

===== RELAXATION DATA =====

Supplemental Material

*Note: Relaxation rates used in all calculations in the manuscript were rounded off at two decimal places.

-----apo-----

***** T= 293.7 K *****

Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
T3	1.4766	0.069	9.8187	0.111	0.7467	0.049	6.6306	0.2438
A4	1.4321	0.084	11.1771	0.269	0.7836	0.051	8.1088	0.2784
A5	1.4747	0.045	11.1222	0.112	0.7962	0.048	7.7318	0.2436
A6	1.5079	0.051	10.6860	0.121	0.7605	0.047	7.6290	0.2176
F8	1.4545	0.047	11.3717	0.117	0.7934	0.050	8.0333	0.2600
E9	1.4895	0.048	10.9673	0.118	0.8176	0.050	7.9343	0.3133
R10	1.4858	0.051	11.1120	0.120	0.7933	0.050	7.1836	0.1178
Q11	1.4920	0.052	11.3985	0.148	0.8359	0.055	8.1439	0.2689
H12	1.4254	0.045	10.8880	0.063	0.8046	0.058	6.5449	0.2155
M13	1.4462	0.041	10.9107	0.150	0.8235	0.054	7.0028	0.2378
D14	1.4237	0.053	11.0050	0.081	0.8303	0.056	7.6736	0.1270
S15	1.4689	0.065	11.2878	0.147	0.7734	0.062	6.4054	0.3036
S16	1.5079	0.055	11.5557	0.182	0.7312	0.053	6.8826	0.2595
T17	1.4931	0.095	24.0981	0.436	0.6923	0.075		
S18	1.3279	0.099	9.7586	0.453	0.6715	0.082		
A19	1.5618	0.065	10.0800	0.125	0.6954	0.046	6.6729	0.1821
S22	1.3716	0.074	13.0610	1.001	0.5139	0.038	3.0350	0.0920
Y25	1.5675	0.055	11.5294	0.127	0.8043	0.052	8.1854	0.3461
C26	1.5664	0.046	10.2680	0.159	0.8001	0.058	7.0909	0.2082
Q28	1.5123	0.043	10.4499	0.129	0.7898	0.052	7.4506	0.1591
M30	1.5222	0.044	10.9900	0.127	0.8172	0.054	7.5636	0.2701
K31	1.4935	0.038	11.0631	0.073	0.8074	0.054	7.6796	0.2986
S32	1.5354	0.056	11.0593	0.131	0.8016	0.050	7.5400	0.2243
R33	1.5052	0.052	11.4269	0.158	0.8015	0.054	7.1295	0.2593
N34	1.4952	0.051	11.0304	0.123	0.8169	0.052	8.1238	0.1212
L35	1.5189	0.050	10.8442	0.114	0.7795	0.050	6.9435	0.2783
T36	1.5453	0.065	10.5558	0.113	0.7230	0.052	6.8579	0.2627
K37	1.3287	0.045	11.2612	0.136	0.7378	0.046	8.2481	0.2421
R39	1.3662	0.040	9.9931	0.113	0.7592	0.047	6.7140	0.2274
C40	1.4092	0.058	10.0441	0.112	0.7635	0.048	6.6242	0.1308
K41	1.3913	0.044	9.8292	0.132	0.7471	0.052	6.9646	0.1641
V43	1.4426	0.042	10.4252	0.099	0.7584	0.047	7.1210	0.1745
N44	1.3872	0.049	11.4657	0.143	0.7825	0.054	7.5978	0.2858
T45	1.3133	0.041	9.8851	0.124	0.7140	0.050	6.5582	0.1699
F46	1.4216	0.040	14.6471	0.184	0.7418	0.064	7.6739	0.2312
V47	1.4140	0.077	19.8883	0.848	0.6390	0.103		
E49	1.1223	0.032	8.0032	0.059	0.6749	0.044	5.1583	0.1211
S50	1.3957	0.037	10.8544	0.188	0.8001	0.052	7.1157	0.1874
L51	1.5305	0.059	10.6666	0.110	0.7975	0.050	7.5742	0.2215
A52	1.5170	0.061	10.7409	0.127	0.8146	0.048	7.5041	0.2165
V54	1.5023	0.056	10.8841	0.095	0.8120	0.052	7.9346	0.3036
Q55	1.5311	0.057	10.9472	0.171	0.8339	0.052	7.3541	0.2341
A56	1.5104	0.048	11.3546	0.160	0.7804	0.048	7.8700	0.2528
V57	1.4858	0.049	11.9707	0.150	0.8007	0.050	8.1108	0.2850
C58	1.5345	0.046	10.5140	0.218	0.8152	0.049	6.3535	0.0543
S59	1.4505	0.043	10.6949	0.055	0.7873	0.054	7.3766	0.2513
Q60	1.3800	0.047	10.9600	0.149	0.8203	0.056	7.6556	0.2558
K61	1.4009	0.047	10.8266	0.072	0.7779	0.054	7.8139	0.2341
N62	1.3386	0.045	11.5602	0.132	0.8208	0.051	8.2177	0.2446
V63	1.5308	0.064	10.0577	0.233	0.7893	0.048	7.0758	0.2063
A64	1.4128	0.046	10.1952	0.122	0.8006	0.050	6.8465	0.2499
C65	1.4472	0.051	10.4453	0.118	0.7257	0.046	7.0068	0.2559
K66	1.4587	0.105	14.3990	0.279	0.8399	0.095		

N67	1.5009	0.059	9.6345	0.116	0.7635	0.053	6.5392	0.2181
G68	1.5146	0.054	10.4859	0.125	0.7612	0.048	6.8982	0.2674
Q69	1.4286	0.047	13.4065	0.218	0.8197	0.053	7.9343	0.3133
T70	1.4036	0.069	10.1963	0.144	0.7750	0.053	5.8690	0.3011
N71	1.4695	0.051	14.7070	0.174	0.7874	0.062	7.5099	1.1756
C72	1.4625	0.048	10.2637	0.075	0.7808	0.051	7.1035	0.2117
Y73	1.3635	0.051	11.4244	0.110	0.7802	0.055	7.7159	0.1998
Q74	1.3697	0.038	11.8036	0.134	0.7990	0.057	8.6126	0.3760
S75	1.4262	0.047	12.2862	0.152	0.8376	0.056	8.8879	0.3405
Y76	1.5149	0.069	18.2178	6.489	0.7958	0.062	7.2480	0.2358
S77	1.4515	0.050	10.2154	0.100	0.7927	0.052	6.9874	0.2297
T78	1.4448	0.072	11.0196	0.083	0.8121	0.052	7.3113	0.2460
M79	1.4530	0.051	11.2940	0.131	0.7737	0.054	6.6631	0.1630
S80	1.3907	0.046	10.9974	0.060	0.8123	0.055	7.3728	0.1674
T82	1.3186	0.052	28.3148	1.183	0.7433	0.094		
D83	1.5016	0.045	17.2875	0.501	0.8902	0.090		
C84	1.3498	0.050	10.9805	0.093	0.7816	0.053	7.2024	0.2344
R85	1.4721	0.060	10.5975	0.196	0.7893	0.048	7.2735	0.2645
E86	1.4372	0.051	11.0854	0.154	0.7919	0.052	8.1969	0.2857
T87	1.4906	0.055	10.0963	0.099	0.7427	0.048	6.9004	0.2304
G88	1.0217	0.279	5.2383	1.984	0.7042	0.182		
S90	1.3487	0.044	9.9001	0.088	0.7655	0.046	7.3470	0.2232
K91	1.4489	0.046	9.3729	0.102	0.7191	0.045	7.2388	0.1964
Y92	1.4326	0.101	10.5878	0.380	0.7258	0.060		
N94	1.4590	0.055	9.9610	0.139	0.7518	0.047	7.2256	0.2548
C95	1.3647	0.049	9.1809	0.284	0.7571	0.046	6.2081	0.1567
A96	1.4571	0.053	9.4927	0.092	0.7712	0.053	7.4969	0.1925
Y97	1.4242	0.053	10.1532	0.104	0.7740	0.052	6.1724	0.1983
K98	1.4912	0.055	10.5970	0.117	0.8239	0.057	7.6916	0.2698
T99	1.3867	0.063	10.9775	0.194	0.8145	0.055	7.6482	0.2770
T100	1.4486	0.056	12.4584	0.196	0.7988	0.055	7.1626	0.1503
Q101	1.2604	0.069	23.5187	0.783	0.8130	0.086		
K104	1.4515	0.060	10.4502	0.112	0.7885	0.059	7.0269	0.2507
H105	1.5906	0.078	14.5081	0.486	0.7209	0.073	6.9313	0.0116
I106	1.4089	0.047	12.9701	0.154	0.7773	0.056	7.9798	0.3775
I107	1.3536	0.051	12.0626	0.110	0.8287	0.058	7.2103	0.0725
V108	1.3956	0.049	11.9839	0.144	0.7866	0.056	8.5164	0.1852
C110	1.4503	0.049	10.8107	0.132	0.7812	0.055	7.2282	0.1786
G112	1.3940	0.047	9.4203	0.144	0.7557	0.050	6.1501	0.1949
N113	1.3562	0.048	9.5739	0.124	0.7143	0.044	7.0851	0.2326
Y115	1.2929	0.051	10.2937	0.113	0.7075	0.045	7.5712	0.2529
V116	1.4765	0.050	10.6780	0.108	0.7677	0.053	7.1625	0.2147
V118	1.4740	0.035	11.1673	0.160	0.8088	0.064	7.5974	0.1755
H119	1.4321	0.035	14.9890	0.225	0.8099	0.059	6.6299	0.3906
F120	1.4990	0.052	12.6396	0.174	0.8549	0.067	9.0787	0.4658
D121	1.5100	0.052	12.8798	0.141	0.8729	0.069	8.3641	0.5753
A122	1.3752	0.040	10.2464	0.099	0.7977	0.062	6.8578	0.3147
S123	1.4081	0.058	10.6188	0.131	0.7739	0.049	6.8891	0.1487
V124	1.4653	0.046	10.4744	0.148	0.7581	0.051	6.9002	0.1487

