	
ATOM 2829	CD	LYS	353	77.289	122.238	7.441	20
ATOM 2830	CE	LYS	353	75.818	122.339	7.775	
ATOM 2831	NZ	LYS	353	74.970	122.238	6.532	
ATOM 2832	N	THR	354	81.760	119.123	6.320	
ATOM 2833	CA	THR	354	82.849	118.644	7.154	
ATOM 2834	C	THR	354	83.910	119.735	7.309	
ATOM 2835	O	THR	354	84.243	120.447	6.368	
ATOM 2836	CB	THR	354	83.595	117.427	6.580	
ATOM 2837	OG1	THR	354	82.858	116.226	6.462	
ATOM 2838	CG2	THR	354	84.511	116.860	7.729	
ATOM 2839	N	TYR	355	84.336	119.891	8.549	30
ATOM 2840	CA	TYR	355	85.303	120.907	8.963	
ATOM 2841	C	TYR	355	86.676	120.302	9.306	
ATOM 2842	O	TYR	355	86.782	119.420	10.180	
ATOM 2843	CB	TYR	355	84.746	121.598	10.221	
ATOM 2844	CG	TYR	355	83.282	121.987	10.197	
ATOM 2845	CD1	TYR	355	82.288	121.041	10.508	
ATOM 2846	CD2	TYR	355	82.892	123.309	9.978	
ATOM 2847	CE1	TYR	355	80.953	121.401	10.613	
ATOM 2848	CE2	TYR	355	81.560	123.691	10.084	
ATOM 2849	CZ	TYR	355	80.591	122.733	10.404	40
ATOM 2850	OH	TYR	355	79.262	123.104	10.517	
ATOM 2851	N	LYS	356	87.687	120.813	8.638	
ATOM 2852	CA	LYS	356	89.065	120.507	8.831	
ATOM 2853	C	LYS	356	89.505	121.378	9.998	
ATOM 2854	O	LYS	356	89.715	122.577	9.876	
ATOM 2855	CB	LYS	356	89.732	120.831	7.539	
ATOM 2856	CG	LYS	356	91.154	121.035	7.190	
ATOM 2857	CD	LYS	356	91.451	120.843	5.685	
ATOM 2858	CE	LYS	356	92.919	120.791	5.313	
ATOM 2859	NZ	LYS	356	93.605	119.492	5.489	50

ATOM 2860	N	TYR	357	89.857	120.720	11.061	
ATOM 2861	CA	TYR	357	90.144	121.341	12.358	
ATOM 2862	C	TYR	357	91.614	121.315	12.774	
ATOM 2863	O	TYR	357	92.245	120.249	12.787	
ATOM 2864	CB	TYR	357	89.326	120.511	13.382	
ATOM 2865	CG	TYR	357	89.290	121.237	14.746	
ATOM 2866	CD1	TYR	357	90.304	120.925	15.642	
ATOM 2867	CD2	TYR	357	88.334	122.212	15.053	
ATOM 2868	CE1	TYR	357	90.447	121.663	16.837	
ATOM 2869	CE2	TYR	357	88.393	122.887	16.291	10
ATOM 2870	CZ	TYR	357	89.468	122.616	17.147	
ATOM 2871	OH	TYR	357	89.625	123.334	18.294	
ATOM 2872	N	ASP	358	92.078	122.487	13.208	
ATOM 2873	CA	ASP	358	93.439	122.573	13.738	
ATOM 2874	C	ASP	358	93.345	122.361	15.289	
ATOM 2875	O	ASP	358	92.759	123.171	16.006	
ATOM 2876	CB	ASP	358	94.144	123.879	13.345	
ATOM 2877	CG	ASP	358	95.590	123.920	13.827	
ATOM 2878	OD1	ASP	358	95.845	124.162	15.019	
ATOM 2879	OD2	ASP	358	96.495	123.701	12.991	20
ATOM 2880	N	THR	359	93.794	121.153	15.732	
ATOM 2881	CA	THR	359	93.853	120.688	17.148	
ATOM 2882	C	THR	359	94.604	121.692	18.027	
ATOM 2883	O	THR	359	94.076	121.953	19.114	
ATOM 2884	CB	THR	359	94.349	119.245	17.319	
ATOM 2885	OG1	THR	359	93.435	118.284	16.753	
ATOM 2886	CG2	THR	359	94.385	118.873	18.839	
ATOM 2887	N	GLU	360	95.862	122.054	17.736	
ATOM 2888	CA	GLU	360	96.556	123.036	18.593	
ATOM 2889	C	GLU	360	95.944	124.466	18.581	30
ATOM 2890	O	GLU	360	95.587	124.915	19.674	
ATOM 2891	CB	GLU	360	97.973	123.145	18.102	
ATOM 2892	CG	GLU	360	98.963	122.044	17.922	
ATOM 2893	CD	GLU	360	100.239	122.091	18.670	
ATOM 2894	OE1	GLU	360	100.182	122.798	19.722	
ATOM 2895	OE2	GLU	360	101.312	121.564	18.352	
ATOM 2896	N	LYS	361	95.839	125.131	17.454	
ATOM 2897	CA	LYS	361	95.328	126.495	17.474	
ATOM 2898	C	LYS	361	93.781	126.594	17.746	
ATOM 2899	O	LYS	361	93.316	127.743	17.906	40
ATOM 2900	CB	LYS	361	95.665	127.117	16.112	
ATOM 2901	CG	LYS	361	97.160	127.331	15.860	
ATOM 2902	CD	LYS	361	97.918	128.198	16.877	
ATOM 2903	CE	LYS	361	99.429	127.953	16.717	
ATOM 2904	NZ	LYS	361	100.236	128.640	17.727	
ATOM 2905	N	GLU	362	93.000	125.484	17.833	
ATOM 2906	CA	GLU	362	91.570	125.600	18.073	
ATOM 2907	C	GLU	362	90.800	126.460	16.984	
ATOM 2908	O	GLU	362	89.923	127.230	17.378	
ATOM 2909	CB	GLU	362	91.325	126.151	19.485	50

