

Supporting Information:

MFCC-DFT Mapping of Ligand Recognition at the 5-HT_{2A} Receptor: Energetic Analysis of the Interactions Between Serotonin, Psychedelics, and Antipsychotic

Washington Sales Clemente Junior,[†] Katyanna Sales Bezerra, [†] Érika
Geicianny de Carvalho Matias,[†] Jonas Ivan Nobre Oliveira, [†] and
Umberto Laino Fulco*,[†]

*[†]Departamento de Biofísica e Farmacologia, Universidade Federal do Rio Grande do
Norte, 59072-970, Natal-RN, Brazil.*

*E-mail: umbertofulco@gmail.com Phone:

+55 (84) 3215-3419. Fax: +55 (84) 3215-3791

Table S1: Description of the 5-HT₂AR residues interacting with Serotonin (5-HT) identified in the binding pocket radius ranging from 2.0 to 10.0 Å. We also show the regions and groups where there is Serotonin-residue interaction, and the energetic values (in kcal/mol) for $\epsilon=10$ and $\epsilon=40$ calculated by B97D functional combined with the 6-311+G(d,p) basis-set.

5-HT-5-HT ₂ AR Complex				
Residue	Atomic Group	Radius (Å)	Energy ($\epsilon=10$)	Energy ($\epsilon=40$)
ASP155	II(C1)H	2	-14,95	-7,50
ILE152	I(C4)H	2,5	-3,35	-2,66
VAL156	II(C1)H	2,5	-1,85	-1,74
PHE339	I(C8)H	2,5	-2,59	-2,42
LEU362	I(C8)H	2,5	-1,30	-1,12
TRP151	I(C4)H	3	-4,82	-4,33
LEU228	I(C8)H	3	-3,84	-4,02
LEU229	II(C2)H	3	-2,99	-2,83
ASN363	I(C9)H	3	-1,18	-0,87
CYS227	I(C4)H	3,5	-1,45	-1,28
TYR370	II(C1)H	3,5	-0,50	-0,79
TRP336	II(C1)H	4	-0,77	-0,56
THR134	I(C10)H	4,5	0,02	-0,16
ASN343	I(C8)H	4,5	-0,41	-0,49
VAL366	II(C1)H	4,5	-1,47	-1,41
VAL127	II(C1)H	5	-0,25	-0,26
TYR139	I(C9)H	5	-0,27	-0,24
SER159	II(C1)H	5	0,01	-0,10
SER131	I(C10)H	5,5	-0,19	-0,24
TRP141	I(C4)H	5,5	-0,16	-0,15
ILE210	II(C2)H	5,5	-0,05	-0,13
VAL235	II(C2)H	5,5	-0,29	-0,19
GLY359	I(C8)O	5,5	-0,25	-0,15
LEU123	II(C1)H	6	-0,16	-0,10
CYS148	I(C4)H	6	-0,57	-0,26
TYR153	I(C4)H	6	-0,33	-0,18
LEU157	II(C1)H	6	-0,07	-0,08
SER226	I(C9)H	6	0,06	-0,13
PHE243	II(C1)H	6	-0,16	-0,10
VAL130	I(C4)H	6,5	0,14	-0,02
LEU154	II(C1)H	6,5	0,68	0,37
ALA230	II(C2)H	6,5	-0,11	-0,09
ILE358	I(C8)H	6,5	-0,17	-0,08
PHE365	I(C8)H	6,5	0,08	-0,05
ALA149	I(C4)H	7	-0,29	-0,11
PHE158	II(C1)H	7	0,40	0,07