***** T= 300.7 K *****

Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
T3	1.6991	0.044	8.0660	0.077	0.7158	0.041	5.7432	0.0535
A4	1.7319	0.067	9.2774	0.136	0.7722	0.050	6.8454	0.1586
A5	1.7374	0.036	9.0917	0.048	0.8047	0.042	6.6130	0.0334
A6	1.7272	0.027	8.8866	0.078	0.7741	0.040	6.6202	0.0480
K7	1.7144	0.021	9.3452	0.228	0.7966	0.041	7.0727	0.0254
F8	1.6746	0.032	9.3099	0.062	0.7690	0.041	6.9444	0.0616
E9	1.7398	0.036	9.3507	0.101	0.7826	0.041	6.8726	0.0370
R10	1.6997	0.037	9.3728	0.049	0.7685	0.041	6.9305	0.0130

Q11	1.6947	0.032	9.4087	0.095	0.8143	0.046	6.9139	0.0793
H12	1.6434	0.030	9.0593	0.105	0.8176	0.049	5.6238	0.0398
M13	1.6814	0.026	9.0934	0.094	0.7624	0.043	5.9818	0.0308
D14	1.6257	0.029	8.9920	0.071	0.7798	0.044	6.6305	0.0795
S15	1.7223	0.037	10.1093	0.117	0.7846	0.054	5.8707	0.1454
S16	1.7115	0.032	9.8036	0.059	0.7318	0.044	5.7146	0.1376
T17	1.7220	0.047	21.8711	0.333	0.7223	0.059		
S18	1.5451	0.090	7.3935	0.251	0.6220	0.075		
A19	1.7524	0.036	8.4667	0.095	0.6856	0.039	5.7196	0.0672
S22	1.5320	0.045	10.1334	0.139	0.5553	0.037	4.9639	0.2919
Y25	1.8057	0.026	9.5753	0.121	0.7730	0.042	6.9940	0.0182
C26	1.7769	0.025	8.6626	0.104	0.7942	0.046	6.3100	0.0685
N27	1.6756	0.021	9.9383	0.119	0.7709	0.049	6.1909	0.1536
Q28	1.7380	0.022	8.6239	0.084	0.7796	0.043	6.3987	0.0473
M30	1.7482	0.027	9.1994	0.108	0.7943	0.045	6.6801	0.0853
K31	1.7054	0.024	9.0613	0.062	0.8216	0.046	6.5967	0.0473
S32	1.7434	0.029	9.0402	0.064	0.7885	0.043	6.4025	0.0114
R33	1.7186	0.033	10.7378	0.115	0.7681	0.046	6.0931	0.1182
N34	1.7106	0.032	9.2850	0.079	0.7916	0.044	7.1623	0.0818
L35	1.7463	0.033	9.9227	0.281	0.7717	0.043	5.9781	0.0809
T36	1.7702	0.041	9.0140	0.152	0.8019	0.050	5.9918	0.0717
K37	1.5667	0.031	9.3237	0.108	0.7533	0.041	7.1289	0.0229
R39	1.5670	0.024	8.0602	0.093	0.7533	0.039	5.6134	0.0442
C40	1.6424	0.035	8.3926	0.041	0.7912	0.043	5.6645	0.0200
K41	1.5825	0.027	8.3645	0.097	0.7407	0.043	5.9731	0.0568
V43	1.6642	0.025	8.5309	0.133	0.7562	0.040	6.2180	0.0215
N44	1.5997	0.033	10.0608	0.100	0.7738	0.046	6.3224	0.0777
T45	1.5217	0.021	8.2183	0.071	0.7484	0.045	5.6596	0.0458
F46	1.6698	0.033	12.6871	0.189	0.7968	0.058	6.3777	0.1722
V47	1.6708	0.065	17.5198	0.300	0.7029	0.080		
E49	1.2604	0.019	6.4138	0.076	0.6736	0.037	4.3453	0.0184
S50	1.6006	0.026	8.8897	0.104	0.8102	0.044	6.1163	0.0474
L51	1.7489	0.028	8.7570	0.068	0.8208	0.044	6.5301	0.0301
A52	1.7378	0.034	8.9030	0.048	0.8029	0.041	6.5067	0.0229
D53	1.6430	0.028	9.0012	0.082	0.7891	0.041	6.4190	0.0187
V54	1.6881	0.023	8.9489	0.066	0.7674	0.042	6.6608	0.0298
Q55	1.7494	0.033	9.0098	0.115	0.8149	0.044	6.3632	0.0452
A56	1.7196	0.028	9.3898	0.073	0.7939	0.041	6.7605	0.0352
V57	1.7010	0.023	9.7686	0.066	0.7870	0.043	7.1090	0.0574
C58	1.7749	0.032	8.1780	0.239	0.8004	0.041	5.1094	0.0838
S59	1.6856	0.032	8.9549	0.081	0.8079	0.047	6.3417	0.0344
Q60	1.5777	0.025	9.1380	0.083	0.7842	0.046	6.5636	0.0868
K61	1.5829	0.021	9.0748	0.064	0.7982	0.046	6.7408	0.0311
N62	1.5646	0.033	9.5861	0.074	0.7800	0.042	7.1251	0.0187
V63	1.7073	0.032	8.7873	0.095	0.7455	0.038	6.1647	0.0129
A64	1.6372	0.033	8.6074	0.070	0.8052	0.043	5.8009	0.0328
C65	1.6536	0.035	8.7572	0.079	0.7416	0.040	6.1031	0.0159
K66	1.7241	0.045	15.0811	0.399	0.8646	0.091		
N67	1.7415	0.032	8.0520	0.059	0.7765	0.047	5.7643	0.0459
G68	1.7217	0.026	8.5580	0.069	0.7669	0.042	6.0005	0.0281
Q69	1.6110	0.032	12.4253	0.086	0.8091	0.046	7.3075	0.1379
T70	1.6280	0.032	8.6141	0.134	0.7774	0.047	4.9503	0.0140
N71	1.6524	0.026	15.0801	0.268	0.7695	0.054	6.0600	0.4776
C72	1.6846	0.025	8.4912	0.094	0.7937	0.045	6.1691	0.0710
Y73	1.5986	0.031	9.4909	0.060	0.7999	0.049	6.3595	0.0437
Q74	1.5709	0.026	9.9044	0.096	0.7815	0.049	7.3459	0.0573
S75	1.6418	0.034	10.1841	0.080	0.8245	0.047	7.6516	0.0428
Y76	1.7126	0.023	18.0072	0.182	0.8097	0.048	6.1309	0.0414
S77	1.6870	0.027	8.2523	0.088	0.7923	0.045	5.9211	0.0145
T78	1.6800	0.040	9.0774	0.125	0.7670	0.044	6.2168	0.1042
M79	1.6643	0.025	9.0980	0.066	0.7699	0.046	5.8121	0.0562

