

**Supplementary Material**

**Insights into internal dynamics of 6-Phosphogluconolactonase from *Trypanosoma brucei* studied by NMR and Molecular Dynamics**

Paolo A. Calligari,<sup>1,2,3,†</sup> Gilmar F. Salgado,<sup>1,2,3,\*,§,†</sup> Philippe Pelupessy,<sup>1,2,3</sup> Philippe Lopes,<sup>4</sup> Jamal Ouazzani,<sup>4</sup> Geoffrey Bodenhausen,<sup>1,2,3,5</sup> and Daniel Abergel<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Département de Chimie, Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France.

<sup>2</sup> Université Pierre-et-Marie Curie, Place Jussieu, 75005 Paris, France.

<sup>3</sup> UMR 7203 CNRS, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France.

<sup>4</sup> Institut de Chimie des Substances Naturelles, UPR 2301 CNRS, avenue de la Terrasse, 91198 Gif sur Yvette Cedex, France.

<sup>5</sup> Institut de Sciences et Ingénierie Chimiques, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1015 Lausanne, Switzerland.

<sup>§</sup> Current address: Laboratoire ARNA (INSERM U869), Institut Européen de Chimie et Biologie, 2 rue Robert Escarpit, 33 076 Pessac Cedex, France

<sup>†</sup> Both authors contributed equally to this work

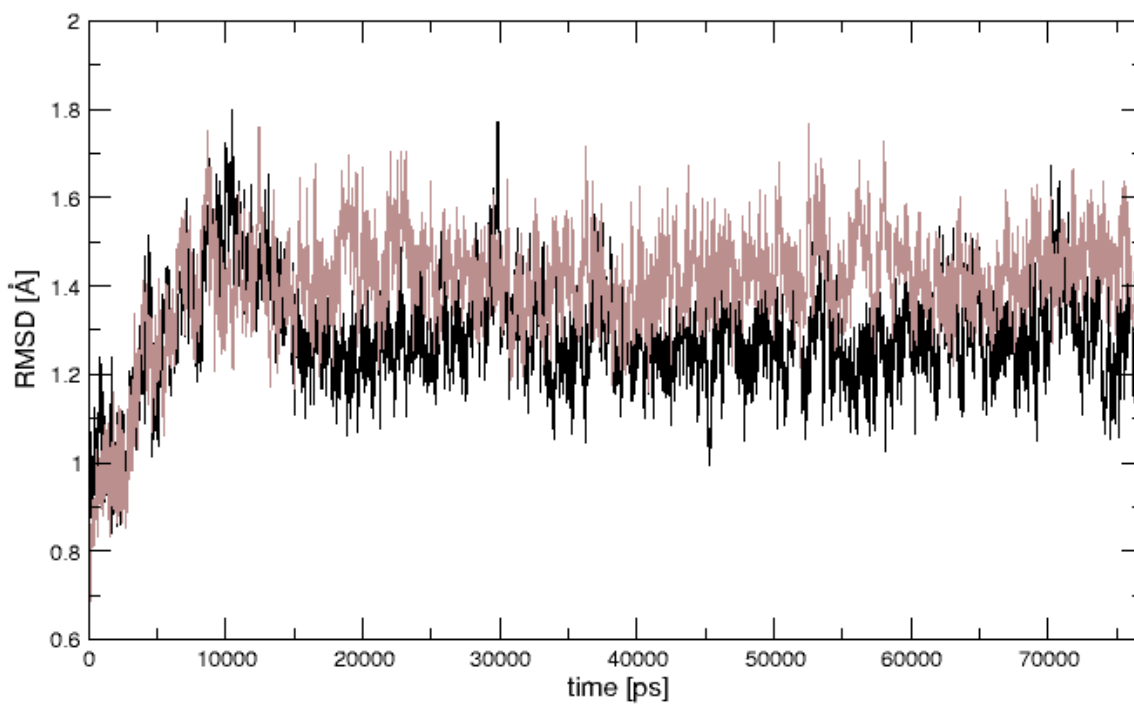


Figure S1: Root-mean-square deviation (RMSD) of backbone atoms from their positions in the initial structure calculated from MD simulations of *apo-Tb6PGL* (black) and *holo-Tb6PGL* (red).