LEU361	I(C8)H	7	0,00	-0,02
ILE135	I(C10)H	7,5	0,06	-0,02
VAL150	I(C4)H	7,5	-0,11	-0,04
THR160	II(C1)H	7,5	-0,05	-0,03
VAL221	I(C4)H	7,5	-0,31	-0,16
THR342	I(C8)H	7,5	0,16	0,02
ALA346	I(C8)H	7,5	0,12	0,01
VAL364	I(C8)H	7,5	-0,08	-0,05
SER207	II(C1)H	8	-0,22	-0,07
LYS223	I(C9)H	8	1,75	0,39
ASP231	II(C2)H	8	-2,53	-0,65
PHE234	II(C2)H	8	0,00	-0,03
SER239	II(C1)H	8	-0,12	-0,04
PHE340	II(C1)H	8	-0,21	-0,08
ALA360	I(C9)H	8	-0,06	-0,03
TRP367	I(C10)H	8	-0,22	-0,13
GLY369	II(C1)H	8	0,16	0,03
MET128	II(C1)H	8,5	-0,24	-0,10
MET132	I(C10)H	8,5	-0,03	-0,02
LEU147	I(C4)H	8,5	-0,11	-0,04
LYS220	II(C2)H	8,5	1,69	0,40
PRO142	I(C10)H	9	0,10	0,02
PHE222	I(C4)H	9	-0,12	-0,07
GLY238	II(C1)H	9	0,13	0,03
PRO338	I(C8)H	9	0,12	0,03
ILE344	I(C8)H	9	-0,03	-0,03
LEU126	I(C4)H	9,5	0,13	0,02
LEU133	I(C10)H	9,5	0,15	0,03
ARG140	I(C10)H	9,5	1,86	0,44
LEU143	I(C4)H	9,5	0,03	0,00
LYS162	II(C1)H	9,5	2,94	0,73
GLY225	I(C10)H	9,5	0,02	0,00
ASP232	II(C2)H	9,5	-2,45	-0,62
SER242	II(C1)H	9,5	0,07	0,01
PHE332	II(C1)H	9,5	-0,16	-0,05
VAL347	I(C8)H	9,5	0,04	0,00
GLU355	I(C8)O	9,5	-1,75	-0,44
PRO129	I(C4)H	10	0,04	0,00
GLY138	I(C9)H	10	0,07	0,01
ALA161	II(C1)H	10	0,14	0,04
PRO211	II(C2)H	10	-0,03	-0,02
LEU236	II(C1)H	10	-0,15	-0,05
ASP356	I(C8)O	10	-1,66	-0,42
VAL357	I(C8)H	10	-0,05	-0,02
ILE368	I(C8)H	10	0,14	0,02

Table S2: Description of the 5-HT₂AR residues interacting with Psilocybin (PSCILO) identified in the binding pocket radius ranging from 2.0 to 10.0 Å. We also show the regions and groups where there is Psilocybin-residue interaction, and the energetic values (in kcal/mol) for $\epsilon=10$ and $\epsilon=40$ calculated by B97D functional combined with the 6-311+G(d,p) basis-set.

PSCILO-5-HT ₂ AR Complex				
Residue	Atomic Group	Radius (Å)	Energy ($\epsilon=10$)	Energy ($\epsilon=40$)
ASP155	II(C1)H	2	-20,59	-13,06
PHE339	I(C9)O	2	-6,82	-6,68
VAL156	II(C2)H	2,5	-1,76	-1,77
TRP336	II(C1)H	2,5	-1,68	-1,22
ASN363	I(C12)H	2,5	-1,74	-1,25
VAL366	II(C3)H	2,5	-2,94	-2,86
ASN343	I(C10)H	3	-1,55	-1,54
LEU362	I(C11)H	3	-2,89	-2,69
SER159	II(C1)H	3,5	-0,50	-0,88
LEU228	I(C10)H	3,5	-2,60	-2,78
TYR370	I(C3)H	3,5	-1,42	-1,55
TRP151	I(C6)H	4	-0,83	-0,66
LEU229	I(C9)O	4	-1,74	-1,56
GLY359	I(C11)H	4	-0,50	-0,32
ILE152	II(C4)H	4,5	-1,19	-0,76
VAL235	I(C9)H	4,5	-0,56	-0,45
SER131	I(C6)H	5	0,03	-0,13
PHE243	II(C2)H	5	-0,43	-0,42
VAL127	II(C1)H	5,5	-0,10	-0,16
THR134	I(C6)H	5,5	0,16	-0,01
TYR139	I(C12)H	5,5	-0,16	-0,14
ILE358	I(C11)H	5,5	-0,22	-0,14
GLY369	II(C1)H	5,5	0,13	-0,03
LEU123	II(C1)H	6	-0,14	-0,12
ILE135	I(C6)H	6	0,05	-0,02
ILE210	II(C2)H	6	0,05	-0,05
CYS227	I(C6)N	6	-0,48	-0,42
ALA346	I(C10)H	6	0,07	-0,03
VAL364	I(C12)H	6	-0,19	-0,12
TRP367	I(C6)H	6	-0,26	-0,25
LEU157	II(C2)H	6,5	-0,07	-0,06
THR160	I(C11)H	6,5	-0,14	-0,09
ALA230	I(C10)H	6,5	-0,26	-0,16
PHE340	II(C1)H	6,5	-0,20	-0,14
ALA360	I(C11)H	6,5	-0,14	-0,06
LEU361	I(C12)H	6,5	-0,15	-0,17