ATOM 2910	CG	GLU	362	91.923	125.307	20.578	
ATOM 2911	CD	GLU	362	92.162	126.057	21.899	
ATOM 2912	OE1	GLU	362	93.349	126.116	22.406	
ATOM 2913	OE2	GLU	362	91.176	126.621	22.511	
ATOM 2914	N	ASP	363	90.989	126.259	15.658	
ATOM 2915	CA	ASP	363	90.268	126.980	14.593	
ATOM 2916	C	ASP	363	90.000	126.081	13.359	
ATOM 2917	O	ASP	363	90.966	125.517	12.798	
ATOM 2918	CB	ASP	363	91.100	128.220	14.205	
ATOM 2919	CG	ASP	363	90.175	129.373	13.691	10
ATOM 2920	OD1	ASP	363	89.796	130.215	14.506	
ATOM 2921	OD2	ASP	363	89.835	129.243	12.473	
ATOM 2922	N	VAL	364	88.816	126.271	12.731	
ATOM 2923	CA	VAL	364	88.476	125.557	11.499	
ATOM 2924	C	VAL	364	89.269	126.129	10.305	
ATOM 2925	O	VAL	364	89.075	127.299	9.924	
ATOM 2926	CB	VAL	364	86.971	125.638	11.219	
ATOM 2927	CG1	VAL	364	86.561	124.985	9.903	
ATOM 2928	CG2	VAL	364	86.175	125.074	12.405	
ATOM 2929	N	VAL	365	90.190	125.358	9.769	20
ATOM 2930	CA	VAL	365	90.973	125.694	8.559	
ATOM 2931	C	VAL	365	90.089	125.648	7.264	
ATOM 2932	O	VAL	365	89.994	126.696	6.615	
ATOM 2933	CB	VAL	365	92.195	124.777	8.391	
ATOM 2934	CG1	VAL	365	93.148	125.332	7.288	
ATOM 2935	CG2	VAL	365	92.978	124.469	9.631	
ATOM 2936	N	SER	366	89.405	124.530	6.917	
ATOM 2937	CA	SER	366	88.622	124.464	5.681	
ATOM 2938	C	SER	366	87.277	123.710	5.881	
ATOM 2939	O	SER	366	87.159	122.756	6.679	30
ATOM 2940	CB	SER	366	89.504	123.805	4.618	
ATOM 2941	OG	SER	366	88.920	123.553	3.338	
ATOM 2942	N	VAL	367	86.264	124.148	5.140	
ATOM 2943	CA	VAL	367	84.936	123.561	5.095	
ATOM 2944	C	VAL	367	84.728	122.869	3.730	
ATOM 2945	O	VAL	367	84.621	123.537	2.688	
ATOM 2946	CB	VAL	367	83.857	124.613	5.351	
ATOM 2947	CG1	VAL	367	82.440	124.028	5.424	
ATOM 2948	CG2	VAL	367	84.067	125.505	6.543	
ATOM 2949	N	VAL	368	84.809	121.542	3.717	40
ATOM 2950	CA	VAL	368	84.686	120.733	2.516	
ATOM 2951	C	VAL	368	83.570	119.685	2.752	
ATOM 2952	O	VAL	368	83.567	118.988	3.769	
ATOM 2953	CB	VAL	368	86.036	120.064	2.165	
ATOM 2954	CG1	VAL	368	85.942	119.304	0.838	
ATOM 2955	CG2	VAL	368	87.132	121.108	2.093	
ATOM 2956	N	LYS	369	82.965	119.324	1.649	
ATOM 2957	CA	LYS	369	81.905	118.308	1.549	
ATOM 2958	C	LYS	369	82.355	116.967	2.183	
ATOM 2959	O	LYS	369	83.557	116.640	2.256	50

ATOM 2960	CB	LYS	369	81.615	118.066	0.072	
ATOM 2961	CG	LYS	369	81.206	119.268	-0.737	
ATOM 2962	CD	LYS	369	82.256	119.538	-1.787	
ATOM 2963	CE	LYS	369	81.760	120.538	-2.812	
ATOM 2964	NZ	LYS	369	80.704	119.996	-3.730	
ATOM 2965	N	SER	370	81.393	116.286	2.845	
ATOM 2966	CA	SER	370	81.566	114.949	3.432	
ATOM 2967	C	SER	370	82.129	113.927	2.398	
ATOM 2968	O	SER	370	82.694	112.921	2.866	
ATOM 2969	CB	SER	370	80.192	114.488	3.933	10
ATOM 2970	OG	SER	370	80.169	113.223	4.579	
ATOM 2971	N	SER	371	81.861	114.089	1.077	
ATOM 2972	CA	SER	371	82.298	113.178	0.070	
ATOM 2973	C	SER	371	83.630	113.668	-0.635	
ATOM 2974	O	SER	371	83.853	113.285	-1.804	
ATOM 2975	CB	SER	371	81.139	113.036	-0.845	
ATOM 2976	OG	SER	371	80.821	113.982	-1.792	
ATOM 2977	N	SER	372	84.410	114.598	-0.046	
ATOM 2978	CA	SER	372	85.693	115.087	-0.519	
ATOM 2979	C	SER	372	86.694	113.937	-0.787	20
ATOM 2980	O	SER	372	87.290	113.964	-1.874	
ATOM 2981	CB	SER	372	86.245	116.070	0.523	
ATOM 2982	OG	SER	372	86.453	115.675	1.899	
ATOM 2983	N	TRP	373	86.852	112.956	0.144	
ATOM 2984	CA	TRP	373	87.752	111.884	-0.159	
ATOM 2985	C	TRP	373	87.102	110.691	-0.966	
ATOM 2986	O	TRP	373	87.859	109.855	-1.355	
ATOM 2987	CB	TRP	373	88.308	111.411	1.137	
ATOM 2988	CG	TRP	373	88.910	112.349	2.090	
ATOM 2989	CD1	TRP	373	88.236	113.054	3.035	30
ATOM 2990	CD2	TRP	373	90.288	112.710	2.223	
ATOM 2991	NE1	TRP	373	89.112	113.824	3.757	
ATOM 2992	CE2	TRP	373	90.379	113.627	3.282	
ATOM 2993	CE3	TRP	373	91.461	112.339	1.546	
ATOM 2994	CZ2	TRP	373	91.581	114.185	3.687	
ATOM 2995	CZ3	TRP	373	92.668	112.901	1.947	
ATOM 2996	CH2	TRP	373	92.717	113.812	3.013	
ATOM 2997	N	ILE	374	85.839	110.761	-1.427	
ATOM 2998	CA	ILE	374	85.231	109.730	-2.257	
ATOM 2999	C	ILE	374	85.801	109.757	-3.716	40
ATOM 3000	O	ILE	374	85.614	108.730	-4.401	
ATOM 3001	CB	ILE	374	83.665	109.799	-2.385	
ATOM 3002	CG1	ILE	374	83.122	109.162	-1.030	
ATOM 3003	CG2	ILE	374	83.035	108.942	-3.610	
ATOM 3004	CD1	ILE	374	81.585	109.369	-0.905	
ATOM 3005	N	GLY	375	86.760	110.644	-4.077	
ATOM 3006	CA	GLY	375	87.283	110.807	-5.413	
ATOM 3007	C	GLY	375	86.174	111.235	-6.405	
ATOM 3008	O	GLY	375	86.214	110.771	-7.557	
ATOM 3009	N	CYS	376	85.099	111.939	-5.950	50

ATOM 3010 CA CYS 376 84.052 112.464 -6.755
 ATOM 3011 C CYS 376 84.510 113.905 -7.151
 ATOM 3012 O CYS 376 84.302 114.336 -8.284
 ATOM 3013 CB CYS 376 82.726 112.578 -6.005
 ATOM 3014 SG CYS 376 81.932 111.021 -5.602
 ATOM 3015 OXT CYX 376 84.922 114.642 -6.223
 TER 3016 CYX 376
 END

【0227】

ここで、「MM20_HUMAN」の購入した立体構造座標のグラフィック表示例を図34に示す。

10

【0228】

また、添付ファイルには、アミノ酸一次配列アライメント結果を含めてもよい。ここで、本実施例において送信されたアミノ酸一次配列アライメントの一例を図35に示す。図35は、「MM20_HUMAN」のアミノ酸一次配列アライメント結果の一例を示す図である。

【0229】

また、構造情報利用者(Yoshiaki Watanabe)は構造情報提供者(FAMSBASE)に対して、所定のタイミングで立体構造座標の対価を支払うものとする。

【0230】

これにて、実施例3が終了する。

20

【0231】

[実施例4]

次に、実施例4の詳細について図36を参照して説明する。図36は、本システムの実施例4の一例を示す概念図である。

【0232】

図36に示すように、本実施例において、構造情報受発注システムは、共同研究仲介者の構造情報処理装置100と、複数の共同研究者の情報端末装置200とを含んで構成される。