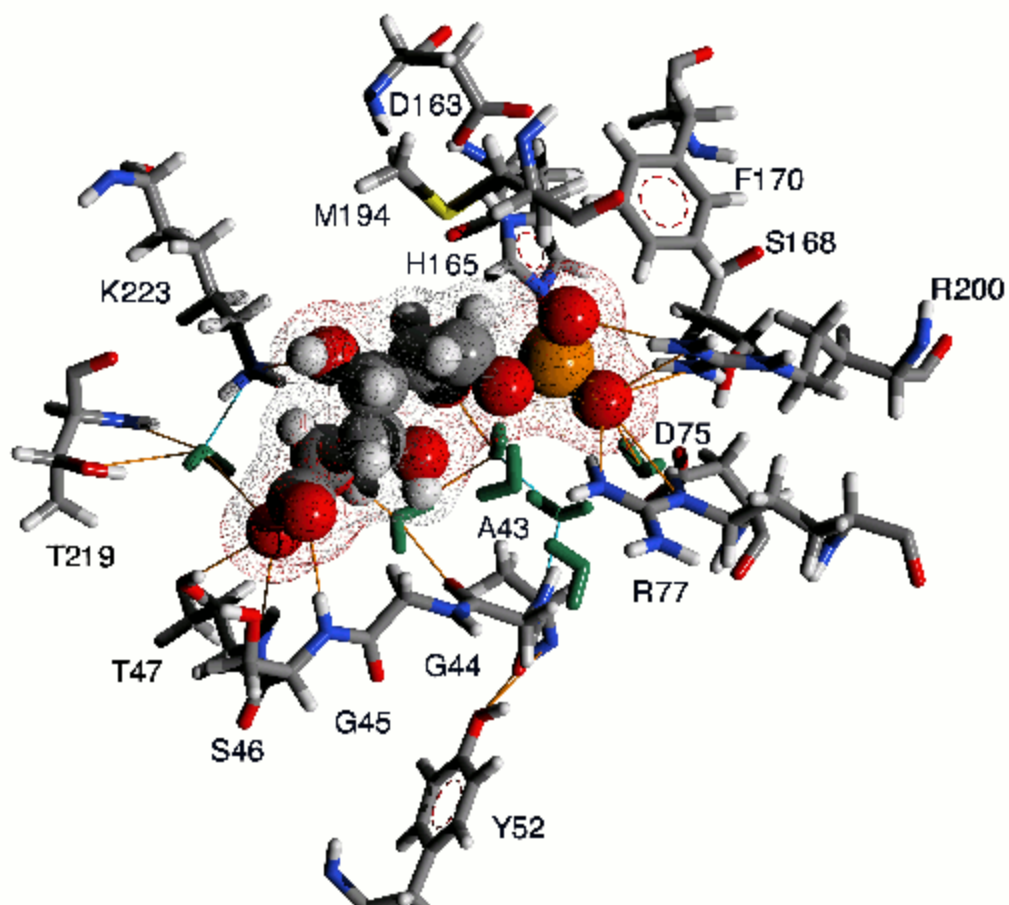


Figure S2. Schematic representation of the residues in the binding pocket with 6PGA as ligand (sphere representation).

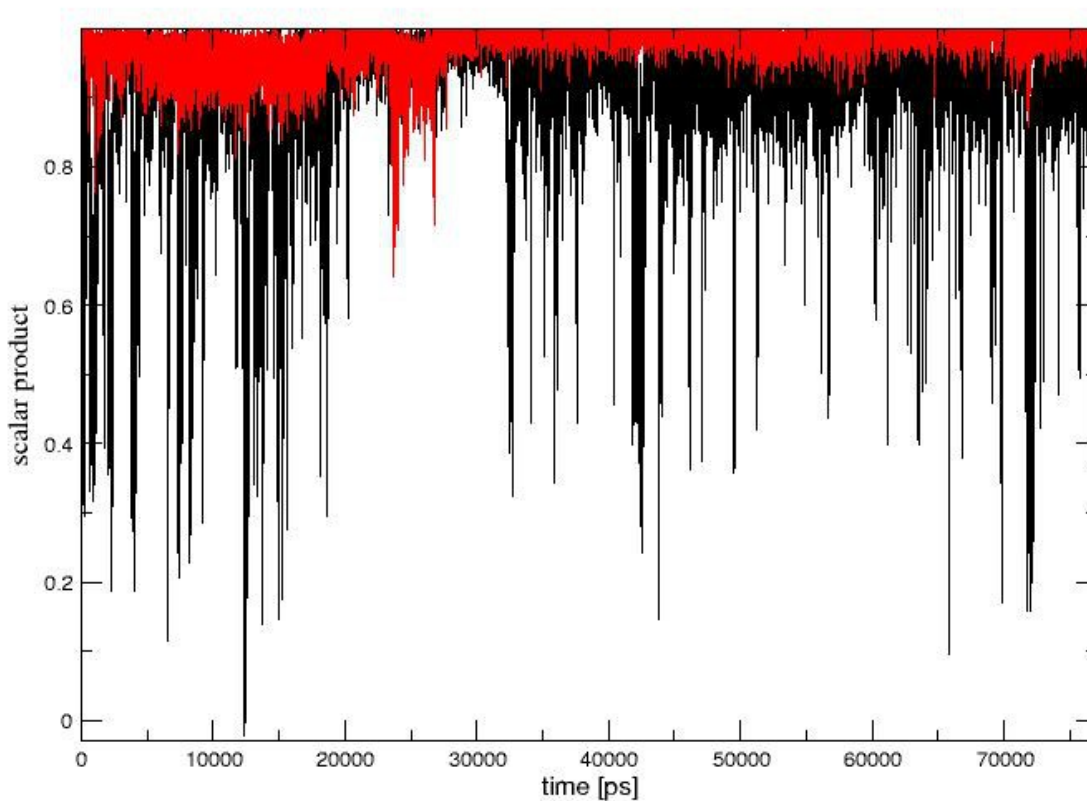


Figure S3. Scalar product of a vector  $\mathbf{r}(t)$  parallel to the  $C\beta$ - $C\gamma$  bond of H165 with its initial value  $\mathbf{r}(t = 0)$  in MD simulations of *apo*-(black) and *holo*-(red) *Tb6PGL*.