LEU154	II(C1)H	7	0,35	0,20
PHE158	II(C1)H	7	0,42	0,07
SER226	I(C12)H	7	0,06	-0,03
PHE332	II(C1)H	7	-0,21	-0,09
PHE365	II(C3)H	7	-0,01	-0,12
MET128	I(C6)H	7,5	-0,22	-0,09
TYR153	II(C2)H	7,5	-0,37	-0,15
SER239	II(C2)H	7,5	-0,29	-0,10
THR342	I(C11)H	7,5	0,11	-0,03
VAL347	I(C10)H	7,5	0,02	-0,02
VAL130	I(C6)H	8	0,15	0,02
MET132	I(C6)H	8	-0,04	-0,02
LYS162	II(C1)H	8	3,21	0,78
SER207	II(C2)H	8	-0,25	-0,08
LYS223	I(C11)H	8	1,81	0,41
ASP231	I(C9)H	8	-2,43	-0,63
SER242	II(C2)H	8	0,19	0,03
ILE344	I(C10)H	8	-0,10	-0,08
GLU355	I(C11)H	8	-1,85	-0,47
TRP141	I(C6)H	8,5	-0,02	-0,03
CYS148	II(C4)H	8,5	-0,20	-0,07
ILE163	II(C1)H	8,5	0,12	0,02
VAL221	I(C9)H	8,5	-0,21	-0,09
ASP232	I(C9)H	8,5	-2,29	-0,59
GLY238	II(C2)H	8,5	0,06	0,00
MET335	II(C1)H	8,5	0,09	0,04
ASP356	I(C11)H	8,5	-1,91	-0,48
VAL357	I(C11)H	8,5	-0,08	-0,03
ILE368	II(C1)H	8,5	0,15	0,01
LYS74	I(C12)H	9	2,15	0,53
ALA149	II(C4)H	9	-0,24	-0,07
ALA161	II(C2)H	9	0,16	0,03
LYS220	I(C9)H	9	1,60	0,38
PHE234	I(C9)H	9	0,00	-0,03
CYS337	II(C1)H	9	-0,09	-0,03
PRO338	II(C2)H	9	0,10	-0,02
LYS350	I(C10)H	9	2,09	0,51
LEU371	II(C1)H	9	0,07	0,02
ASN372	II(C1)H	9	0,08	0,01
SER373	II(C1)H	9	-0,01	-0,01
LEU133	I(C6)H	9,5	0,13	0,03
LEU236	I(C9)H	9,5	-0,20	-0,07
ILE341	II(C1)H	9,5	-0,02	-0,01
MET345	I(C10)H	9,5	0,16	0,03
THR81	I(C6)H	10	-0,06	-0,02

ASP120	II(C1)H	10	-2,91	-0,74
ARG140	I(C12)H	10	1,79	0,43
VAL150	II(C4)H	10	-0,10	-0,03
ILE206	II(C2)H	10	0,06	0,01
PHE222	I(C10)	10	-0,06	-0,04

Table S3: Description of the 5-HT₂AR residues interacting with Lysergic Acid Diethylamide (LSD) identified in the binding pocket radius ranging from 2.0 to 10.0 Å. We also show the regions and groups where there is Lysergic Acid Diethylamide-residue interaction, and the energetic values (in kcal/mol) for $\epsilon=10$ and $\epsilon=40$ calculated by B97D functional combined with the 6-311+G(d,p) basis-set.