S80	1.6071	0.026	9.4762	0.078	0.8345	0.048	6.2826	0.0207
T82	1.5896	0.065	27.3172	0.870	0.7402	0.071		
D83	1.7029	0.031	15.7049	0.272	0.8359	0.065	6.5369	0.1092
C84	1.5456	0.033	9.1652	0.109	0.7855	0.046	6.1406	0.0292
R85	1.6553	0.032	8.8086	0.062	0.7455	0.038	6.2615	0.0026
E86	1.6441	0.039	9.0418	0.085	0.7750	0.043	7.1227	0.0855
T87	1.7149	0.028	8.3876	0.153	0.7940	0.044	6.1914	0.0471
S90	1.5668	0.022	8.1307	0.094	0.7507	0.039	6.3431	0.0346
K91	1.6630	0.033	7.7962	0.088	0.7568	0.041	6.1689	0.0374
Y92	1.5350	0.078	7.3066	0.404	0.7763	0.079		
N94	1.6488	0.027	8.1806	0.088	0.7853	0.042	6.3015	0.0360
A96	1.6612	0.033	7.7925	0.067	0.7560	0.045	6.3964	0.0438
Y97	1.6423	0.031	8.3869	0.047	0.7957	0.046	5.2711	0.0498
K98	1.6994	0.030	8.5792	0.077	0.8202	0.048	6.6128	0.0662
T99	1.6261	0.041	9.0405	0.136	0.8006	0.048	6.8129	0.0487
T100	1.6599	0.029	10.2819	0.089	0.7947	0.046	6.5083	0.0669
Q101	1.6197	0.043	23.1806	0.580	0.7604	0.064		
N103	1.6365	0.035	13.5946	0.167	0.7156	0.046	5.0809	0.1576
K104	1.6247	0.026	8.6788	0.107	0.7842	0.049	5.7816	0.0139
H105	1.7430	0.031	11.1358	0.140	0.7263	0.054	5.9412	0.0978
I106	1.6539	0.030	10.5789	0.099	0.7869	0.049	6.8498	0.0971
I107	1.5581	0.028	9.1813	0.151	0.6843	0.041	5.9575	0.0929
V108	1.6379	0.021	9.9196	0.074	0.8032	0.050	7.3039	0.0183
A109	1.5900	0.017	11.3319	0.173	0.8037	0.042	7.0727	0.0254
C110	1.6561	0.031	8.7858	0.073	0.7732	0.046	6.1890	0.0556
G112	1.6208	0.032	7.8536	0.078	0.7795	0.044	5.3932	0.0510
N113	1.5991	0.031	7.8891	0.076	0.6841	0.037	6.0950	0.0379
Y115	1.4999	0.026	8.3856	0.060	0.7403	0.040	6.5211	0.0264
V116	1.6834	0.027	8.7971	0.046	0.7857	0.047	6.4792	0.0137
V118	1.7054	0.039	9.0846	0.048	0.7790	0.052	6.3788	0.1631
F120	1.7630	0.070	10.1889	0.223	0.8249	0.059	7.8087	0.3128
D121	1.7429	0.031	11.4962	0.181	0.8443	0.057	7.8625	0.1786
A122	1.5927	0.018	8.5205	0.115	0.7921	0.053	5.8729	0.0466
S123	1.6231	0.031	8.7514	0.080	0.7769	0.042	5.9054	0.0181
V124	1.6514	0.033	8.7400	0.133	0.7489	0.042	6.1113	0.0329

***** T= 310.7 K *****

Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
A4	1.7625	0.090	7.0273	0.251	0.8225	0.072		
A5	1.9534	0.040	7.4058	0.139	0.7870	0.042	5.2664	0.0115
A6	1.9824	0.020	7.2502	0.093	0.7324	0.037	5.3517	0.0183
K7	1.9487	0.017	7.6749	0.086	0.7922	0.042	5.7971	0.0124
F8	1.9371	0.022	7.7902	0.097	0.7987	0.041	5.7373	0.0246
E9	1.9669	0.021	7.5023	0.127	0.7720	0.040	5.5438	0.0125
R10	1.9473	0.035	7.6527	0.112	0.7717	0.041	5.6181	0.0255
Q11	1.9309	0.026	7.6997	0.114	0.7933	0.044	5.6682	0.0201
H12	1.8880	0.029	7.4115	0.119	0.7873	0.047	4.5703	0.0414
M13	1.9427	0.025	7.6655	0.097	0.7748	0.043	4.9647	0.0218
D14	1.8706	0.019	7.4069	0.119	0.7883	0.043	5.4561	0.0551
S15	1.8904	0.046	8.6874	0.162	0.7144	0.053	4.8076	0.4186
S16	1.8291	0.026	8.3261	0.106	0.6961	0.042	4.5756	0.0189
T17	1.9018	0.057	20.4742	0.461	0.7030	0.055		
A19	1.8389	0.047	7.2528	0.124	0.6807	0.040	4.4264	0.0450
S22	1.5890	0.046	8.1958	0.301	0.5709	0.063	4.6814	0.0233
Y25	2.0479	0.022	8.0361	0.087	0.8174	0.043	5.7031	0.0277
C26	2.0234	0.026	7.1054	0.135	0.7884	0.044	5.1205	0.0333
N27	1.9297	0.019	8.2346	0.198	0.7349	0.044	5.0224	0.0431
Q28	1.9853	0.021	7.0965	0.086	0.7733	0.042	5.2120	0.0250
M30	1.9891	0.017	7.7822	0.126	0.8020	0.044	5.3977	0.0403
K31	1.9558	0.018	7.3673	0.080	0.7584	0.041	5.3896	0.0301

S32	2.0107	0.025	7.5284	0.102	0.7597	0.041	5.2404	0.0322
R33	1.9332	0.038	9.9637	0.131	0.7992	0.048	4.9788	0.0736
N34	1.9762	0.029	7.7382	0.074	0.7836	0.044	5.8837	0.0541
L35	2.0134	0.028	8.3876	0.082	0.7818	0.043	4.8839	0.0469
T36	1.9071	0.046	7.6811	0.110	0.7508	0.050	4.8756	0.0217
K37	1.7459	0.035	7.8369	0.127	0.7877	0.045	5.6075	0.0625
R39	1.7868	0.014	6.6285	0.114	0.7603	0.039	4.5729	0.0208
C40	1.8452	0.037	7.0251	0.119	0.7960	0.044	4.6077	0.0329
K41	1.7872	0.018	7.0052	0.061	0.7342	0.041	4.8455	0.0207
V43	1.8876	0.020	7.0745	0.085	0.7581	0.040	5.0745	0.0177
N44	1.8465	0.023	8.7238	0.164	0.7525	0.044	5.1572	0.0240
T45	1.7176	0.034	7.1004	0.086	0.7390	0.045	4.5786	0.0612
F46	1.9380	0.038	11.1691	0.131	0.8149	0.056	5.2217	0.1779
V47	1.8422	0.022	18.1840	0.451	0.7901	0.075		
E49	1.4196	0.016	5.1940	0.062	0.6842	0.037	3.4608	0.0157
S50	1.8454	0.021	7.1610	0.118	0.7916	0.042	5.0510	0.0189
L51	2.0114	0.016	7.2456	0.089	0.7915	0.041	5.3586	0.0172
A52	2.0033	0.025	7.3708	0.129	0.7933	0.040	5.3442	0.0294
D53	1.8846	0.029	7.3357	0.128	0.7852	0.041	5.1956	0.0306
V54	1.9478	0.024	7.2586	0.078	0.7563	0.041	5.3691	0.0256
Q55	2.0131	0.032	7.3212	0.123	0.7647	0.040	5.1929	0.0146
A56	1.9782	0.023	7.5681	0.120	0.8059	0.041	5.5831	0.0153
V57	1.9873	0.021	8.1003	0.107	0.7821	0.041	5.7416	0.0186
C58	2.0570	0.021	7.1838	0.199	0.7849	0.040	4.4221	0.0450
S59	1.9299	0.018	7.3813	0.168	0.7662	0.045	4.1863	0.0596
Q60	1.8300	0.023	7.4026	0.109	0.7674	0.044	5.5206	0.0219
K61	1.8471	0.019	7.3902	0.065	0.7607	0.043	5.4770	0.0423
N62	1.8393	0.024	8.0753	0.091	0.7784	0.039	5.7438	0.0385
A64	1.8479	0.023	7.2702	0.097	0.7800	0.040	4.7443	0.0209
C65	1.8558	0.021	7.1196	0.125	0.7670	0.041	4.9919	0.0132
K66	1.9690	0.043	15.0990	0.301	0.7585	0.073		
N67	1.9409	0.036	6.7730	0.124	0.7771	0.046	4.6856	0.0315
G68	1.9684	0.022	6.9729	0.107	0.7659	0.042	4.7712	0.0223
Q69	1.8254	0.023	11.0970	0.150	0.7766	0.043	5.8095	0.1059
T70	1.7584	0.045	7.3580	0.137	0.7906	0.049	4.1112	0.0516
N71	1.9291	0.042	15.0093	0.151	0.7594	0.049	5.7970	0.4872
C72	1.9133	0.017	7.1534	0.083	0.7763	0.044	4.9659	0.0115
Y73	1.8639	0.028	7.6879	0.111	0.7785	0.047	5.2034	0.0389
Q74	1.8583	0.024	8.2368	0.089	0.8147	0.050	5.9751	0.0564
S75	1.9123	0.015	8.2707	0.138	0.8103	0.044	6.1950	0.0299
Y76	1.9646	0.175	14.2149	0.232	0.7745	0.040	5.3827	0.1159
S77	1.9399	0.031	6.8191	0.126	0.7602	0.042	4.8839	0.0460
T78	1.8351	0.039	7.5849	0.104	0.7715	0.046	4.9606	0.0337
M79	1.8999	0.030	7.3470	0.125	0.7439	0.044	4.6845	0.0715
S80	1.8557	0.015	8.2511	0.093	0.7552	0.042	5.1873	0.0274
T82	1.8601	0.083	32.2088	0.912	0.7660	0.066		
D83	1.9687	0.021	14.3591	0.124	0.7840	0.055	5.5269	0.1232
C84	1.7807	0.023	7.4903	0.089	0.7881	0.045	5.0949	0.0349
E86	1.8988	0.029	7.5097	0.092	0.8036	0.042	5.7244	0.0153
T87	1.9463	0.019	6.9210	0.094	0.7690	0.043	5.0677	0.0239
S90	1.7891	0.019	6.6712	0.060	0.7355	0.038	5.0735	0.0285
K91	1.8777	0.023	6.4378	0.069	0.7277	0.039	4.9971	0.0284
Y92	1.4847	0.261	7.2100	1.156	0.6226	0.124		
N94	1.8736	0.024	6.7438	0.109	0.7521	0.041	5.1208	0.0364
C95	1.7839	0.024	6.6062	0.162	0.7402	0.037	4.6116	0.0494
A96	1.8886	0.022	6.3783	0.122	0.7852	0.046	5.2437	0.0348
Y97	1.8729	0.020	6.8612	0.087	0.7563	0.043	4.3505	0.0244
K98	1.9351	0.021	7.2727	0.090	0.7656	0.045	5.4311	0.0254
T99	1.8248	0.051	7.6456	0.134	0.7870	0.048	5.5566	0.0370
T100	1.9067	0.035	8.2475	0.101	0.7894	0.045	5.2387	0.0318
Q101	1.7596	0.070	22.6794	0.212	0.7750	0.059		