**<sup>15</sup>N amide relaxation rates of apo-Tb6PGL at 900 MHz**

Res.	R <sub>1</sub>	σ <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	σ <sub>2</sub>	NOE	σ <sub>N</sub>
6	0.41	0.02	22.47	3.68	0.74	0.04
7	0.38	0.02	32.2	0.83	0.78	0.02
8	0.38	0.02	35.82	0.84	0.76	0.03
9	0.38	0.02	28.89	1.23	0.9	0.03
10	0.36	0.02	33.83	1.1	0.91	0.03
11	0.41	0.03	32.4	0.78	0.69	0.03
12	0.41	0.02	29.29	1.47	0.69	0.03
14	0.41	0.01	34.51	0.63	0.76	0.04
15	0.4	0.01	35.55	0.89	0.87	0.04
16	0.43	0.01	34.16	0.77	0.89	0.04
17	0.39	0.01	35.82	0.69	0.64	0.03
18	0.41	0.02	39.68	1.09	0.89	0.04
19	0.4	0.01	38.43	1.01	0.96	0.05
20	0.39	0.01	38.04	2.08	0.82	0.04
22	0.46	0.03	36	1.04	0.78	0.08
23	0.41	0.02	36.14	0.85	0.87	0.03
24	0.35	0.03	44.01	2.7	0.72	0.1
25	0.48	0.04	34	2.18	0.71	0.12
26	0.41	0.02	35.59	1.44	0.73	0.04
27	0.41	0.02	34.52	1.5	0.81	0.07
28	0.33	0.06	34.36	4.16	0.95	0.17
29	0.38	0.02	36.1	0.99	0.89	0.03
30	0.41	0.01	34.66	0.68	0.91	0.02
31	0.41	0.01	30.28	1.78	0.77	0.03
32	0.63	0.01	23.97	0.72	0.7	0.02
33	0.44	0.02	29.53	0.53	0.57	0.02
34	0.47	0.01	31.86	0.99	0.71	0.02
35	0.42	0.01	35.29	0.61	0.6	0.02
36	0.39	0.02	34.63	2.02	0.72	0.03
38	0.38	0.01	34.86	0.45	0.86	0.02
39	0.38	0.02	35.44	1.34	0.91	0.05

40	0.39	0.03	37.56	1.79	0.97	0.11
41	0.35	0.03	35.79	2.13	0.92	0.1
42	0.37	0.03	34.97	1.71	0.79	0.08
43	0.36	0.02	34.71	1.47	0.87	0.06
44	0.38	0.02	34.86	1.18	0.84	0.04
45	0.41	0.02	34.79	4.39	0.72	0.02
46	0.44	0.01	33.48	2.12	0.66	0.06
47	0.43	0.02	27	1.24	0.68	0.05
49	0.44	0.01	34.7	0.57	0.82	0.03
51	0.45	0.03	33.21	4.3	0.61	0.06
52	0.45	0.02	35.47	0.59	0.82	0.02
53	0.41	0.02	34.9	1.11	0.87	0.04
54	0.4	0.02	38.67	0.89	0.96	0.05
56	0.38	0.02	34.65	1.44	1.03	0.05
57	0.39	0.02	35.25	1.45	0.8	0.05
58	0.38	0.02	32.85	0.7	0.96	0.05
59	0.39	0.01	36.55	1.4	0.82	0.04
60	0.39	0.01	36.36	0.76	0.87	0.03
61	0.37	0.02	37.45	0.77	0.73	0.04
62	0.38	0.01	36.19	0.56	0.73	0.02
63	0.39	0.01	34.26	0.98	0.73	0.03
64	0.38	0.02	37.33	0.46	0.77	0.04
65	0.47	0.01	33.12	0.4	0.66	0.02
66	0.37	0.01	33.19	0.85	0.89	0.03
67	0.4	0.01	33.19	0.49	0.89	0.03
68	0.41	0.02	36.74	0.59	0.88	0.03
69	0.39	0.01	35.27	1.36	0.96	0.07
70	0.36	0.01	32.67	0.66	0.95	0.04
71	0.36	0.01	33.56	0.75	0.87	0.04
72	0.4	0.01	36.86	0.43	0.94	0.05
73	0.4	0.02	32.39	1.18	0.79	0.04
74	0.35	0.01	35.83	1.36	0.78	0.05
75	0.38	0.01	40.18	1.66	1.1	0.05
76	0.4	0.01	36.01	0.34	0.85	0.03