LSD-5-HT ₂ AR Complex				
Residue	Atomic Group	Radius (Å)	Energy ($\epsilon=10$)	Energy ($\epsilon=40$)
ASP155	I(C11)H	2	-24,19	-16,69
VAL127	II(C18)	2,5	-1,34	-1,36
TRP151	II(C20)H	2,5	-5,75	-5,39
VAL156	I(C15)H	2,5	-6,36	-6,17
SER159	I(C15)H	2,5	-2,03	-1,86
VAL235	I(C5)H	2,5	-1,84	-1,63
SER242	I(C1)H	2,5	-1,00	-1,00
TRP336	I(C12)H	2,5	-2,10	-1,67
VAL366	I(C12)H	2,5	-3,03	-2,72
SER131	II(C20)H	3	-1,06	-1,26
ILE152	II(C18)H	3	-2,31	-1,93
LEU229	I(C5)H	3	-2,06	-2,04
GLY238	I(C4)H	3	-2,16	-1,82
PHE339	I(C11)H	3	-5,12	-5,02
TYR370	II(C17)H	3	-1,97	-2,11
SER239	I(C4)H	3,5	-1,92	-1,71
PHE340	I(C8)H	3,5	-2,75	-2,70
ASN343	I(C5)H	3,5	-1,05	-1,22
THR160	I(C8)H	4	-0,88	-0,74
CYS227	II(C19)H	4	-0,95	-0,78
LEU228	II(C19)H	4	-0,92	-0,97
PHE234	I(C4)H	4	-0,48	-0,37
LEU123	I(C12)H	4,5	-0,56	-0,49
THR134	II(C20)H	5	-0,17	-0,28
TYR139	II(C20)H	5	-0,12	-0,15
ILE210	I(C4)	5	-0,37	-0,46
PHE243	I(C8)H	5	-0,50	-0,48
ASN363	II(C20)H	5	-0,73	-0,41
TRP367	II(C20)H	5	-0,59	-0,47
ILE163	I(C8)H	5,5	0,06	-0,06
GLY369	I(C12)H	5,5	0,12	-0,07
MET128	II(C17)H	6	-0,30	-0,21
VAL130	II(C18)H	6	0,07	-0,12
ILE135	II(C20)H	6	0,02	-0,06
TRP141	II(C18)H	6	-0,11	-0,12
CYS148	II(C18)H	6	-0,37	-0,16

TYR153	II(C18)H	6	-0,34	-0,23
LEU154	II(C18)H	6	0,37	0,14
LEU157	I(C15)H	6	-0,19	-0,18
PHE158	I(C15)H	6	0,40	0,03
ILE206	I(C1)H	6	0,01	-0,06
LEU236	I(C4)H	6	-0,32	-0,19
ILE237	I(C4)H	6	-0,03	-0,05
LEU362	II(C20)H	6	-0,65	-0,42
MET132	II(C20)H	6,5	-0,07	-0,07
ASP231	I(C5)H	6,5	-2,13	-0,57
PHE240	I(C4)H	6,5	-0,18	-0,11
VAL241	I(C1)H	6,5	0,23	0,07
PHE332	I(C8)H	6,5	-0,28	-0,14
PHE365	I(C12)H	6,5	0,06	-0,02
LEU126	I(C18)H	7	0,19	0,03
VAL150	I(C18)H	7	-0,15	-0,10
ALA161	I(C8)H	7	0,06	-0,01
SER207	I(C1)H	7	-0,27	-0,15
ALA230	I(C18)H	7	-0,06	-0,06
ASP232	I(C5)H	7	-2,02	-0,53
LEU133	I(C20)H	7,5	0,13	0,01
LYS162	I(C12)H	7,5	3,40	0,80
TRP164	I(C8)H	7,5	0,17	0,01
SER226	I(C19)H	7,5	0,06	-0,03
ASN233	I(C4)H	7,5	-0,02	-0,04
PHE244	I(C1)H	7,5	-0,07	-0,07
VAL347	I(C5)H	7,5	0,03	-0,01
LEU147	II(C18)H	8	-0,11	-0,05
ALA149	II(C18)H	8	-0,28	-0,11
VAL221	II(C19)H	8	-0,21	-0,10
ILE344	I(C5)H	8	-0,05	-0,06
VAL364	II(C20)H	8	-0,14	-0,07
ILE368	I(C12)H	8	0,14	0,00
PRO129	II(C20)H	8,5	-0,02	-0,04
SER203	I(C8)H	8,5	-0,20	-0,07
LYS220	I(C5)H	8,5	1,64	0,38
PRO246	I(C8)H	8,5	0,14	0,02
MET335	I(C12)H	8,5	0,08	0,04
GLY359	I(C20)H	8,5	-0,19	-0,07
LEU371	I(C12)H	8,5	0,06	0,01
ASN372	I(C12)H	8,5	0,41	0,09
SER373	I(C12)H	8,5	-0,01	-0,02
THR81	II(C20)H	9	-0,10	-0,04
PRO142	II(C19)H	9	0,08	-0,01
LEU143	II(C18)H	9	0,01	-0,01