N103	1.7965	0.067	12.1588	0.203	0.7121	0.046	4.2249	0.2030
K104	1.8712	0.022	7.1031	0.117	0.7299	0.044	4.7040	0.0410
H105	1.9220	0.035	8.9915	0.137	0.8031	0.054	4.7658	0.0297
I106	1.9082	0.028	8.8189	0.138	0.7901	0.049	5.5730	0.1375
I107	1.8027	0.026	8.1362	0.106	0.7296	0.044	5.5302	0.0369
V108	1.9246	0.016	8.2372	0.108	0.7778	0.047	6.0327	0.0221
A109	1.9048	0.022	10.1115	0.160	0.7878	0.049	5.9783	0.0300
C110	1.8991	0.029	7.3534	0.128	0.7790	0.046	5.1417	0.0201
G112	1.8403	0.020	6.5049	0.099	0.7576	0.042	4.3789	0.0219
N113	1.7555	0.023	6.8439	0.156	0.7611	0.056	4.6814	0.0233
Y115	1.7247	0.026	6.8556	0.098	0.7277	0.039	5.1923	0.0303
V116	1.9205	0.029	7.3011	0.075	0.7453	0.044	5.1563	0.0166
V118	1.9618	0.037	7.4874	0.138	0.7731	0.050	5.3300	0.2144
H119	1.8757	0.028	10.9669	0.089	0.7402	0.037	4.6116	0.0494
F120	1.9341	0.159	9.0932	0.469	0.8353	0.074		
D121	1.9546	0.019	10.2359	0.143	0.7595	0.048	6.1172	0.0951
A122	1.7988	0.016	6.9239	0.084	0.7993	0.052	4.7290	0.0221
S123	1.8574	0.020	7.5167	0.095	0.7956	0.044	4.8219	0.0306
V124	1.8808	0.022	7.0486	0.108	0.7745	0.040	4.9099	0.0390

-----RNase A/pTppAp-----
--

***** T= 293.7 K *****

Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
T3	1.3890	0.016	11.8049	0.278	0.7426	0.078	7.9005	0.2805
A4	1.4085	0.019	12.9965	0.266	0.7873	0.080	8.9031	0.0842
A5	1.3647	0.012	15.0484	0.416	0.7874	0.080	9.1020	0.1628
A6	1.3836	0.014	13.4025	0.294	0.7438	0.075	8.7491	0.1579
K7	1.3627	0.015	14.2527	0.344	0.7902	0.079	9.7838	0.5093
F8	1.3669	0.012	13.9819	0.392	0.7525	0.077	8.7480	0.1969
R10	1.3599	0.016	13.0073	0.344	0.7633	0.082	8.5899	0.1261
Q11	1.3522	0.020	19.7679	0.181	0.8027	0.095	9.8900	0.2742
H12	1.3221	0.028	12.6952	0.365	0.8201	0.101	7.5316	0.1987
M13	1.3013	0.037	20.4764	1.299	0.7550	0.142		
D14	1.3278	0.021	13.4200	0.340	0.8072	0.086	8.6486	0.3005
S15	1.3622	0.018	14.3869	0.422	0.7762	0.095	8.0334	0.3281
S16	1.4072	0.021	13.9344	0.424	0.6455	0.082	6.8301	0.2931
T17	1.4428	0.048	28.6975	1.655	0.5886	0.099		
A19	1.4670	0.018	13.0576	0.328	0.6927	0.074	7.6212	0.2504
S22	1.3593	0.015	13.7694	0.409	0.6014	0.059	7.0933	0.2370
Y25	1.4449	0.016	13.7051	0.366	0.7888	0.082	9.5516	0.1869
C26	1.4163	0.023	12.2536	0.386	0.7783	0.092	8.2407	0.3158
N27	1.3071	0.072	13.4440	0.899	0.6783	0.100	8.3248	0.3216
Q28	1.3883	0.011	12.1992	0.300	0.8131	0.086	8.5232	0.1159
M29	1.3981	0.024	13.1038	0.511	0.7554	0.075	8.8280	0.3287
M30	1.4151	0.019	13.3197	0.310	0.8152	0.089	9.0383	0.3758
K31	1.3693	0.013	12.9328	0.246	0.8154	0.087	8.9124	0.1861
S32	1.4263	0.019	13.7608	0.341	0.7766	0.083	8.8593	0.2902
R33	1.3649	0.021	14.7765	0.311	0.7889	0.091	8.4652	0.1174
N34	1.3622	0.019	13.7460	0.305	0.7703	0.082	9.6774	0.1378
L35	1.3994	0.028	17.2522	0.403	0.7973	0.087	7.6274	0.2195
T36	1.4535	0.013	12.8497	0.418	0.7204	0.083	7.2573	0.0881
K37	1.2858	0.012	12.6869	0.345	0.7431	0.076	9.3615	0.2407
R39	1.3141	0.011	11.6931	0.357	0.7658	0.078	7.5363	0.2892
C40	1.3190	0.011	11.9087	0.360	0.7436	0.075	7.5225	0.2313
K41	1.3081	0.022	14.4306	0.514	0.7052	0.087	7.5627	0.1855
E49	1.0756	0.011	9.3598	0.337	0.6500	0.068	5.8446	0.1519
S50	1.3244	0.015	12.4932	0.395	0.8099	0.083	8.0534	0.0745