77	0.38	0.02	33.74	0.98	0.97	0.05
78	0.35	0.01	30.56	0.51	0.91	0.03
79	0.37	0.01	34.41	0.55	0.81	0.02
81	0.45	0.06	30.4	0.69	0.71	0.02
82	0.47	0.01	33.46	0.87	0.68	0.03
83	0.43	0.02	33.03	0.48	0.81	0.03
84	0.54	0.06	36.22	0.32	0.71	0.02
85	0.57	0.11	29.62	0.33	0.52	0.01
86	0.41	0.01	37.74	0.87	0.84	0.03
87	0.4	0.03	54.59	4.5	0.73	0.09
88	0.39	0.02	35.79	1.16	0.93	0.06
89	0.42	0.01	37.64	0.86	0.99	0.04
90	0.36	0.01	36.18	0.62	0.69	0.03
91	0.45	0.01	35.37	0.5	0.79	0.04
92	0.37	0.01	37.24	0.83	0.88	0.03
93	0.39	0.02	37.5	0.88	0.82	0.03
94	0.4	0.02	37.36	1.43	0.92	0.07
95	0.4	0.02	34.23	1.01	0.8	0.04
96	0.38	0.02	31.94	2.39	1.09	0.07
97	0.43	0.02	37.12	1.11	0.8	0.04
98	0.43	0.02	38.3	0.77	0.9	0.04
99	0.4	0.02	36.36	1.1	0.84	0.02
101	0.38	0.02	30.3	0.9	0.75	0.02
102	0.4	0.01	33.67	0.74	0.93	0.03
103	0.38	0.01	36.23	0.87	0.74	0.03
104	0.36	0.01	36.9	0.9	0.9	0.03
105	0.42	0.02	22.56	4	0.91	0.07
107	0.37	0.01	36.5	0.53	0.88	0.04
108	0.34	0.02	33.11	0.6	0.68	0.02
109	0.38	0.02	28.9	0.52	0.64	0.02
110	0.44	0.01	36.36	0.59	0.78	0.04
111	0.46	0.01	33	0.33	0.72	0.02
112	0.45	0.01	32.79	0.28	0.7	0.02
113	0.48	0.01	29.94	0.21	0.45	0.01

115	0.54	0.02	24.39	0.5	0.23	0.02
116	0.52	0.02	27.4	0.6	0.32	0.01
117	0.64	0.02	20.26	0.63	0.32	0.01
118	0.44	0.02	30.67	0.7	0.5	0.02
119	0.38	0.01	34.53	0.61	0.71	0.03
120	0.4	0.01	34.13	0.41	0.86	0.03
121	0.41	0.01	37.59	0.77	0.8	0.03
122	0.39	0.02	35.34	1	0.74	0.03
123	0.39	0.01	36.23	0.53	0.91	0.03
124	0.39	0.01	35.97	0.67	0.7	0.02
125	0.38	0.02	37.17	0.75	0.76	0.02
126	0.38	0.01	36.23	0.8	0.79	0.02
127	0.37	0.02	37.59	0.5	0.83	0.03
128	0.37	0.01	33.62	0.84	0.75	0.02
129	0.44	0.02	31.85	1.1	0.8	0.02
130	0.43	0.01	33.78	1.4	0.87	0.03
131	0.36	0.01	34.36	2	0.9	0.03
132	0.4	0.01	37.88	0.9	0.84	0.03
133	0.39	0.02	35.09	0.7	0.79	0.02
134	0.4	0.02	37.04	0.87	0.89	0.03
135	0.37	0.01	36.23	0.4	0.87	0.02
136	0.37	0.02	33.56	1.24	0.82	0.03
137	0.4	0.02	34.01	1.5	0.74	0.03
138	0.42	0.03	36.36	1.7	0.89	0.06
140	0.32	0.01	32.36	0.5	0.77	0.01
141	0.38	0.02	32.47	1	0.84	0.03
142	0.44	0.02	30.96	0.5	0.71	0.02
143	0.46	0.01	30.86	0.54	0.79	0.02
144	0.68	0.02	21.23	0.54	0.56	0.01
145	1.09	0.11	9.9	8.1	0.33	0.09
146	0.54	0.03	25.38	0.5	0.42	0.02
147	0.58	0.02	28.17	1.5	0.44	0.02
149	0.41	0.02	32.14	0.76	0.64	0.01
150	0.39	0.01	34.13	0.86	0.76	0.02



152	0.37	0.01	32.57	0.56	0.92	0.03
154	0.38	0.01	35.77	1.1	1.02	0.05
155	0.43	0.02	37.27	4.2	0.85	0.14
156	0.35	0.02	34.36	2.5	1.04	0.18
157	0.38	0.05	41.12	4.3	0.95	0.15
158	0.43	0.03	34.33	3.42	0.8	0.11
159	0.36	0.02	33.56	0.62	0.93	0.03
160	0.38	0.01	31.02	0.9	0.92	0.05
161	0.37	0.01	31.15	0.73	0.9	0.02
162	0.39	0.02	37.81	0.91	0.77	0.03
163	0.43	0.02	37.31	0.8	0.88	0.04
164	0.4	0.01	36.5	1.4	0.94	0.04
165	0.44	0.01	36.63	0.5	0.78	0.02
166	0.42	0.02	34.79	0.73	0.79	0.02
167	0.39	0.01	33.33	0.6	0.83	0.04
168	0.36	0.01	38.31	1.1	0.88	0.04
169	0.37	0.02	34.48	0.9	0.82	0.03
170	0.34	0.01	32.68	2.96	0.84	0.05
172	0.39	0.01	33.11	0.73	0.63	0.02
173	0.4	0.02	35.05	0.72	0.89	0.04
174	0.41	0.01	32.95	0.63	0.81	0.04
175	0.41	0.01	35.84	1	0.78	0.03
176	0.39	0.02	35.59	0.63	0.84	0.02
177	0.39	0.01	35.46	0.56	0.79	0.02
178	0.37	0.01	34.13	0.43	0.83	0.02
179	0.36	0.01	31.05	0.42	0.79	0.02
180	0.42	0.01	32.68	1.53	0.7	0.04
181	0.39	0.01	33.78	0.9	0.66	0.03
182	0.39	0.02	37.88	0.52	0.76	0.03
183	0.4	0.02	36.9	0.7	0.8	0.04
184	0.38	0.02	35.54	0.53	0.87	0.03
185	0.36	0.01	35.29	0.55	0.88	0.03
186	0.37	0.01	34.76	0.62	0.84	0.03
187	0.38	0.02	34.81	0.81	0.85	0.03