【0233】

共同研究仲介者は、構造情報処理装置100を用いて、各共同研究者の成果物であるタンパク質の立体構造データについて公開用構造データを、他の共同研究者の情報端末装置200に開示する。これにより、各共同研究者の技術紹介や、期待される成果物の紹介を行うことができる。

30

【0234】

そして、構造情報処理装置100は、契約情報管理部102iの処理により、各共同研究者間に共同研究契約が締結された場合にその契約情報を契約情報データベース106dに保持することにより、円滑な共同研究契約の支援を行うことができ、また、それに伴う手数料を得ることができる。

【0235】

これにて、実施例4が終了する。

40

【0236】

[実施例5]

次に、実施例5の詳細について図37を参照して説明する。図37は、本システムの実施例5の一例を示す概念図である。

【0237】

図37に示すように、本実施例において、構造情報受発注システムは、販売仲介者の構造情報処理装置100と、構造情報創作者の情報端末装置200と、市場における構造情報利用者の情報端末装置200とを含んで構成される。

【0238】

50

販売仲介者は、構造情報処理装置100を用いて、各構造情報創作者の成果物であるタンパク質の立体構造データについて公開用構造データを、市場における構造情報利用者の情報端末装置200に開示する。これにより、市場に対して、各構造情報創作者の技術紹介や、期待される成果物の紹介を行うことができる。

【0239】

そして、構造情報処理装置100は、契約情報管理部102iの処理により、各構造情報創作者と市場の構造情報利用者との間に販売契約が締結された場合にその契約情報を契約情報データベース106dに保持することにより、円滑な販売契約の支援を行うことができ、また、それに伴う手数料を得ることができる。

【0240】

これにて、実施例5が終了する。

【0241】

[他の実施の形態]

さて、これまで本発明の実施の形態について説明したが、本発明は、上述した実施の形態以外にも、上記特許請求の範囲に記載した技術的思想の範囲内において種々の異なる実施の形態にて実施されてよいものである。

【0242】

また、上述した各種情報の権利情報の送信および受信は、既存の電子メール送信技術を用いて実現してもよく、また、構造情報処理装置100が提供するWebサイトの提供する機能により、所定の入力フォーマットを提示して利用者等に情報を入力させ、その入力情報を送信することにより実現してもよく、さらに、FTP等の既存のファイル転送技術等により実現してもよい。

【0243】

また、実施形態において説明した各処理のうち、自動的に行なわれるものとして説明した処理の全部または一部を手動的に行うこともでき、あるいは、手動的に行なわれるものとして説明した処理の全部または一部を公知の方法で自動的に行うこともできる。

【0244】

この他、上記文書中や図面中で示した処理手順、制御手順、具体的名称、各種の登録データや検索条件等のパラメータを含む情報、画面例、データベース構成については、特記する場合を除いて任意に変更することができる。

【0245】

また、構造情報処理装置100に関して、図示の各構成要素は機能概念的なものであり、必ずしも物理的に図示の如く構成されていることを要しない。

【0246】

例えば、構造情報処理装置100の各サーバが備える処理機能、特に制御部にて行なわれる各処理機能については、その全部または任意の一部を、CPU(Central Processing Unit)および当該CPUにて解釈実行されるプログラムにて実現することができ、あるいは、ワイヤードロジックによるハードウェアとして実現することも可能である。なお、プログラムは、後述する記録媒体に記録されており、必要に応じて構造情報処理装置100に機械的に読み取られる。

【0247】

記憶部106に格納される各種のデータベース等(利用者情報データベース106a~契約情報データベース106d)は、RAM、ROM等のメモリ装置、ハードディスク等の固定ディスク装置、フレキシブルディスク、光ディスク等のストレージ手段であり、各種処理やウェブサイト提供に用いる各種のプログラムやテーブルやファイルやデータベースやウェブページ用ファイル等を格納する。

【0248】

また、構造情報処理装置100は、既知のパーソナルコンピュータ、ワークステーション等の情報処理端末等の情報処理装置にプリンタやモニタやイメージスキャナ等の周辺装置を接続し、該情報処理装置に本発明の方法を実現させるソフトウェア(プログラム、デー

10

20

30

40

50

タ等を含む)を実装することにより実現してもよい。

【0249】

さらに、構造情報処理装置100等の分散・統合の具体的形態は明細書および図面に示すものに限られず、その全部または一部を、各種の負荷等に応じた任意の単位で、機能的または物理的に分散・統合して構成することができる(例えば、グリッド・コンピューティングなど)。例えば、各データベースを独立したデータベース装置として独立に構成してもよく、また、処理の一部をCGI(Common Gateway Interface)を用いて実現してもよい。

【0250】

また、情報端末装置200は、既知のパーソナルコンピュータ、ワークステーション、家庭用ゲーム装置、インターネットTV、PHS端末、携帯端末、移動体通信端末またはPDA等の情報処理端末等の情報処理装置にプリンタやモニタやイメージスキャナ等の周辺装置を必要に応じて接続し、該情報処理装置にウェブ情報のブラウジング機能や電子メール機能を実現させるソフトウェア(プログラム、データ等を含む)を実装することにより実現してもよい。

10

【0251】

この情報端末装置200の制御部210は、その全部または任意の一部を、CPUおよび当該CPUにて解釈実行されるプログラムにて実現することができる。すなわち、ROMまたはHDには、OS(Operating System)と協働してCPUに命令を与え、各種処理を行うためのコンピュータプログラムが記録されている。このコンピュータプログラムは、RAMにロードされることによって実行され、CPUと協働して制御部を構成する。

20

【0252】

しかしながら、このコンピュータプログラムは、情報端末装置200に対して任意のネットワークを介して接続されたアプリケーションプログラムサーバに記録されてもよく、必要に応じてその全部または一部をダウンロードすることも可能である。このあるいは、各制御部の全部または任意の一部を、ワイヤードロジック等によるハードウェアとして実現することも可能である。

【0253】

また、本発明にかかるプログラムを、コンピュータ読み取り可能な記録媒体に格納することもできる。ここで、この「記録媒体」とは、フレキシブル・ディスク、光磁気ディスク、ROM、EPROM、EEPROM、CD-ROM、MO、DVD等の任意の「可搬用の物理媒体」や、各種コンピュータシステムに内蔵されるROM、RAM、HD等の任意の「固定用の物理媒体」、あるいは、LAN、WAN、インターネットに代表されるネットワークを介してプログラムを送信する場合の通信回線や搬送波のように、短期にプログラムを保持する「通信媒体」を含むものとする。

30

【0254】

また、「プログラム」とは、任意の言語や記述方法にて記述されたデータ処理方法であり、ソースコードやバイナリコード等の形式を問わない。なお、「プログラム」は必ずしも単一的に構成されるものに限られず、複数のモジュールやライブラリとして分散構成されるものや、OS(Operating System)に代表される別個のプログラムと協働してその機能を達成するものをも含む。なお、実施の形態に示した各装置において記録媒体を読み取るための具体的な構成、読み取り手順、あるいは、読み取り後のインストール手順等については、周知の構成や手順を用いることができる。

40

【0255】

また、ネットワーク300は、構造情報処理装置100と情報端末装置200とを相互に接続する機能を有し、例えば、インターネットや、イントラネットや、LAN(有線/無線の双方を含む)や、VANや、パソコン通信網や、公衆電話網(アナログ/デジタルの双方を含む)や、専用回線網(アナログ/デジタルの双方を含む)や、CATV網や、IMT2000方式、GSM方式またはPDC/PDC-P方式等の携帯回線交換網/携帯