L51	1.4179	0.022	12.4741	0.400	0.7854	0.075	8.6680	0.2020
A52	1.4054	0.017	12.7285	0.361	0.8187	0.079	8.4956	0.0992
D53	1.3339	0.018	13.2289	0.286	0.8072	0.079	8.6645	0.2323
V54	1.4059	0.015	12.8758	0.411	0.7765	0.082	8.7878	0.2918
Q55	1.4083	0.019	12.6535	0.315	0.7822	0.079	8.4873	0.1577
A56	1.3980	0.017	13.4264	0.348	0.7856	0.078	9.0100	0.2245
V57	1.3766	0.009	13.9914	0.315	0.8188	0.085	9.0451	0.1550
C58	1.4256	0.012	12.2043	0.618	0.8048	0.078	5.7647	0.2381
S59	1.3546	0.014	12.2976	0.514	0.8059	0.086	8.1657	0.1103
Q60	1.2611	0.014	12.6396	0.408	0.7836	0.085	8.7116	0.1241
K61	1.2875	0.014	12.6800	0.425	0.8213	0.090	8.6810	0.1335
N62	1.2459	0.014	12.9790	0.271	0.8024	0.081	9.4686	0.4390
V63	1.4514	0.028	13.2316	0.432	0.7373	0.083	7.5447	0.2363
A64	1.3218	0.011	13.3827	0.335	0.7828	0.085	6.4172	0.1907
C65	1.2356	0.025	14.1091	1.048	0.6524	0.085	7.6785	0.0818
K66	1.3645	0.032	15.3313	0.700	0.8281	0.121		
N67	1.4481	0.012	11.7990	0.433	0.7863	0.093	7.2195	0.1099
G68	1.4005	0.016	13.7517	0.428	0.7831	0.087	8.5190	0.2379
T70	1.3144	0.015	11.5922	0.389	0.7766	0.084	6.5957	0.1208
C72	1.3504	0.040	12.0721	0.379	0.7833	0.122	7.3467	0.3105
Y73	1.3031	0.011	13.3914	0.334	0.7989	0.091	8.5450	0.2569
Q74	1.2628	0.027	13.4221	0.416	0.8470	0.095	9.5708	0.1773
S75	1.3073	0.012	14.0531	0.300	0.8346	0.089	10.2536	0.3063
Y76	1.3975	0.012	16.3671	0.397	0.7937	0.086	8.9372	0.1641
S77	1.3639	0.015	11.6708	0.411	0.8258	0.085	8.0215	0.1684
T78	1.3778	0.015	12.6175	0.326	0.7951	0.079	8.3487	0.2988
S80	1.3015	0.016	13.7049	0.205	0.7711	0.084	8.8662	0.4303
T82	1.1055	0.941	28.8352	12.288	0.9052	0.245		
D83	1.3859	0.072	18.6754	1.846	0.7160	0.123		
R85	1.3357	0.011	12.5524	0.556	0.7726	0.082	8.0670	0.1956
E86	1.2802	0.014	12.9200	0.395	0.7662	0.083	8.8011	0.2721
T87	1.4036	0.024	11.7749	0.387	0.7596	0.081	7.9683	0.1620
S90	1.2802	0.014	11.3386	0.332	0.7367	0.073	8.1662	0.0990
K91	1.3617	0.013	11.2805	0.442	0.7019	0.071	8.4211	0.3279
Y92	1.2954	0.038	12.2208	0.494	0.7035	0.084	6.7908	0.3282
N94	1.3398	0.016	11.4263	0.366	0.7653	0.076	8.3609	0.2272
C95	1.2831	0.011	11.2554	0.373	0.7743	0.076	7.1230	0.1758
A96	1.3432	0.021	11.2275	0.490	0.7873	0.086	8.7602	0.1565
Y97	1.3523	0.016	11.9094	0.334	0.7840	0.084	7.1179	0.1396
K98	1.3754	0.014	12.6064	0.388	0.8326	0.090	9.0754	0.1995
T99	1.3071	0.016	12.8748	0.352	0.7925	0.085	9.1395	0.2817
Q101	1.1427	0.085	22.7104	2.122	0.8819	0.164		
N103	1.2308	0.043	16.5333	0.841	0.7096	0.092		
K104	1.3230	0.025	12.1594	0.577	0.7074	0.082	6.7899	0.4413
H105	1.3738	0.021	13.3921	0.383	0.7429	0.089	7.5788	0.2561
I106	1.3235	0.017	13.0987	0.396	0.7860	0.087	8.6836	0.2759
I107	1.2569	0.014	13.9132	0.428	0.7685	0.085	8.5908	0.1304
V108	1.3363	0.022	13.8883	0.447	0.8223	0.093	9.3443	0.2904
C110	1.3515	0.014	13.3697	0.446	0.7698	0.091	8.2859	0.2593
E111	1.3596	0.012	13.0540	0.311	0.7554	0.075	8.5675	0.2534
G112	1.2757	0.017	11.8683	0.371	0.7874	0.083	7.1791	0.1938
N113	1.2585	0.014	11.1618	0.401	0.7611	0.075	8.0668	0.2349
Y115	1.2150	0.009	11.9867	0.345	0.7453	0.076	8.6618	0.3009
V116	1.3895	0.015	12.2751	0.309	0.7775	0.087	8.6094	0.2494
V118	1.3380	0.033	13.3887	0.716	0.7309	0.106	8.5435	0.5781
H119	1.3481	0.017	15.6316	0.507	0.7953	0.098	8.2667	0.3132
D121	1.3743	0.029	12.3872	0.838	0.7820	0.106	7.1621	0.2956
A122	1.2896	0.013	11.8392	0.222	0.7512	0.081	7.6269	0.0941
S123	1.2821	0.016	12.1252	0.307	0.8140	0.085	8.4082	0.2861

***** T= 300.7 K *****

Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
T3	1.8202	0.049	8.9311	0.173	0.7123	0.053	6.2870	0.0645
A4	1.8611	0.054	9.9314	0.201	0.7220	0.053	7.0197	0.0818
A5	1.8330	0.045	11.3839	0.248	0.7645	0.056	7.0871	0.1095
A6	1.7635	0.036	9.7560	0.123	0.7209	0.049	7.0165	0.0629
K7	1.7811	0.032	10.5663	0.160	0.7867	0.051	7.6148	0.0389
F8	1.7675	0.037	10.5463	0.164	0.7613	0.053	7.3496	0.0582
E9	1.7858	0.033	13.6950	0.317	0.7891	0.057	7.1832	0.1238
R10	1.8277	0.041	10.0211	0.161	0.7401	0.055	7.2649	0.0528
Q11	1.7701	0.051	14.9470	0.365	0.8160	0.068	7.4794	0.2131
H12	1.7146	0.036	9.6782	0.363	0.8158	0.070	6.0530	0.1639
M13	1.7438	0.050	14.4617	0.608	0.7608	0.091	6.6409	0.2071
D14	1.7053	0.042	10.0100	0.136	0.7909	0.059	7.0398	0.1029
S15	1.7445	0.074	10.5172	0.242	0.7973	0.079	5.8042	0.4051
S16	1.7895	0.049	10.6485	0.244	0.6785	0.060	6.3431	0.2087
T17	1.7315	0.073	23.6509	0.956	0.7319	0.086		
A19	1.8133	0.059	10.4458	0.182	0.6634	0.052	6.0281	0.1197
S22	1.7723	0.043	9.6343	0.290	0.8290	0.094	6.3559	0.0562
Y25	1.8646	0.034	10.2324	0.163	0.7967	0.056	7.4058	0.0717
C26	1.8227	0.020	8.9457	0.202	0.7669	0.062	6.5699	0.0878
N27	1.7477	0.044	10.4455	0.317	0.8371	0.081	6.2705	0.3392
Q28	1.8005	0.028	9.2168	0.113	0.7874	0.057	6.9144	0.0313
M29	1.8392	0.040	10.1801	0.218	0.7775	0.052	7.1270	0.0524
M30	1.8442	0.038	10.3020	0.121	0.7575	0.057	7.3071	0.1935
K31	1.7332	0.031	9.8440	0.115	0.7712	0.056	7.0003	0.0324
S32	1.8164	0.039	10.1579	0.131	0.7550	0.058	6.9657	0.0539
R33	1.7418	0.036	13.4354	0.229	0.8030	0.071	7.1755	0.2842
N34	1.7309	0.037	10.5670	0.219	0.8435	0.065	7.3465	0.0500
L35	1.8205	0.042	13.1556	0.259	0.7375	0.057	6.2768	0.0870
T36	1.8140	0.056	9.4442	0.190	0.6909	0.062	6.1413	0.0158
K37	1.6521	0.040	9.5790	0.144	0.7472	0.052	7.2987	0.0433
R39	1.6594	0.029	8.7038	0.123	0.7534	0.053	6.0520	0.0276
C40	1.7240	0.036	8.9278	0.154	0.7854	0.055	5.8390	0.0815
K41	1.6537	0.041	10.8316	0.267	0.7628	0.068	6.4024	0.1015
E49	1.3297	0.034	6.8773	0.094	0.6764	0.048	4.5651	0.0285
S50	1.6865	0.032	9.1486	0.164	0.8082	0.055	6.4808	0.0523
L51	1.8349	0.042	9.2041	0.148	0.7847	0.051	7.0103	0.0410
A52	1.8288	0.042	9.4377	0.143	0.7995	0.052	6.9025	0.0272
D53	1.7132	0.036	9.6321	0.186	0.8116	0.055	6.7881	0.0392
V54	1.7606	0.030	9.5255	0.123	0.7714	0.054	7.0367	0.0467
Q55	1.8317	0.041	9.5162	0.124	0.8012	0.055	6.7991	0.0290
A56	1.8034	0.032	9.9877	0.151	0.7810	0.052	7.1959	0.0475
V57	1.7673	0.033	10.4831	0.186	0.7967	0.057	7.4298	0.0397
C58	1.8591	0.032	9.1883	0.279	0.7906	0.052	5.3415	0.1079
S59	1.7262	0.029	9.4610	0.104	0.8114	0.061	6.8365	0.0428
Q60	1.6385	0.034	9.4504	0.178	0.8114	0.061	6.9721	0.0412
K61	1.6150	0.031	9.5456	0.156	0.7714	0.059	7.2010	0.0597
N62	1.6620	0.039	9.7073	0.144	0.7899	0.054	7.4067	0.0392
V63	1.8182	0.043	9.7703	0.172	0.7618	0.060	6.4684	0.0633
A64	1.6705	0.047	9.3102	0.273	0.8776	0.098	5.1659	0.2092
C65	1.7041	0.066	10.8158	0.418	0.7308	0.075	6.2282	0.3212
K66	1.7286	0.065	11.7779	0.366	0.6763	0.078	6.7201	0.4363
N67	1.9080	0.080	9.2042	0.335	0.7955	0.079	6.0333	0.1563
G68	1.8419	0.036	10.0742	0.252	0.7550	0.063	6.5473	0.0394
Q69	1.7203	0.058	10.9628	0.381	0.7109	0.059	7.5966	0.1217
T70	1.6889	0.055	8.5740	0.192	0.7403	0.058	5.2336	0.1413
C72	1.8290	0.063	9.4698	0.320	0.8023	0.088	6.5733	0.2308
Y73	1.6880	0.032	9.8171	0.168	0.8668	0.069	6.7574	0.0548
Q74	1.6597	0.037	10.0657	0.168	0.7863	0.063	7.8810	0.1256
S75	1.7024	0.036	10.5221	0.171	0.7998	0.058	8.0813	0.2469