188	0.4	0.01	32.64	1.42	0.93	0.04
189	0.38	0.02	28.25	1.71	0.75	0.02
192	0.64	0.02	18.94	0.85	0.18	0.01
193	1.18	0.03	10.78	1	0.41	0.02
194	0.89	0.01	17.7	1.1	0.61	0.02
195	0.51	0.02	28.41	0.75	0.63	0.02
197	0.41	0.01	33.39	1.2	0.77	0.03
198	0.34	0.03	36.05	0.52	0.81	0.02
199	0.4	0.01	31.03	0.6	0.77	0.02
200	0.38	0.01	34.72	0.61	0.79	0.03
201	0.39	0.01	32.68	0.67	0.96	0.04
202	0.36	0.01	34.48	0.5	0.79	0.03
203	0.39	0.01	39.31	0.8	0.87	0.03
204	0.38	0.01	33.98	0.6	1	0.05
206	0.38	0.01	34.48	0.57	0.86	0.02
207	0.38	0.02	35.21	1.4	0.83	0.04
208	0.39	0.01	33.22	1.12	0.97	0.06
209	0.39	0.01	35.92	1	0.82	0.04
210	0.37	0.02	42.66	2	1.28	0.17
211	0.59	0.05	36.5	4.4	1.32	0.3
212	0.32	0.03	35.06	1.16	0.91	0.07
213	0.41	0.05	30.49	8.1	0.97	0.17
214	0.33	0.01	32.32	0.51	0.74	0.02
215	0.4	0.04	32.94	1.5	0.86	0.09
216	0.36	0.01	35.29	2	1	0.13
217	0.32	0.03	37.95	3.1	0.76	0.13
218	0.48	0.06	25.51	3.11	0.62	0.06
219	0.38	0.01	26.74	0.73	0.91	0.04
220	0.36	0.02	33.43	0.87	0.73	0.03
221	0.4	0.04	35.46	0.7	0.77	0.03
222	0.41	0.02	37.3	0.71	0.78	0.03
223	0.39	0.01	37.15	0.65	0.79	0.03
224	0.39	0.02	36.32	1	0.81	0.04
225	0.41	0.01	35.46	1.44	0.86	0.05

226	0.39	0.02	39.68	0.84	0.9	0.03
227	0.38	0.01	36.34	0.62	0.94	0.03
228	0.46	0.01	31.91	1.1	0.82	0.03
229	0.39	0.02	29.46	0.34	1.15	0.04
230	0.41	0.02	35.71	0.64	0.97	0.04
231	0.38	0.01	35.2	0.81	0.82	0.03
232	0.4	0.02	38.7	0.51	0.84	0.03
233	0.4	0.02	31.03	0.53	0.77	0.02
234	0.46	0.02	28.79	0.65	0.67	0.02
235	0.59	0.02	26.53	5.23	0.58	0.02
236	0.58	0.12	26.04	5.2	0.72	0.13
237	0.59	0.02	21.44	1	0.39	0.02
238	0.52	0.02	26.44	0.7	0.4	0.02
240	0.39	0.02	35.09	0.31	0.79	0.02
241	0.41	0.01	34.52	0.75	0.88	0.03
242	0.4	0.01	39.06	0.72	0.95	0.03
243	0.42	0.02	38.02	0.91	0.87	0.03
244	0.45	0.02	39.29	1.4	0.78	0.04
245	0.4	0.02	39.81	1.28	0.87	0.05
246	0.37	0.02	33.58	1.61	0.81	0.03
247	0.4	0.02	35.97	0.86	0.73	0.02
248	0.36	0.02	36.9	0.73	0.75	0.04
249	0.39	0.02	34.93	1.33	0.86	0.05
250	0.36	0.01	34.48	0.48	0.94	0.03
251	0.33	0.01	32.56	0.5	0.79	0.02
252	0.36	0.02	30.58	2.4	0.98	0.1
253	0.36	0.01	33.11	0.56	0.79	0.03
254	0.28	0.02	25.71	1.6	0.84	0.04
255	0.39	0.03	23.46	3.3	1.1	0.19
256	0.4	0.02	35.71	0.57	0.83	0.03
257	0.42	0.01	34.25	0.65	0.64	0.03
258	0.45	0.05	35.78	0.38	0.93	0.03
259	0.39	0.01	36.36	0.56	0.85	0.03
260	0.38	0.01	38.46	1.44	0.93	0.06

261	0.54	0.02	19.92	5.1	0.51	0.02
262	0.53	0.02	38.91	1.1	0.77	0.05
263	0.61	0.02	29.33	0.5	0.71	0.02
264	0.86	0.03	18.8	0.7	0.67	0.03
265	1.02	0.02	12.15	0.6	0.52	0.01
266	1.22	0.03	7.78	3.1	0.37	0.01