50

パケット交換網や、無線呼出網や、Bluetooth等の局所無線網や、PHS網や、CS、BSまたはISDB等の衛星通信網等のうちいずれかを含んでもよい。すなわち、本システムは、有線・無線を問わず任意のネットワークを介して、各種データを送受信することができる。

【0256】

【発明の効果】

以上詳細に説明したように、本発明によれば、タンパク質立体構造座標（またはシーケンス）およびデータベースの販売、解析、作成サービスに関して、公開用構造データを、例えば公開用の広告媒体として利用し、構造データ自体の販売を行っていくという新しいビジネスが可能となる構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法を提供することができる。タンパク質の立体構造データやファルマコフォアデータなど、その取得に膨大な時間と費用がかかり、製薬事業に極めて有効に利用されており、そのデータ自体に多大な経済的価値が発生しているのも関わらず、特許法による保護が困難である状況に対しては、不競争法による保護により、データが秘匿されてしまうため技術の公開による累積的進歩を図ることができず、また重複研究などの弊害もある。こうした状況に際し、本発明法による「公開用タンパク質立体構造座標サンプル」、さらには「公開用タンパク質立体構造座標サンプル」を利用したビジネスモデルにより、経済的価値が発生しているタンパク質の立体構造データやファルマコフォアデータの流通を促進し、重複研究をある程度防ぐことも可能となり、バイオインフォマティクス関連事業の研究開発の発展につながる。また、結果としては、タンパク質立体構造座標やそのデータベース等に対しても、知的財産として保護する手段ともなる。

【0257】

また、本発明で用いる公開用構造データは、構造情報利用者にとっては有用な情報であるため、購買意欲の促進が期待され、販売促進へとつながる構造情報処理装置、構造情報処理方法、プログラム、記録媒体、構造情報受発注システムおよび構造情報受発注方法を提供することができる。

【0258】

本ビジネスモデルに適応可能な、タンパク質立体構造座標（またはシーケンス）さらにはデータベースの販売、および検索、解析、作成サービスとしては、その対象となるデータは、X線やNMRで解析されたタンパク質の立体構造座標、「FAMS」などホモロジーモデリング法によって構築された立体構造座標、既存立体構造座標に対して、基準振動解析法や分子動力学法を用いて解析された立体構造座標、複数のタンパク質の複合体の立体構造座標、リガンドとタンパク質の複合体の立体構造座標、DNAとタンパク質との複合体の立体構造座標、糖鎖などで修飾されたタンパク質の立体構造座標、タンパク質の立体構造のもととなるアミノ酸やDNAの一次配列データ、タンパク質のX線やNMR、MASSといった分析方法で得られた実験データ、DNAやアミノ酸一次配列のアライメントデータ、などのバイオインフォマティクス技術によって算出されるデータ全般におよび、こうしたデータの産業的価値をより高めることができる。

【0259】

さらに、構造ゲノミクス領域の急速な進歩に伴い、膨大な数のタンパク質構造データが創出されつつあり、バイオインフォマティクスにおいても、実験的手法により取得されたタンパク質構造データを利用することにより精度が飛躍的に進歩し、創薬事業においてもタンパク質構造データの重要性が増していくことが予想される。こうした状況に対して、構造解析領域の保護に関して、データの創作者および利用者の両者に対して過度な負担を強いることない簡便な仕組みで、これらの構造データについて知的創造サイクルが効率的に回るシステムを作ることにより、関連技術が発展するための土壌を作り出すことが可能となる。そこで、本発明法による「公開用タンパク質立体構造座標サンプル」、さらには「公開用タンパク質立体構造座標サンプル」を利用したビジネスモデルは、こうした構造データについての知的創造サイクルが効率的に回るシステムの作成に寄与することができる

10

20

30

40

50

- 。
- 【図面の簡単な説明】
- 【図1】本発明の基本原理を説明する概念図である。
- 【図2】本システムの全体構成の一例を示すブロック図である。
- 【図3】本発明が適用される構造情報処理装置100の構成の一例を示すブロック図である。
- 【図4】利用者情報データベース106aに格納される利用者情報の一例を示す図である。
- 。
- 【図5】構造変化部102hの構成の一例を示すブロック図である。
- 【図6】本発明が適用される情報端末装置200の構成の一例を示すブロック図である。 10
- 【図7】本実施形態における本システムの実施例1の一例を示すフローチャートである。
- 【図8】1JTOのA鎖を構造変化させたC 原子座標のみのモデル（公開用構造データ）の3次元表示例を示す図である。
- 【図9】1JTOのA鎖の立体構造データのモデル（構造データ）の3次元表示例を示す図である。
- 【図10】リゾチーム（1JTOのL鎖：black）とモデル立体構造（構造変位Cを用いて作成した抗体モデル：dark grey）および抗体（1JTOのA鎖：grey）の結合部分の拡大図の一例を示す図である。
- 【図11】本実施形態における本システムの実施例2の一例を示すフローチャートである 20
- 。
- 【図12】EGFの（1JTOのC鎖）の立体構造のグラフィック表示の一例を示す図である。
- 【図13】構造情報受注用Webページの一例を示す図である。
- 【図14】構造情報受注用Webページの購入する構造データの選択画面の一例を示す図である。
- 【図15】生物種が「Homo sapiens cDNA（huge0）」で遺伝子名が「KIAA1237」の公開用立体構造座標サンプルの一例を示す図である。
- 【図16】提供を希望する公開用立体構造サンプルの一例を示す図である。
- 【図17】構造情報提供者へ送信する電子メールの一例を示す図である。
- 【図18】構造情報提供者より届いた、公開用立体構造座標サンプルが添付された電子メールの一例を示す図である。 30
- 【図19】「KIAA1237」の297-353番目の残基部分の公開用立体構造座標サンプルの表示例を示す図である。
- 【図20】目的タンパク質の立体構造座標を発注する電子メールの一例を示す図である。
- 【図21】構造情報利用者が提供を受けた、発注した目的タンパク質の立体構造座標とアライメント結果の電子メールの一例を示す図である。
- 【図22】「KIAA1237」の297-353番目の残基部分の購入した立体構造座標のグラフィック表示例を示す図である。
- 【図23】「KIAA1237」の297-353番目の残基部分のアミノ酸一次配列アライメント結果の一例を示す図である。 40
- 【図24】本実施形態における本システムの実施例3の一例を示すフローチャートである。
- 。
- 【図25】1JK3の立体構造のグラフィック表示例を示す図である。
- 【図26】構造情報提供者により公開された「FAMS E-mail service version」のwebページの表示例を示す図である。
- 【図27】「MM20_HUMAN」のアミノ酸配列の表示例を示す図である。
- 【図28】構造情報提供者へ送信する電子メールの一例を示す図である。
- 【図29】構造情報提供者より届いた公開用立体構造座標サンプルが添付された電子メールの一例を示す図である。
- 【図30】「MM20_HUMAN」の公開用立体構造座標サンプルの表示例を示す図で 50