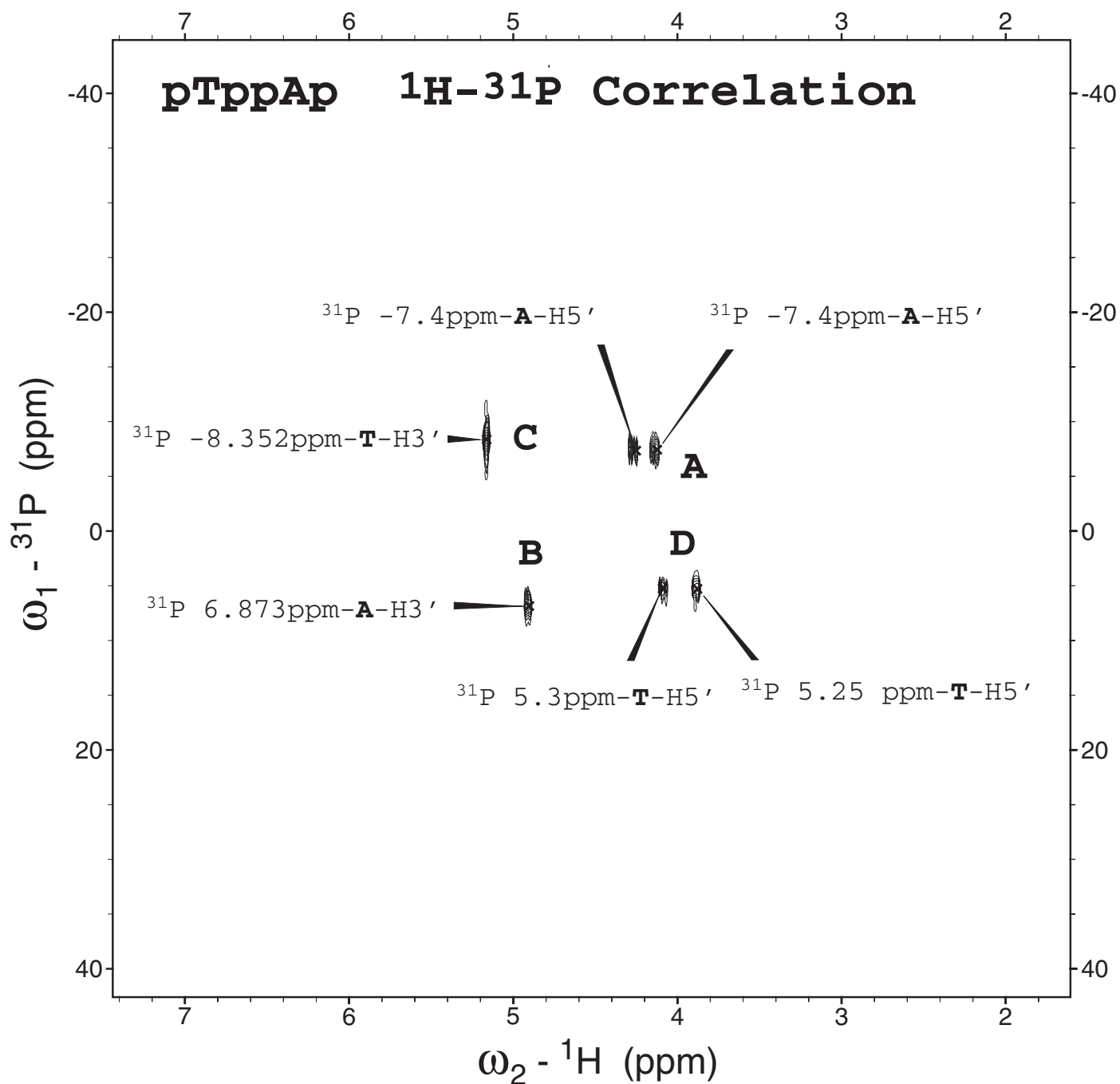
Y76	1.8319	0.045	12.3911	0.180	0.8250	0.060	7.0633	0.1821
S77	1.7833	0.037	8.7482	0.114	0.8046	0.057	6.2698	0.0188
T78	1.7288	0.054	9.2291	0.198	0.7912	0.057	6.6304	0.0571
S80	1.6850	0.030	10.5665	0.159	0.7988	0.060	6.5956	0.1158
T82	1.4909	0.117	25.6898	4.239	0.8154	0.165		
D83	1.7808	0.097	17.3577	0.442	0.7705	0.092		
R85	1.6939	0.032	9.7333	0.173	0.7511	0.055	6.5675	0.0871
E86	1.6818	0.034	9.9610	0.212	0.7712	0.058	7.3114	0.0525
T87	1.7946	0.032	8.8897	0.133	0.7706	0.056	6.5604	0.0507
S90	1.6101	0.029	8.5103	0.129	0.7129	0.048	6.5153	0.0667
K91	1.7330	0.034	8.4659	0.116	0.7512	0.052	6.6108	0.0339
Y92	1.6042	0.069	8.9901	0.461	0.7923	0.081		
N94	1.7448	0.035	8.5521	0.154	0.7855	0.054	6.5839	0.0395
C95	1.6330	0.034	8.3015	0.115	0.7259	0.049	5.6804	0.0467
A96	1.7334	0.039	8.4141	0.104	0.7747	0.059	6.8131	0.0328
Y97	1.7072	0.027	8.8514	0.122	0.7834	0.059	5.6086	0.0465
K98	1.7658	0.035	9.2713	0.131	0.8423	0.063	7.0813	0.0624
T99	1.7209	0.064	9.6525	0.163	0.8385	0.064	7.2096	0.1951
Q101	1.7043	0.071	22.8459	0.993	0.7797	0.107		
N103	1.6571	0.074	14.9264	0.656	0.6702	0.064		
K104	1.7119	0.041	9.0842	0.124	0.8060	0.067	5.9706	0.0546
H105	1.7566	0.040	10.1913	0.146	0.7794	0.062	6.3989	0.1639
I106	1.7002	0.040	10.0022	0.131	0.8146	0.066	6.9973	0.1555
I107	1.6197	0.049	10.4809	0.133	0.8422	0.067	7.1590	0.1250
V108	1.7110	0.035	10.2825	0.199	0.7743	0.063	7.8690	0.1159
A109	1.6983	0.042	9.8250	1.113	0.7867	0.051	6.4734	0.1351
C110	1.7396	0.044	9.2656	0.255	0.7185	0.062	6.3577	0.0392
E111	1.7532	0.037	9.5155	0.179	0.7735	0.052	6.8119	0.0357
G112	1.7138	0.040	9.0515	0.212	0.7684	0.059	5.7186	0.0667
N113	1.6458	0.036	8.3141	0.151	0.8026	0.054	6.3831	0.0574
Y115	1.5788	0.032	8.8277	0.124	0.7285	0.051	6.8397	0.0408
V116	1.7716	0.041	9.4918	0.129	0.7566	0.062	6.8141	0.1306
V118	1.8035	0.084	10.3255	0.436	0.7514	0.092	7.0992	0.3191
H119	1.9552	0.151	14.0697	1.395	0.7958	0.122		
D121	1.9769	0.072	10.5723	0.483	0.7167	0.079	6.8118	0.3093
A122	1.6599	0.035	9.2379	0.146	0.8138	0.065	6.1353	0.0477
S123	1.7097	0.036	8.9310	0.129	0.8306	0.060	6.5108	0.0649
V124	1.6794	0.038	9.4538	0.153	0.7535	0.049	6.5493	0.1149