**<sup>15</sup>N amide relaxation rates of *holo-Tb6PGL* at 900 MHz**

Res.	R <sub>1</sub>	σ <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	σ <sub>2</sub>	NOE	σ <sub>N</sub>
6	0.39	0.02	21.94	1.42	0.47	0.08
7	0.41	0.01	32.12	1.04	0.94	0.07
8	0.38	0.03	36.91	1.74	1.02	0.1
9	0.38	0.02	26.06	1.73	0.6	0.05
10	0.38	0.01	33.28	1.41	0.67	0.06
11	0.5	0.03	30.8	1.27	0.6	0.09
12	0.42	0.01	28.11	1.14	0.71	0.07
14	0.5	0.03	35.2	1.78	0.66	0.07
15	0.44	0.02	31.25	1.21	0.96	0.12
16	0.45	0.03	26.95	1.24	0.85	0.09
17	0.39	0.01	32.1	0.83	0.72	0.07
18	0.43	0.02	34.55	1.71	1.11	0.12
19	0.42	0.01	34.93	2.45	1.04	0.12
20	0.44	0.03	36.67	3.73	1.09	0.14
21	0.68	0.08	35.37	3.78	0.63	0.17
22	0.51	0.06	45.46	8.93	0.76	0.18
23	0.43	0.02	38.08	0.96	0.82	0.13
24	0.38	0.05	34.72	6.06	0.69	0.12
25	0.45	0.06	28.85	3.16	0.93	0.15
26	0.38	0.04	34.05	2.44	1.02	0.21
27	0.41	0.05	33.61	2.26	1.24	0.31
28	0.29	0.05	43.1	4.09	1.08	0.31
29	0.39	0.01	37.34	1.12	0.81	0.06
30	0.42	0.01	33.56	0.9	0.88	0.05
31	0.44	0.02	32.36	0.86	0.57	0.04
32	0.67	0.02	24.94	0.55	0.62	0.05
33	0.49	0.04	30.74	1.18	0.68	0.06
34	0.58	0.03	32.49	1.01	0.76	0.06
35	0.4	0.01	35.58	0.71	0.92	0.06
36	0.4	0.01	36.85	2.17	0.94	0.09
38	0.4	0.02	33.16	0.97	0.72	0.04

39	0.4	0.03	33.69	2.23	0.94	0.14
40	0.52	0.06	36.87	5.1	1.65	0.43
41	0.32	0.03	36.78	3.08	1.03	0.21
42	0.31	0.04	32.21	3.69	0.65	0.12
43	0.39	0.03	38.72	1.68	0.86	0.15
44	0.38	0.03	36.54	4.15	0.68	0.15
45	0.37	0.04	38.43	10.95	0.68	0.06
46	0.53	0.11	31.54	12.73	0.69	0.24
47	0.38	0.01	27.93	0.72	0.67	0.09
49	0.46	0.01	33.33	1.22	0.92	0.08
51	0.51	0.06	47.39	6.74	0.62	0.12
52	0.52	0.02	36.63	0.71	0.87	0.07
53	0.41	0.03	33.9	2.76	1.21	0.15
54	0.37	0.01	39.15	1.96	1.06	0.13
56	0.37	0.02	33.29	1.92	0.93	0.11
57	0.4	0.04	36.75	3.08	0.94	0.17
58	0.36	0.03	31.44	1.59	0.92	0.12
59	0.39	0.02	36.17	2.09	0.84	0.06
60	0.39	0.02	36.1	1.59	0.97	0.09
61	0.44	0.03	34.25	2.35	0.88	0.09
62	0.38	0.01	34.59	1.02	1	0.1
63	0.4	0.02	34.97	1.85	0.8	0.07
64	0.39	0.02	33.61	1.64	0.76	0.08
65	0.5	0.01	34.08	1.38	0.67	0.06
66	0.37	0.02	31.07	1.57	0.91	0.09
67	0.41	0.01	35.75	1.68	0.83	0.07
68	0.4	0.02	36.91	1.35	0.95	0.07
69	0.4	0.03	37.13	3.06	1.97	0.38
70	0.35	0.01	33.16	1.69	0.89	0.07
71	0.36	0.01	31.2	1.34	0.93	0.09
72	0.4	0.01	37.26	3.1	0.76	0.09
73	0.39	0.02	29.6	1.79	0.69	0.07
74	0.4	0.03	32.82	2.59	1.06	0.15
75	0.38	0.02	44.43	6.18	1.02	0.13