PRO338	I(C12)H	9	0,13	0,01
ALA346	I(C5)H	9	0,10	0,01
ILE85	I(C20)H	9,5	-0,07	-0,03
ASP120	I(C12)H	9,5	-3,20	-0,82
LEU122	II(C18)	9,5	0,05	0,00
LEU136	II(C20)H	9,5	0,06	0,01
ARG140	II(C20)H	9,5	1,43	0,34
PRO209	I(C4)H	9,5	0,09	0,00
PHE222	II(C19)H	9,5	-0,09	-0,05
LYS223	II(C19)H	9,5	1,64	0,39
ILE245	I(C1)H	9,5	0,10	0,02
CYS337	I(C12)H	9,5	-0,14	-0,05
ILE341	I(C11)H	9,5	-0,02	-0,03
ALA360	II(C20)H	9,5	-0,11	-0,04
LEU361	II(C20)H	9,5	-0,06	-0,04
GLY124	II(C17)H	10	-0,07	-0,03
PHE125	II(C18)	10	0,08	0,01
TYR137	II(C20)H	10	0,06	0,01
GLY138	II(C20)H	10	0,09	0,02
MET208	I(C1)H	10	-0,05	-0,03
THR342	I(C12)H	10	0,10	-0,01
LYS350	I(C5)H	10	1,77	0,43

Table S4: Description of the 5-HT₂AR residues interacting with Lumateperone (LMTP) identified in the binding pocket radius ranging from 2.0 to 10.0 Å. We also show the regions and groups where there is Lumateperone-residue interaction, and the energetic values (in kcal/mol) for $\epsilon=10$ and $\epsilon=40$ calculated by B97D functional combined with the 6-311+G(d,p) basis-set.

LMTP-5-HT ₂ AR Complex				
Residue	Atomic Group	Radius (Å)	Energy ($\epsilon=10$)	Energy ($\epsilon=40$)
ASP155	I(C4)H	2	-19,53	-12,09
VAL156	II(C5)H	2,5	-1,93	-1,74
SER159	II(C6)H	2,5	-3,61	-3,58
THR160	II(C13)H	2,5	-1,51	-1,46
ILE163	II(C12)H	2,5	-1,16	-1,25
LEU228	I(C24)H	2,5	-6,21	-6,35
LEU229	I(C17)H	2,5	-3,23	-3,09
SER242	II(C12)H	2,5	0,87	1,11
PHE243	II(C11)F	2,5	-2,58	-2,45
PHE332	II(C11)F	2,5	-1,60	-1,41
PHE339	I(C14)H	2,5	-7,06	-7,02
LEU362	I(C24)H	2,5	-2,61	-2,54
ASN363	I(C23)H	2,5	-2,08	-1,39
VAL366	I(C22)H	2,5	-3,44	-3,38
PHE340	II(C10)H	3	-3,68	-3,60
ASN343	I(C19)H	3	-1,25	-1,45
TYR370	I(C3)H	3	-2,06	-2,17
ILE152	I(C15)H	3,5	-2,29	-1,92
VAL235	I(C18)H	3,5	-0,90	-0,83
TRP336	I(C4)H	3,5	-4,71	-4,30
GLY359	I(C24)H	3,5	-1,02	-0,74
SER131	I(C2)H	4,5	-0,19	-0,34
TRP151	I(C1)H	4,5	-1,43	-1,23
CYS227	I(C22)H	4,5	-1,13	-1,00
VAL127	I(C2)H	5	-0,36	-0,35
LYS162	II(C11)F	5	2,63	0,28
TRP164	II(C12)H	5	-0,08	-0,22
ALA230	I(C18)H	5	-0,17	-0,10
PRO246	I(C12)H	5	-0,11	-0,19
ILE358	I(C24)H	5	-0,32	-0,24
LEU123	II(C6)H	5,5	-0,34	-0,27
LEU157	II(C7)O	5,5	-0,20	-0,24
ILE210	II(C7)O	5,5	-0,15	-0,21
GLY238	II(C13)H	5,5	-0,14	-0,17
TYR139	I(C23)H	6	-0,19	-0,21
PHE158	II(C6)H	6	0,14	-0,16