***** T= 310.7 K *****

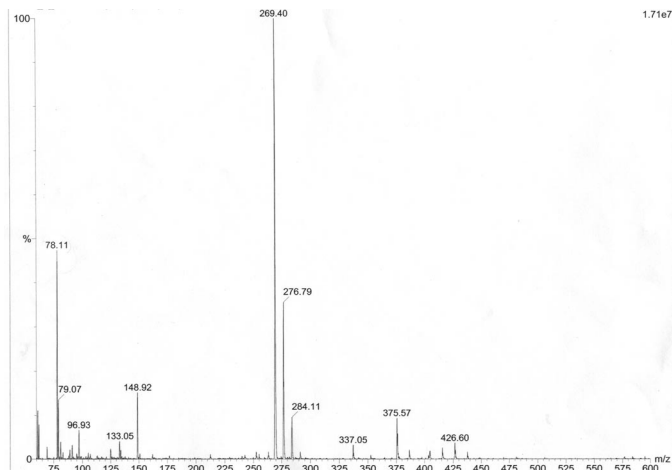
Residue	R1	stddev	R2	stddev	NOE	stddev	EtaXY	stddev
T3	1.8573	0.029	8.4945	0.478	0.7481	0.054	4.8963	0.0590
A4	1.8026	0.051	9.0383	0.527	0.8349	0.065	5.3881	0.1302
A5	1.9130	0.031	10.0982	0.564	0.8014	0.057	5.6313	0.0272
A6	1.9114	0.013	8.3638	0.415	0.7329	0.046	5.4839	0.0459
K7	1.8952	0.015	9.1411	0.477	0.7919	0.053	6.0326	0.0208
F8	1.8810	0.010	9.2879	0.370	0.7863	0.050	5.9905	0.0375
E9	1.9175	0.011	10.4223	0.379	0.7780	0.051	5.8579	0.0301
R10	1.8965	0.037	8.8584	0.406	0.8267	0.057	5.8458	0.0248
Q11	1.8994	0.022	11.9449	0.494	0.7605	0.058	5.7048	0.1252
H12	1.8630	0.029	8.8004	0.384	0.7745	0.062	4.7856	0.0643
M13	1.8728	0.017	10.8158	0.347	0.7854	0.068	5.1717	0.0752
D14	1.8150	0.015	8.8587	0.455	0.7837	0.053	5.6494	0.0369
S15	1.8624	0.053	10.6945	0.442	0.7793	0.083		
S16	1.8033	0.025	10.1003	0.547	0.7000	0.055	4.6079	0.0619
T17	1.7779	0.087	22.4820	1.008	0.7327	0.081		
A19	1.7825	0.051	9.6488	0.427	0.6350	0.050	4.5478	0.0719
S22	1.8616	0.030	10.0244	0.623	0.7584	0.061	5.2227	0.0539
Y25	2.0073	0.025	9.0076	0.424	0.7757	0.050	5.9328	0.0266
C26	1.9756	0.033	8.0526	0.436	0.8345	0.059	5.3425	0.0452

N27	1.8177	0.024	8.9465	0.565	0.6629	0.053	4.7402	0.0895
Q28	1.9321	0.018	8.0425	0.379	0.8120	0.054	5.4860	0.0606
M29	1.9617	0.024	9.1677	0.434	0.7624	0.046	5.5723	0.0566
M30	1.9465	0.012	9.5233	0.448	0.7689	0.053	5.8432	0.0568
K31	1.8716	0.011	8.3903	0.410	0.7766	0.051	5.6151	0.0158
S32	1.9771	0.012	9.1996	0.447	0.7677	0.055	5.4286	0.0759
R33	1.8651	0.042	14.5068	0.579	0.7395	0.063	5.5968	0.1134
N34	1.8970	0.009	9.7479	0.413	0.7984	0.059	6.1384	0.0383
L35	1.9151	0.011	12.1050	0.562	0.7690	0.054	5.0748	0.1296
T36	1.8868	0.055	8.7478	0.451	0.7734	0.069	4.8053	0.3398
K37	1.7683	0.017	8.3003	0.328	0.7988	0.054	5.7724	0.0249
R39	1.7585	0.005	7.6167	0.400	0.7552	0.048	4.7378	0.0381
C40	1.8569	0.018	7.9574	0.372	0.7647	0.050	4.7637	0.0211
K41	1.7205	0.021	10.0909	0.418	0.7292	0.059	4.9395	0.2157
E49	1.3753	0.011	5.7663	0.409	0.7043	0.046	3.5939	0.0388
S50	1.7923	0.007	8.1059	0.418	0.8190	0.052	5.3169	0.0377
L51	1.9538	0.011	8.1898	0.413	0.8302	0.049	5.5629	0.0250
A52	1.9355	0.016	8.3456	0.440	0.8163	0.049	5.5441	0.0138
D53	1.8294	0.007	8.3694	0.408	0.7859	0.049	5.3921	0.0389
V54	1.9082	0.010	8.0955	0.447	0.8116	0.060	5.5058	0.0357
Q55	1.9397	0.009	8.3066	0.411	0.7810	0.049	5.3762	0.0347
A56	1.9260	0.011	8.6589	0.415	0.8026	0.049	5.7411	0.0159
V57	1.9061	0.005	9.0779	0.352	0.7902	0.051	5.9822	0.0133
C58	1.9801	0.014	7.8362	0.384	0.7468	0.046	4.9671	0.0099
S59	1.8739	0.019	7.3488	0.441	0.7263	0.052	4.7203	0.0345
Q60	1.7829	0.019	8.4316	0.425	0.7675	0.053	5.5592	0.0674
K61	1.7617	0.015	8.3684	0.364	0.7518	0.054	5.6929	0.0223
N62	1.7845	0.014	8.6074	0.380	0.7808	0.050	5.9337	0.0610
V63	1.9070	0.015	9.1423	0.552	0.7387	0.053	5.3437	0.0355
A64	1.7836	0.025	9.0935	0.421	0.7899	0.061	4.8109	0.1329
C65	1.7379	0.054	10.7084	0.693	0.8226	0.082	5.6122	0.0750
K66	1.8631	0.045	12.8460	0.558	0.7529	0.091		
N67	1.9220	0.063	8.0542	0.629	0.6828	0.070	4.6667	0.1080
G68	1.8833	0.016	9.1342	0.481	0.8088	0.062	5.2244	0.0935
Q69	1.8050	0.025	11.1372	0.633	0.7707	0.067	5.7207	0.3252
T70	1.7585	0.037	8.2197	0.531	0.7825	0.059	4.3143	0.0409
C72	1.9026	0.037	8.1252	0.473	0.8218	0.075	5.3487	0.0320
Y73	1.8165	0.015	9.3694	0.462	0.7924	0.053	5.3226	0.0590
Q74	1.7901	0.016	8.8514	0.398	0.8306	0.062	6.1615	0.0409
S75	1.8609	0.010	9.1983	0.447	0.7906	0.051	6.4260	0.0380
Y76	1.9195	0.006	9.7629	0.431	0.7932	0.051	5.5369	0.0545
S77	1.8731	0.020	7.8445	0.476	0.7573	0.050	5.1116	0.0555
T78	1.8116	0.028	8.3208	0.455	0.8220	0.060	5.1316	0.0461
S80	1.8111	0.023	10.0514	0.412	0.7885	0.054	5.3431	0.0750
T82	1.6818	0.069	42.1936	2.433	0.8229	0.118		
D83	1.8789	0.038	17.7948	0.825	0.7916	0.071	5.4881	0.3018
R85	1.8097	0.017	8.4626	0.412	0.7641	0.053	5.2131	0.0304
E86	1.8196	0.009	8.7753	0.468	0.8161	0.055	5.8920	0.0632
T87	1.9114	0.021	7.9202	0.460	0.7552	0.050	5.1625	0.0244
S90	1.7273	0.012	7.2599	0.348	0.7471	0.047	5.2128	0.0199
K91	1.8372	0.008	7.4642	0.444	0.7468	0.049	5.2135	0.0305
Y92	1.4070	0.140	6.6086	0.687	0.7737	0.119		
N94	1.8254	0.009	7.6669	0.446	0.7505	0.048	5.2204	0.0222
C95	1.7258	0.015	7.3078	0.418	0.7760	0.049	4.5611	0.0231
A96	1.8294	0.008	7.4283	0.426	0.7313	0.052	5.3909	0.0873
Y97	1.8139	0.022	7.8526	0.428	0.8012	0.056	4.5389	0.0705
K98	1.9019	0.009	8.1663	0.397	0.7853	0.056	5.6638	0.0182
T99	1.7340	0.033	8.9489	0.508	0.7914	0.057	5.6516	0.0564
Q101	1.6920	0.071	23.3158	1.405	0.7836	0.085		
N103	1.6851	0.046	16.1126	0.510	0.6961	0.060	4.5072	0.0701
K104	1.8150	0.020	7.9388	0.432	0.7666	0.058	4.8500	0.0373