76	0.37	0.01	35.66	1.63	0.73	0.06
77	0.31	0.03	36.94	3.04	0.81	0.13
78	0.35	0.01	32.2	1.08	0.91	0.05
79	0.38	0.02	31.53	0.87	1.07	0.08
81	0.45	0.02	28.64	1.05	0.71	0.04
82	0.44	0.02	31.36	0.9	0.55	0.06
83	0.46	0.02	32.52	1.38	0.66	0.05
84	0.51	0.04	36.82	0.64	0.66	0.04
85	0.46	0.01	29.95	0.56	0.56	0.04
86	0.43	0.02	36.1	1.53	0.91	0.08
87	0.39	0.07	54.41	15.3	0.51	0.15
88	0.38	0.01	35.1	2.95	0.69	0.1
89	0.41	0.04	42.43	2.5	0.76	0.08
90	0.36	0.03	38.02	1.97	0.83	0.1
91	0.47	0.02	35.66	1.46	0.88	0.08
92	0.44	0.01	36.86	2.27	0.79	0.08
93	0.36	0.02	35.06	1.67	0.85	0.08
94	0.44	0.02	35.21	4.51	0.96	0.16
95	0.41	0.03	34.8	1.71	0.61	0.07
96	0.39	0.04	38.78	2.23	0.86	0.13
97	0.45	0.03	41.43	2.97	0.65	0.08
98	0.38	0.02	41.96	1.75	0.63	0.08
99	0.41	0.01	33.67	0.94	0.86	0.07
101	0.4	0.01	28.45	1.35	0.77	0.06
102	0.4	0.01	34.48	1.78	0.69	0.06
103	0.38	0.02	34.78	1.19	0.8	0.07
104	0.35	0.01	37.52	1.45	0.79	0.06
105	0.51	0.03	35.59	3.42	0.52	0.1
107	0.4	0.02	34.13	1.4	0.97	0.1
108	0.37	0.02	34.03	0.7	0.66	0.04
109	0.4	0.01	29.16	0.85	0.55	0.04
110	0.5	0.02	33.58	2.29	0.75	0.08
111	0.56	0.02	34.4	1.06	0.69	0.05
112	0.47	0.01	32.72	0.43	0.74	0.04

113	0.5	0.01	31.71	0.83	0.43	0.03
115	0.58	0.04	26.46	0.58	0.32	0.04
116	0.57	0.02	27.08	0.88	0.45	0.03
117	0.73	0.04	20.45	0.31	0.38	0.02
118	0.44	0.01	30.12	0.7	0.4	0.03
119	0.41	0.02	33.85	1.44	0.72	0.08
120	0.41	0.02	31.25	0.86	0.65	0.06
121	0.51	0.02	34.92	0.75	0.79	0.06
122	0.4	0.02	32.73	0.81	0.75	0.06
123	0.41	0.01	35.46	1.65	0.86	0.07
124	0.39	0.01	35.21	1.29	0.86	0.07
125	0.39	0.02	37.98	1.25	0.96	0.08
126	0.38	0.02	38.36	2.13	0.94	0.07
127	0.39	0.01	39.46	1.71	0.79	0.06
128	0.39	0.01	38.52	1.48	0.81	0.06
129	0.47	0.01	25.43	2	0.9	0.07
130	0.42	0.01	35.59	1.71	0.8	0.06
131	0.38	0.02	39.84	3.65	1.04	0.08
132	0.42	0.01	38.45	1.26	0.99	0.08
133	0.38	0.01	34.87	1.22	0.94	0.06
134	0.38	0.01	37.33	1.21	0.8	0.07
135	0.38	0.02	32.79	1.67	0.94	0.07
136	0.39	0.02	32.68	1.22	0.66	0.05
137	0.39	0.01	32.03	1.85	0.77	0.06
138	0.45	0.04	38.31	1.62	0.42	0.06
140	0.33	0.01	32.36	0.29	0.82	0.03
141	0.36	0.01	31.75	0.95	0.74	0.05
142	0.5	0.02	31.02	0.52	0.68	0.04
143	0.46	0.01	29.7	1.05	0.71	0.04
144	0.7	0.02	20.94	0.14	0.48	0.02
145	1.15	0.06	10.68	0.42	0.32	0.04
146	0.6	0.05	25.06	0.54	0.42	0.04
147	0.6	0.01	27.78	0.77	0.43	0.02
149	0.42	0.01	30.58	0.56	0.62	0.03



150	0.39	0.01	32.26	1.48	0.67	0.05
152	0.37	0.01	31.95	0.56	0.97	0.06
154	0.39	0.02	42.02	2.12	0.8	0.11
155	0.32	0.05			0.7	0.19
156	0.42	0.03	39.64	4.12	0.69	0.18
157	0.4	0.05	32.57	12.73	0.69	0.35
158	0.35	0.03	44.76	4.63	0.91	0.22
159	0.32	0.02	33.16	1.56	0.85	0.08
160	0.38	0.02	31.83	1.14	0.66	0.11
161	0.38	0.01	33.28	1.61	0.92	0.06
162	0.44	0.04	34.84	2.63	0.59	0.06
163	0.48	0.02	44.07	2.56	0.85	0.09
164	0.39	0.02	36.18	2.75	1.05	0.12
165	0.41	0.01	38.02	1.32	0.76	0.06
166	0.38	0.01	35.88	1.16	0.87	0.06
167	0.39	0.02	30.53	1.4	0.79	0.09
168	0.3	0.02	34.08	3.14	0.96	0.18
169	0.37	0.02	35.14	1.58	1.07	0.09
170	0.35	0.02	34.97	3.67	0.81	0.14
172	0.4	0.01	32.07	0.64	0.67	0.05
173	0.43	0.01	33.86	1.16	0.75	0.08
174	0.5	0.04	32.63	1.15	0.82	0.09
175	0.45	0.01	36.77	0.81	0.84	0.08
176	0.41	0.02	34.07	0.98	0.82	0.06
177	0.4	0.01	33.17	1.05	0.78	0.06
178	0.38	0.01	34.39	0.62	0.82	0.06
179	0.37	0.01	31.36	1.11	0.79	0.05
180	0.48	0.03	36.32	2.26	0.57	0.07
181	0.43	0.02	30.2	2.24	0.79	0.08
182	0.39	0.02	40.13	2.48	0.61	0.05
183	0.43	0.01	35.71	1.02	0.75	0.06
184	0.46	0.03	35.51	1.69	1.03	0.09
185	0.38	0.01	32.68	0.97	0.83	0.07
186	0.4	0.02	37	1.44	0.78	0.06