ある。

【図31】目的タンパク質の立体構造座標を発注する電子メールの一例を示す図である。

【図32】構造情報利用者が提供を受けた、発注した目的タンパク質の立体構造座標の電子メールの一例を示す図である。

【図33】構造情報利用者が提供を受けた、発注した目的タンパク質のアライメント結果の電子メールの一例を示す図である。

【図34】「MM20_HUMAN」の購入した立体構造座標のグラフィック表示例を示す図である。

【図35】「MM20_HUMAN」のアミノ酸一次配列アライメント結果の一例を示す図である。

10

【図36】本システムの実施例4の一例を示す概念図である。

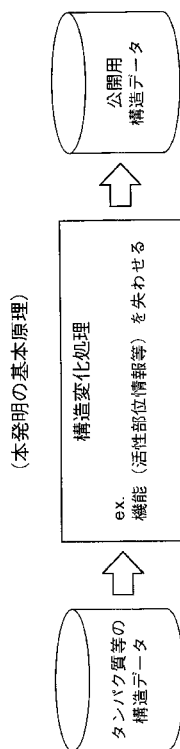
【図37】本システムの実施例5の一例を示す概念図である。

【符号の説明】

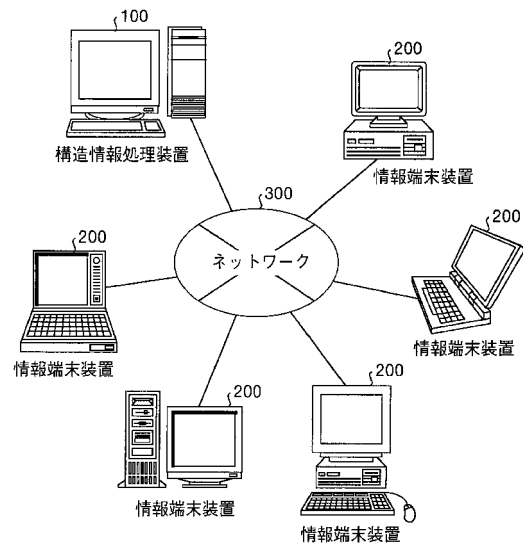
100	構造情報処理装置	
102	制御部	
102a	要求解釈部	
102b	閲覧処理部	
102c	認証処理部	
102d	電子メール生成部	
102e	Webページ生成部	20
102f	送信部	
102g	構造データ取得部	
102h	構造変化部	
102i	契約情報管理部	
102j	機能判定部	
102k	2次構造判定部	
102m	目的関数調節部	
102n	結合物質座標変化部	
102p	公開用構造データ作成部	
104	通信制御インターフェース部	30
106	記憶部	
106a	利用者情報データベース	
106b	構造データファイル	
106c	公開用構造データファイル	
106d	契約情報データベース	
108	入出力制御インターフェース部	
112	入力装置	
114	出力装置	
200	情報端末装置	
210	制御部	40
211	Webブラウザ	
212	電子メーラ	
220	ROM	
230	HD	
240	RAM	
250	入力装置	
260	出力装置	
261	モニタ	
262	プリン	
270	入出力制御インターフェース	50

280 通信制御インターフェース
300 ネットワーク

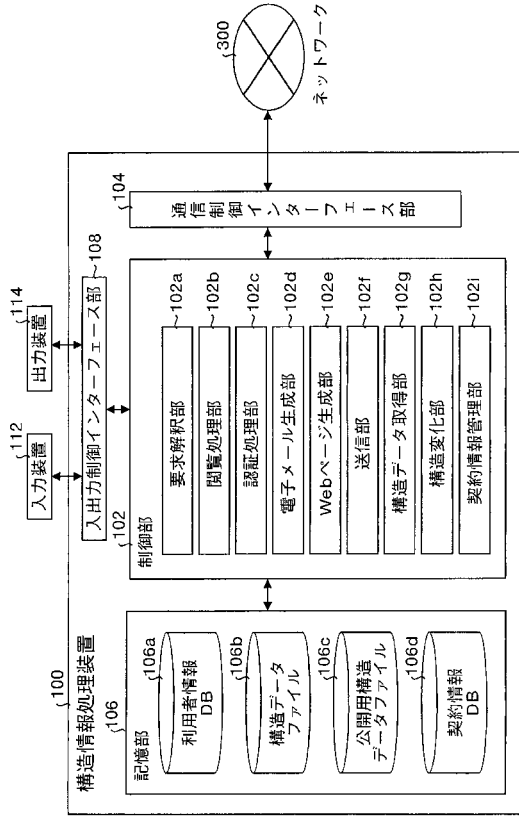
【図1】



【図2】



【図3】

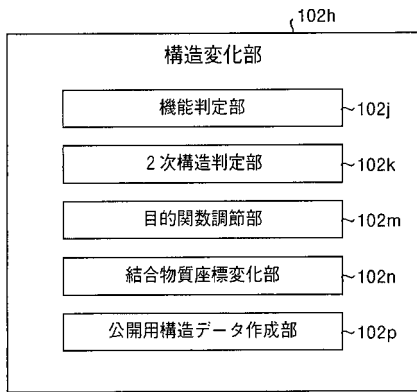


【図4】

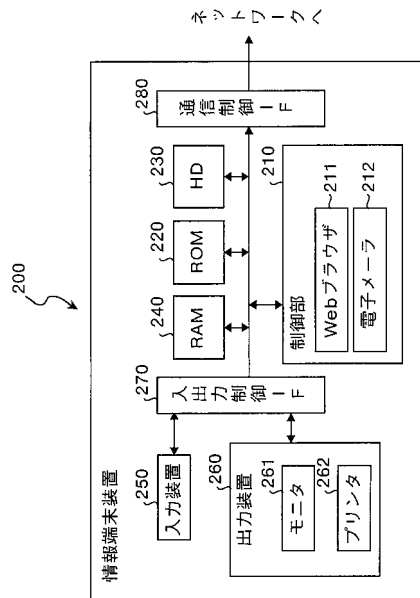
106a 利用者情報データベース

利用者ID	利用者	氏名	所属先ID	部門ID	部門名	電子メールアドレス	...
∴	∴	∴	∴	∴	∴	∴	∴

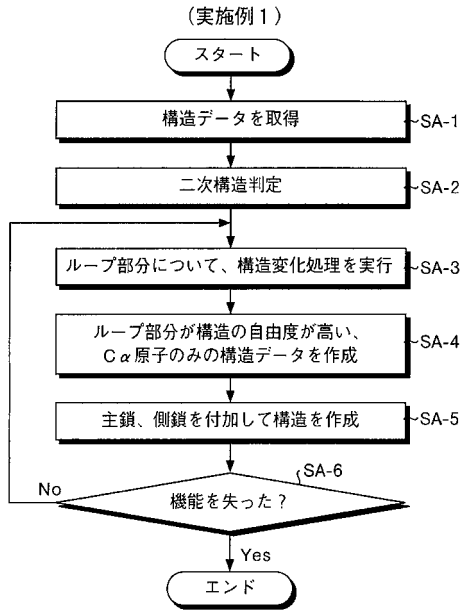
【図5】



【図6】



【 図 7 】



【 図 8 】



1 J T O の A 鎖を構造変化させた C α 原子座標のみのモデル

【 図 9 】



1 J T O の A 鎖の立体構造

【 図 10 】



リゾチーム (1 J T O の L 鎖 : black) とモデル立体構造 (構造変位 C α を用いて作成した抗体モデル : dark grey) および抗体 (1 J T O の A 鎖 : grey) の結合部分の拡大図 (リゾチーム立体構造中に表示したアミノ酸残基の側鎖はモデル立体構造との間にファンデルワールスの原子が衝突していることを示す。)