ALA161	II(C12)H	6	-0,01	-0,10
SER207	II(C13)H	6	-0,27	-0,17
SER226	I(C22)H	6	0,00	-0,12
SER239	II(C13)H	6	-0,30	-0,28
ALA360	I(C24)H	6	-0,33	-0,15
LEU361	I(C24)H	6	-0,12	-0,12
VAL364	I(C23)H	6	-0,22	-0,14
PHE365	I(C23)H	6	-0,05	-0,19
TYR153	II(C5)H	6,5	-0,33	-0,20
LEU154	II(C5)H	6,5	0,35	0,12
LEU166	II(C11)F	6,5	0,04	-0,03
ILE206	II(C13)H	6,5	-0,02	-0,06
LYS223	I(C24)H	6,5	1,90	0,38
ASP231	I(C18)H	6,5	-2,19	-0,60
VAL241	II(C12)H	6,5	0,07	-0,02
LEU247	II(C11)F	6,5	-0,03	-0,06
VAL333	II(C10)H	6,5	-0,29	-0,13
THR342	I(C24)H	6,5	0,08	-0,05
TRP367	I(C2)H	6,5	-0,40	-0,29
GLY369	I(C4)H	6,5	0,18	-0,05
MET128	I(C3)H	7	-0,29	-0,14
THR134	I(C22)H	7	-0,03	-0,07
SER203	II(C12)H	7	-0,17	-0,08
VAL221	I(C17)H	7	-0,27	-0,15
ASP232	I(C18)H	7	-8,19	-0,57
PHE234	I(C17)H	7	-0,07	-0,10
PHE244	II(C11)F	7	-0,09	-0,09
MET250	II(C11)F	7	0,02	-0,02
ALA346	I(C24)H	7	0,08	-0,01
ILE135	I(C22)H	7,5	0,00	-0,04
TRP141	I(C21)H	7,5	-0,05	-0,06
CYS148	I(C15)H	7,5	-0,30	-0,12
LYS220	I(C18)H	7,5	1,55	0,35
CYS337	II(C10)H	7,5	-0,13	-0,06
GLU355	I(C24)H	7,5	-1,97	-0,51
ASN372	II(C10)H	7,5	0,14	0,01
VAL130	I(C2)H	8	0,17	0,01
HIS165	II(C11)F	8	0,18	0,03
PHE240	II(C12)H	8	-0,07	-0,06
MET335	II(C10)H	8	-0,04	-0,06
VAL347	I(C18)H	8	0,01	-0,02
VAL357	I(C24)H	8	-0,11	-0,05
ALA149	I(C15)H	8,5	-0,25	-0,09
CYS167	II(C11)F	8,5	0,06	0,01
LEU236	I(C18)H	8,5	-0,13	-0,06

ILE245	II(C12)H	8,5	0,05	-0,01
ASP356	I(C24)H	8,5	-2,01	-0,52
ILE368	I(C3)H	8,5	0,13	0,00
LEU116	II(C11)F	9	-0,15	-0,05
ASP120	II(C10)H	9	-3,02	-0,78
MET132	I(C2)H	9	-0,08	-0,04
ILE202	II(C12)H	9	-0,01	-0,01
PHE222	I(C18)H	9	-0,07	-0,06
ILE237	II(C13)H	9	0,02	-0,02
VAL334	II(C10)H	9	-0,07	-0,03
PRO338	I(C24)H	9	0,10	-0,03
ILE344	I(C24)H	9	-0,03	-0,05
ALA119	II(C6)H	9,5	-0,13	-0,05
VAL150	I(C3)H	9,5	-0,07	-0,03
VAL199	II(C12)H	9,5	-0,06	-0,02
GLU224	I(C24)H	9,5	-1,86	-0,47
ASN233	I(C18)H	9,5	0,06	0,00
THR248	II(C11)F	9,5	-0,01	-0,01
PHE329	II(C11)F	9,5	-0,13	-0,04
LEU331	II(C10)H	9,5	-0,09	-0,04
LEU371	I(C3)H	9,5	0,05	0,00
SER373	II(C6)H	9,5	-0,02	-0,02
LEU126	I(C2)H	10	0,16	0,03
PRO129	I(C2)H	10	0,00	-0,01
GLY138	I(C23)H	10	0,09	0,02
ARG140	I(C22)H	10	1,95	0,47
MET208	II(C7)O	10	-0,08	-0,03
PRO209	II(C7)O	10	0,08	0,01
PRO211	II(C5)H	10	-0,02	-0,02
SER219	I(C18)H	10	-0,02	-0,01
ILE341	II(C10)H	10	0,01	-0,01
LYS350	I(C19)H	10	1,71	0,41