187	0.41	0.02	32.6	1.53	0.72	0.06
188	0.33	0.02	32.21	2.43	0.93	0.1
189	0.38	0.02	33.07	1.08	0.69	0.05
192	0.62	0.01	22.13	0.29	0.18	0.02
193	1.24	0.07	11.89	0.16	0.55	0.05
194	0.96	0.04	18.9	0.41	0.54	0.04
195	0.59	0.04	26.8	1.99	0.61	0.06
197	0.47	0.03	32.01	1.22	0.79	0.1
198	0.41	0.01	36.47	0.58	0.85	0.06
199	0.44	0.03	34.06	1.32	0.87	0.05
200	0.41	0.03	36.9	1.5	1	0.09
201	0.37	0.01	34.97	0.8	0.74	0.05
202	0.34	0.02	33.56	3.27	0.73	0.05
203	0.4	0.01	36.23	2.36	0.92	0.08
204	0.41	0.02	34.97	1.79	1.02	0.13
206	0.38	0.02	35.59	1.27	0.94	0.06
207	0.38	0.01	33.17	1.34	0.88	0.09
208	0.41	0.03	33.9	1.78	0.88	0.14
209	0.4	0.02	38.55	2.23	0.76	0.1
210	0.46	0.03	35.71	6.25	0.85	0.17
211	0.45	0.05	48.36	3.77	1.01	0.21
212	0.34	0.01	37	2.86	0.69	0.09
213	0.38	0.07	37.75	7.41	1.43	0.41
214	0.32	0.01	32.05	1.03	0.74	0.04
215	0.43	0.05	43.14	3.11	1.16	0.29
216	0.31	0.04	29.84	4.78	1.55	0.31
217	0.3	0.04	24.01	3.66	0.73	0.25
218	0.4	0.04	25.67	3.55	0.64	0.13
219	0.35	0.02	35.06	1.09	0.6	0.07
220	0.37	0.02	33.15	1.54	0.75	0.09
221	0.39	0.02	34.25	2.35	0.91	0.11
222	0.46	0.02	37.31	1.39	0.71	0.07
223	0.42	0.02	37.31	2.76	0.6	0.04
224	0.41	0.03	32.9	1.19	0.84	0.08

225	0.44	0.03	32.3	4.07	1.03	0.15
226	0.39	0.03	36.63	2.52	0.93	0.09
227	0.39	0.02	36.23	1.77	0.73	0.06
228	0.44	0.01	36.36	1.98	0.85	0.1
229	0.36	0.01	28.89	2.92	0.98	0.09
230	0.42	0.01	38.46	2.1	0.9	0.09
231	0.38	0.02	34.48	1.5	1.07	0.12
232	0.43	0.02	38.36	2	0.74	0.07
233	0.4	0.03	34.13	0.79	0.75	0.06
234	0.52	0.02	27.62	0.58	0.67	0.04
235	0.66	0.04	25.15	0.39	0.57	0.03
236	1.08	0.08	25.06	0.57	0.54	0.11
237	0.61	0.05	25.38	1.03	0.41	0.05
238	0.59	0.05	27.25	0.52	0.33	0.03
240	0.41	0.01	33.78	1.6	0.81	0.05
241	0.42	0.02	36.08	1.73	0.74	0.07
242	0.4	0.01	37.91	1.67	0.83	0.06
243	0.4	0.02	37.26	1.67	0.91	0.08
244	0.44	0.02	42.74	2.56	0.93	0.11
245	0.37	0.02	36.31	1.19	0.93	0.09
246	0.38	0.02	32.9	1.39	0.88	0.08
247	0.42	0.02	37.64	1.23	0.76	0.07
248	0.37	0.02	35.09	1.5	0.92	0.09
249	0.44	0.03	34.87	4.99	0.62	0.1
250	0.36	0.01	36.42	1.07	0.92	0.07
251	0.37	0.01	33.05	0.55	0.64	0.03
252	0.41	0.02	32.47	3.23	1.12	0.25
253	0.38	0.02	31.73	1.21	0.79	0.07
254	0.25	0.03	25.2	1.59	0.62	0.09
255	0.41	0.04	22.41	1.71	1.05	0.21
256	0.39	0.02	36.43	1.59	0.82	0.08
257	0.41	0.01	34.13	1.51	0.46	0.08
258	0.41	0.01	34.97	0.73	0.61	0.05
259	0.42	0.02	42.14	2.56	0.62	0.06

260	0.42	0.02	37.4	2.48	1.26	0.2
261	0.54	0.02	21.83	2.43	0.65	0.07
262	0.63	0.05	36.36	4.76	0.77	0.14
263	0.62	0.02	27.86	0.5	0.71	0.05
264	0.91	0.03	17.33	0.48	0.78	0.1
265	1.09	0.02	12.27	0.11	0.42	0.02
266	1.18	0.01	7.81	0.06	0.32	0.02