【 15】

アドレス http://100.059/FAMSBASE/sp4/Align/

KIAA1112	KIAA1113	KIAA1114	KIAA1115	KIAA1116	KIAA1117	KIAA1118	KIAA1119	KIAA1120	KIAA1121
KIAA1122	KIAA1123	KIAA1124	KIAA1125	KIAA1126	KIAA1127	KIAA1128	KIAA1129	KIAA1130	KIAA1131
KIAA1132	KIAA1133	KIAA1134	KIAA1135	KIAA1136	KIAA1137	KIAA1138	KIAA1139	KIAA1140	KIAA1141
KIAA1142	KIAA1143	KIAA1144	KIAA1145	KIAA1146	KIAA1147	KIAA1148	KIAA1149	KIAA1150	KIAA1151
KIAA1152	KIAA1153	KIAA1154	KIAA1155	KIAA1156	KIAA1157	KIAA1158	KIAA1159	KIAA1160	KIAA1161
KIAA1172	KIAA1173	KIAA1174	KIAA1175	KIAA1176	KIAA1177	KIAA1178	KIAA1179	KIAA1180	KIAA1181
KIAA1182	KIAA1183	KIAA1184	KIAA1185	KIAA1186	KIAA1187	KIAA1188	KIAA1189	KIAA1190	KIAA1191
KIAA1192	KIAA1193	KIAA1194	KIAA1195	KIAA1196	KIAA1197	KIAA1198	KIAA1199	KIAA1200	KIAA1201
1301									
KIAA1202	KIAA1203	KIAA1204	KIAA1205	KIAA1206	KIAA1207	KIAA1208	KIAA1209	KIAA1210	KIAA1211
KIAA1212	KIAA1213	KIAA1214	KIAA1215	KIAA1216	KIAA1217	KIAA1218	KIAA1219	KIAA1220	KIAA1221
KIAA1222	KIAA1223	KIAA1224	KIAA1225	KIAA1226	KIAA1227	KIAA1228	KIAA1229	KIAA1230	KIAA1231
KIAA1232	KIAA1233	KIAA1234	KIAA1235	KIAA1236	KIAA1237	KIAA1238	KIAA1239	KIAA1240	KIAA1241
KIAA1242	KIAA1243	KIAA1244	KIAA1245	KIAA1246	KIAA1247	KIAA1248	KIAA1249	KIAA1250	KIAA1251
KIAA1252	KIAA1253	KIAA1254	KIAA1255	KIAA1256	KIAA1257	KIAA1258	KIAA1259	KIAA1260	KIAA1261
KIAA1262	KIAA1263	KIAA1264	KIAA1265	KIAA1266	KIAA1267	KIAA1268	KIAA1269	KIAA1270	KIAA1271
KIAA1272	KIAA1273	KIAA1274	KIAA1275	KIAA1276	KIAA1277	KIAA1278	KIAA1279	KIAA1280	KIAA1281
KIAA1282	KIAA1283	KIAA1284	KIAA1285	KIAA1286	KIAA1287	KIAA1288	KIAA1289	KIAA1290	KIAA1291
KIAA1292	KIAA1293	KIAA1294	KIAA1295	KIAA1296	KIAA1297	KIAA1298	KIAA1299	KIAA1300	KIAA1301
1301									
KIAA1302	KIAA1303	KIAA1304	KIAA1305	KIAA1306	KIAA1307	KIAA1308	KIAA1309	KIAA1310	KIAA1311
KIAA1312	KIAA1313	KIAA1314	KIAA1315	KIAA1316	KIAA1317	KIAA1318	KIAA1319	KIAA1320	KIAA1321
KIAA1322	KIAA1323	KIAA1324	KIAA1325	KIAA1326	KIAA1327	KIAA1328	KIAA1329	KIAA1330	KIAA1331
KIAA1332	KIAA1333	KIAA1334	KIAA1335	KIAA1336	KIAA1337	KIAA1338	KIAA1339	KIAA1340	KIAA1341
KIAA1342	KIAA1343	KIAA1344	KIAA1345	KIAA1346	KIAA1347	KIAA1348	KIAA1349	KIAA1350	KIAA1351
KIAA1352	KIAA1353	KIAA1354	KIAA1355	KIAA1356	KIAA1357	KIAA1358	KIAA1359	KIAA1360	KIAA1361
KIAA1362	KIAA1363	KIAA1364	KIAA1365	KIAA1366	KIAA1367	KIAA1368	KIAA1369	KIAA1370	KIAA1371
KIAA1372	KIAA1373	KIAA1374	KIAA1375	KIAA1376	KIAA1377	KIAA1378	KIAA1379	KIAA1380	KIAA1381

【 16】

アドレス http://100.059/FAMSBASE/sp4/Align/KIAA1237/

hugs:KIAA1237	685	amino acids	GTP original	passo is basic	
Alignment	(region:343-499	ev:3e-17	Ident:1y:103%	Ident:1y:103%	Total Length:182
Alignment	(region:285-338	ev:2e-18	Ident:1y:128%	Ident:1y:128%	Total Length:182
Alignment	(region:381-432	ev:5e-15	Ident:1y:93%	Ident:1y:93%	Total Length:182
Alignment	(region:300-390	ev:1e-14	Ident:1y:125%	Ident:1y:125%	Total Length:182
Alignment	(region:282-345	ev:7e-14	Ident:1y:235%	Ident:1y:235%	Total Length:182
Alignment	(region:297-353	ev:4e-13	Ident:1y:303%	Ident:1y:303%	Total Length:182
Alignment	(region:335-438	ev:4e-13	Ident:1y:78%	Ident:1y:78%	Total Length:182
Alignment	(region:265-345	ev:4e-13	Ident:1y:103%	Ident:1y:103%	Total Length:300
Alignment	(region:282-378	ev:1e-12	Ident:1y:134%	Ident:1y:134%	Total Length:182
Alignment	(region:495-582	ev:2e-12	Ident:1y:133%	Ident:1y:133%	Total Length:182
Alignment	(region:352-345	ev:2e-12	Ident:1y:256%	Ident:1y:256%	Total Length:182
Alignment	(region:385-427	ev:4e-12	Ident:1y:78%	Ident:1y:78%	Total Length:182
Alignment	(region:395-416	ev:4e-12	Ident:1y:383%	Ident:1y:383%	Total Length:182
Alignment	(region:301-372	ev:7e-12	Ident:1y:132%	Ident:1y:132%	Total Length:300

【 17】

アドレス http://100.059/FAMSBASE/sp4/Align/KIAA1237/

From: FAMSDBase (watanabe@pharm.kitasato-u.ac.jp)
 Subject: Request Model
 To: yoshiki@pharm.kitasato-u.ac.jp
 Bcc:
 Attached:
 [P]=hugs#KIAA1237_PSPID095_1_1

Qualcomm

【 18】

アドレス http://100.059/FAMSBASE/sp4/Align/KIAA1237/

From: FAMSDBase (watanabe@pharm.kitasato-u.ac.jp)
 Subject: Your Request Model
 To: watanabe@pharm.kitasato-u.ac.jp
 Bcc:
 Attached:
 [P]=hugs#KIAA1237_PSPID095_1_1

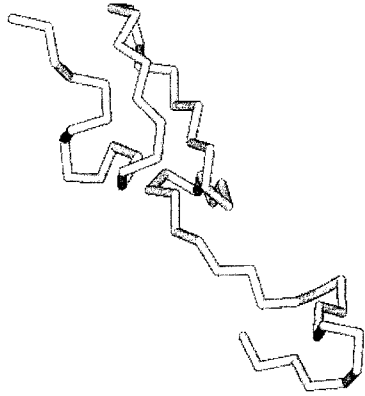
Dear Yoshiki Watanabe
 Thank you for your access of FAMSBASE service
 Your Request ID is 000027.
 Your request is found in FAMSBASE
 We attached Sample Coordinates.
 When you purchase full coordinates, please transmit an E-mail to us.
 The format is as follows.