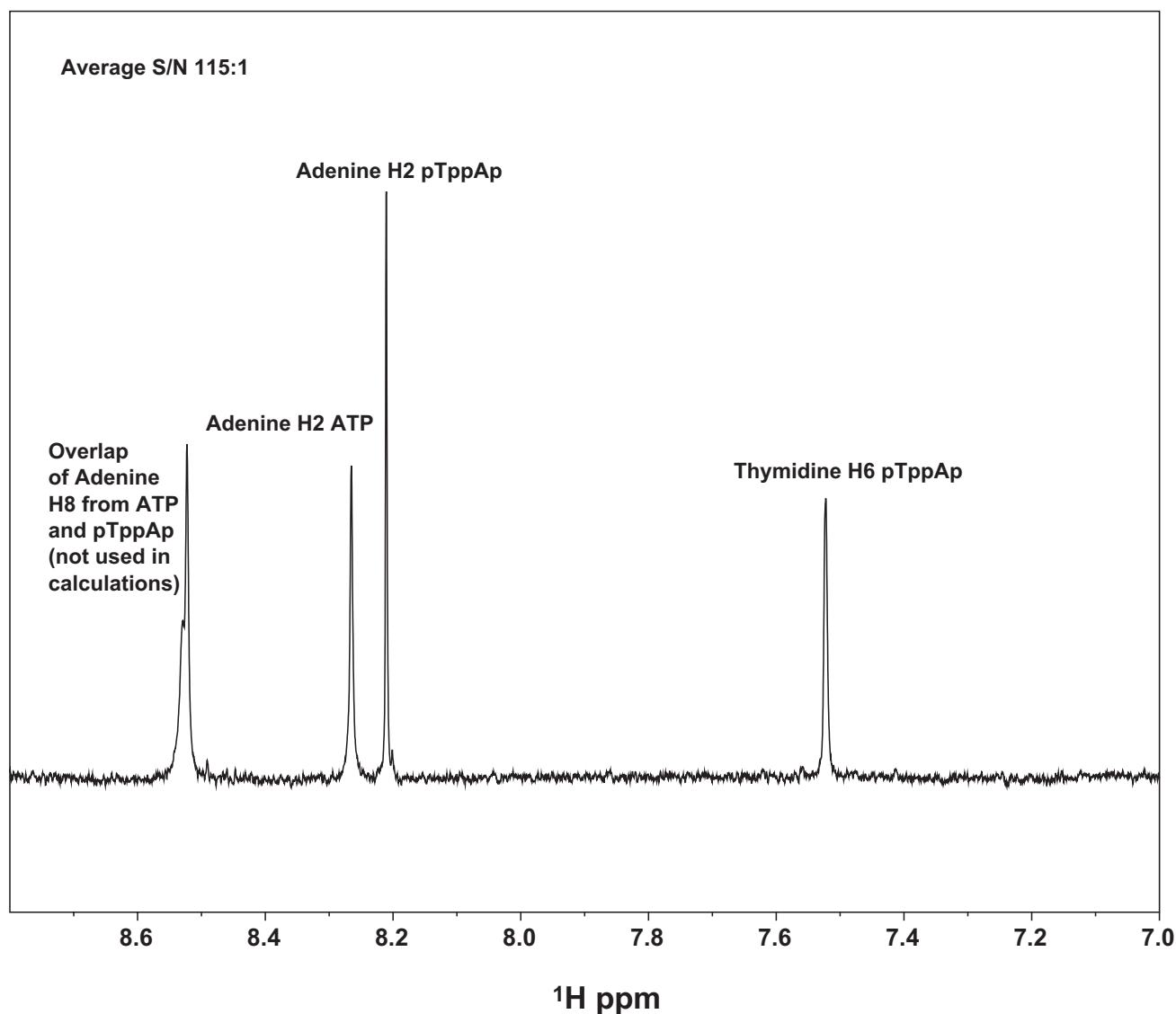
H105	1.8806	0.011	8.7328	0.437	0.7857	0.055	5.1003	0.0127
I106	1.8449	0.017	8.8958	0.396	0.7866	0.058	5.7897	0.0644
I107	1.7558	0.019	8.8665	0.468	0.7779	0.057	5.5699	0.0406
V108	1.8539	0.025	9.0890	0.443	0.8235	0.063	6.2114	0.0530
A109	1.8381	0.018	9.2710	0.440	0.7966	0.056	5.3840	0.0723
C110	1.8262	0.024	8.4641	0.477	0.7584	0.061	5.3881	0.0615
E111	1.8654	0.015	8.6573	0.490	0.7624	0.046	5.5733	0.0212
G112	1.7809	0.018	8.9975	0.623	0.7489	0.054	4.7320	0.1124
N113	1.7158	0.018	7.2579	0.454	0.7899	0.052	4.9346	0.0164
Y115	1.6818	0.014	7.6204	0.415	0.7135	0.046	5.4284	0.0419
V116	1.8616	0.012	8.1537	0.427	0.7679	0.059	5.3711	0.0403
V118	1.8638	0.058	8.7943	0.680	0.7949	0.090		
H119	1.6752	0.196	8.4306	3.215	1.5413	0.773		
D121	1.9697	0.055	11.4340	0.613	0.9444	0.109	6.4400	0.0586
A122	1.7761	0.012	8.7096	0.473	0.7681	0.060	4.7615	0.0329
S123	1.7899	0.015	8.2179	0.461	0.7977	0.054	5.1426	0.0273
V124	1.8731	0.012	8.1339	0.407	0.8302	0.049	5.3027	0.0186



Two dimensional ^1H - ^{31}P correlation spectrum of pTppAp at 500 MHz. The data was acquired at a 298 K using spectral widths in t1 and t2 of 20000 and 5000 Hz. ^{31}P decoupling during acquisition was applied using the GARP sequence.



Negative mode electrospray mass spectroscopy of pTppAp. Data were acquired on a Waters Micromass ZQ negative mode mass spectrometer. The mass (M^{3-}) of pTppAp was 269.4 whereas the theoretical mass is 269.3.



One-dimensional proton NMR spectrum of 50 μM ATP with a measured but unknown concentration of pTppAp. The spectrum was acquired at 600 MHz in D_2O with presaturation of the residual HDO resonance. 2000 transients were acquired with a 30 second (fully relaxed) recycle delay. The absorbance at 260 nm for ATP and pTppAp was determined prior to adding each component to the NMR tube. The ratio of the absorbance of pTppAp:ATP was 1:1. Using an extinction coefficient, ϵ for ATP = 15,400 $\text{M}^{-1} \text{cm}^{-1}$, the apparent extinction coefficient for pTppAp was calculated as,

$$\epsilon_{\text{pTppAp}}^{260\text{nm}} = 15400 \left(\frac{\text{Area}_{\text{ATP}}}{\text{Area}_{\text{pTppAp}}} \right), \text{ in which Area}_x \text{ is the integrated peak area for}$$

the pTppAp (adenine H2 and thymidine H6 protons) and the ATP (adenine H2 proton) resonances. Due to overlap the H8 protons of Adenine were not used for this calculation. The calculated molar extinction coefficient for pTppAp is $16000 \pm 800 \text{ M}^{-1} \text{cm}^{-1}$ (at pH = 6.4 and room temperature). The spectrum was referenced to DSS and the assignments based on the NMR spectrum of the individual components and published values.