From:
 Address: watanabe@pharm.kitasato-u.ac.jp
 Subject: Get Model (your ID)

Price: Full Coordinates (with Alignment) 4200

sample_ID000027.rdb

【 図 19 】



「K1AA1237」の297-353番目の
残基部分の広告用立体構造座標サンプル

【 図 20 】

From: FAMSBASE <famsbase@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 To: Yoshiaki Watanabe <watanaby@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 Subject: Your Request Model
 User-Agent: Ians mail system

Dear Yoshiaki Watanabe

Thank you for your access of FAMSBASE service
 Your Request ID is 000027.

mis	match	insertion	deletion
57	homology	18	
58	31.8%	30	

Alignment
 >K1AA1237
 >E1MN *****
 VQVNEGLSNPQSTATNMTGGSFLCKCPYGVQLE-HGICLNLRVTFV-TEFKLRITFLN
 VQVNEKQEPVCKHGDCINTDQSYRDEDFCYILADHEVDYDECSNPGCN-GTRN

//

Please see <http://10.0.0.99/FAMSBASE/>
 juke.K1AA1237.1.4.L2db

【 図 21 】

From: FAMSBASE <famsbase@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 To: Yoshiaki Watanabe <watanaby@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 Subject: Your Request Model
 User-Agent: Ians mail system

Dear Yoshiaki Watanabe

Thank you for your access of FAMSBASE service
 Your Request ID is 000027.

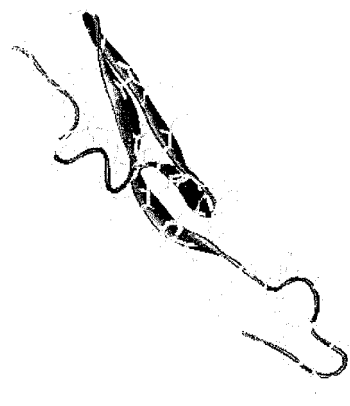
mis	match	insertion	deletion
57	homology	18	
58	31.8%	30	

Alignment
 >K1AA1237
 >E1MN *****
 VQVNEGLSNPQSTATNMTGGSFLCKCPYGVQLE-HGICLNLRVTFV-TEFKLRITFLN
 VQVNEKQEPVCKHGDCINTDQSYRDEDFCYILADHEVDYDECSNPGCN-GTRN

//

Please see <http://10.0.0.99/FAMSBASE/>
 juke.K1AA1237.1.4.L2db

【 図 22 】



「K1AA1237」の297-353番目の
残基部分の購入した立体構造

【図23】

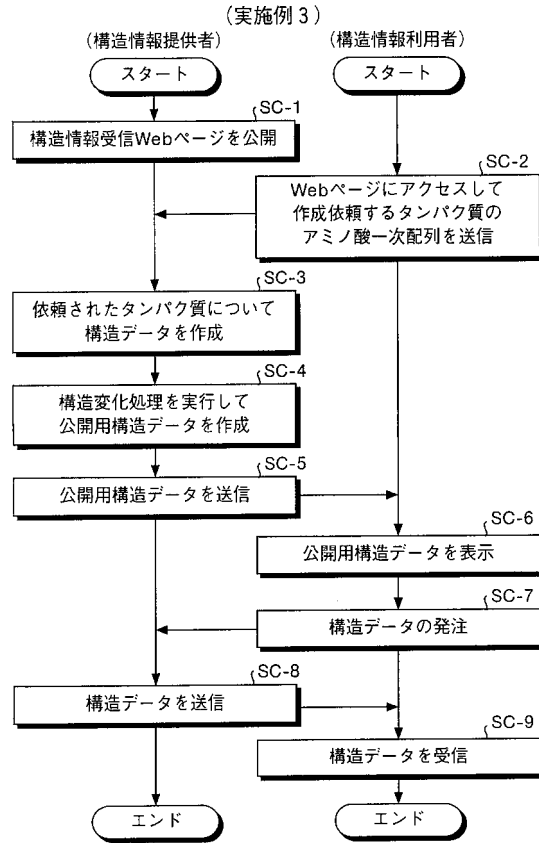
```

>|KIAA1237          57  homology  18  mismatch  insertion  deletion
>|EAM              68  31.6%
VDVNECLNPGPSTATCNTQGSFICKCYGVQLE-KGLICLVKRVETVTEFKLKRFLN
VDMDEKPEVDVCRHQGQCINTDGSYRCCPPGVYILAGNEQVDTCDSVGNPCGR-QTCN
*****

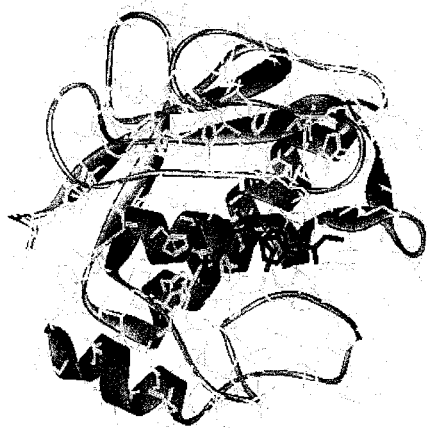
```

「KIAA1237」の297-353番目の残基部分のアミノ酸一次配列アライメント

【図24】

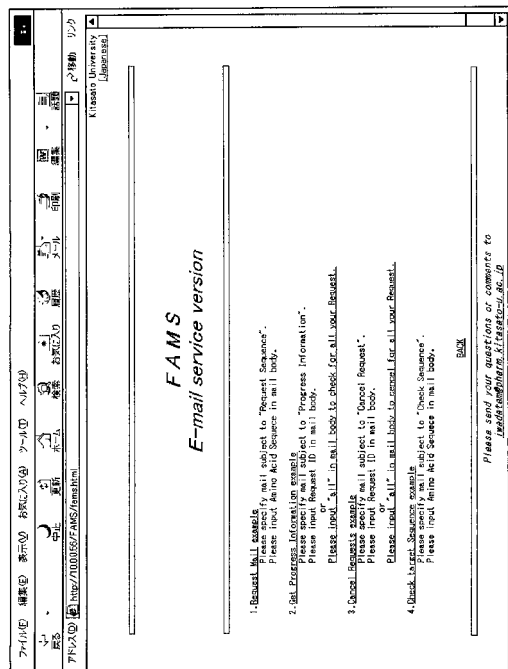


【図25】



1JK3の立体構造

【図26】



【 図 27 】

```

>#PI060892IMM20_HUMAN Matrix metalloproteinase-20 precursor (EC 3.4.24.-) (MMP-20) (Ename)
MKVLPASSLAUFLIMALKPSTAAPELVAAASPTWRNNYRLAQAYLDKYVTKKGEHQIGEM
VARSSMSIRIKELQAFGLVTKLDDTMNVKKPFCGVDFVANRFLFPEGPKWKN
FEDPFRCTLAHNSGEGDQDTMFDSPKPKWTMOTGDFNLTVAAHETGALQLAHSDFP
SALMPTTKNRYGFHLFKDDVGIQALYGRKRVLGGPLPHARHKFSIPDLGSSS
SFDVATMLGKELLTKRDFIEMRQVHEIGKPSITTSFQASNSVDGAVKVEKQY
KKRKEQVFKPNTREFFSGVNGQIDAAVELNGYVFFSGPKTKYDTEKEDVVSVKSSW

```

「IMM20_HUMAN」のアミノ酸配列

【 図 28 】

File Edit View Mail Tools Window Help

MS P3272

Received Your Request

To: yoshitake@pharm.kitasato-u.ac.jp
 From: Full Automatic Modeline System <fams@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 Subject: Received Your Request

Dear Yoshitake, Watanabe

Thank you for your access of FAMS service
 Your Request ID is "000038"

We attached Sample Coordinates.

When you purchase full coordinates, please transmit an E-mail to us.
 The format is as follows.

Format
 Address :fams@pharm.kitasato-u.ac.jp
 Subject :get ModelID@your ID)

Price:
 Full Coordinates (with Alignment) :¥200

example_ID000038.pdf

To: fams@pharm.kitasato-u.ac.jp
 From: Yoshitake Watanabe <watanabe@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 Subject: Request Sequence

Attached:

```

MVAASLAVRIMVALVSTTAPRSLVAGSPRTWNNVQLASVYDQVYMGESLQDLENVRSNSNRVYK
EIQAFEGVYVTEKLEDDTMNVKPKCGVDFVANRFLGFPNMLKATLTYRSKYTFSWSSVDKAWGVA
LQAWSSAVLSVVRNSGEADIMSFENGDKGDSYFDGPRCTI AHAFAFGEGDGDTHFDFNFKVTMTNG
FRLFTVAHEFHGLGLMSDFSAIMYPTTKNRYGFHLFKDDVGIQALYGRKRVLGGPLPHARHK
SPHYMTSGMQGQPRHTYDGFPHVQGDIDAAVLEPQKTLFVAGDEYVYDERKRVKEDYPKNTEEF
SGVNGQIDAAVELNGYVFFSGPKTKYDTEKEDVVSVKSSWMBG

```

QUALCOMM

【 図 29 】

File Edit View Mail Tools Window Help

MS P3272

Received Your Request

To: yoshitake@pharm.kitasato-u.ac.jp
 From: Full Automatic Modeline System <fams@pharm.kitasato-u.ac.jp>
 Subject: Received Your Request

Dear Yoshitake, Watanabe

Thank you for your access of FAMS service
 Your Request ID is "000038"

We attached Sample Coordinates.

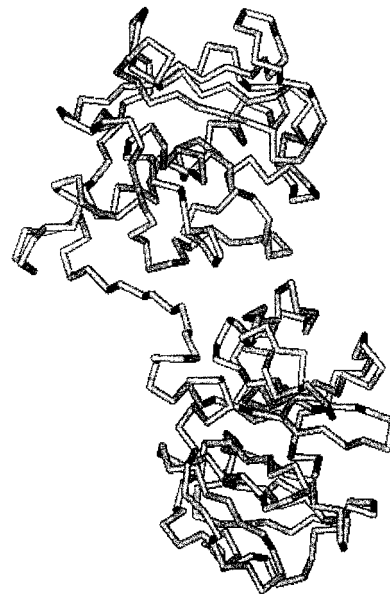
When you purchase full coordinates, please transmit an E-mail to us.
 The format is as follows.

Format
 Address :fams@pharm.kitasato-u.ac.jp
 Subject :get ModelID@your ID)

Price:
 Full Coordinates (with Alignment) :¥200

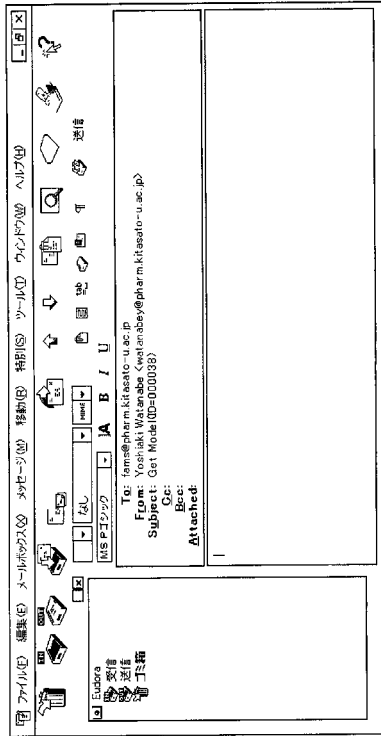
example_ID000038.pdf

【 図 30 】

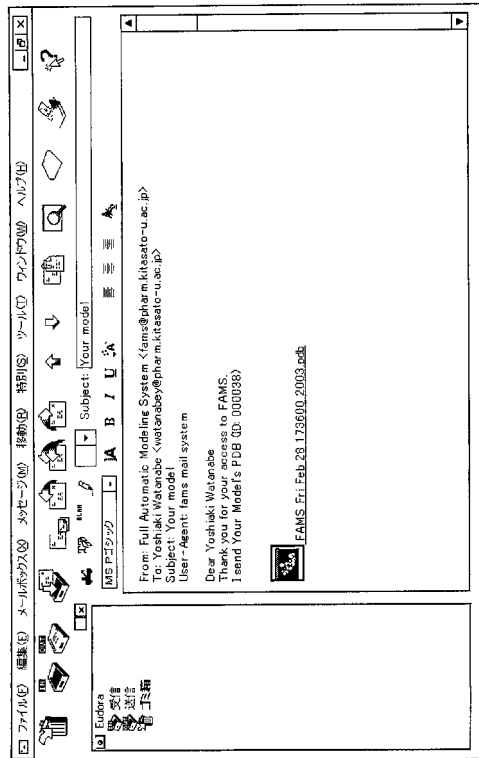


「IMM20_HUMAN」の広告用立体構造

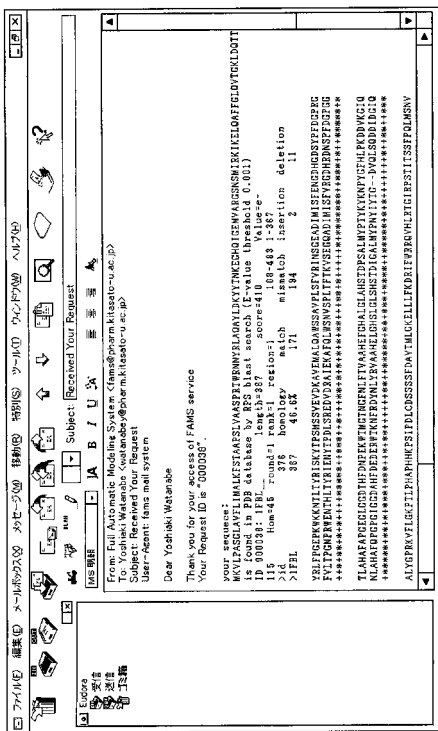
【 3 1 】



【 3 2 】



【 3 3 】



【 3 4 】



「MM2 0_HUMAN」の購入した立体構造

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I
G 0 6 Q 30/00 (2006.01) G 0 6 F 17/10 Z
G 0 6 F 17/60 3 0 2 E

(72)発明者 志鷹 真由子
東京都東村山市秋津町4 - 3 3 - 5 8 - 2 0 5

審査官 岩間 直純

(56)参考文献 特開平06 - 044323 (JP, A)
国際公開第02 / 057954 (WO, A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
G06F 19/00
G06F 17/30
G01N 33/48
G01N 33/68
G06F 17/10
G06Q 30/00
JSTPlus(JDreamII)