XXXXXX

SUPPORTING INFORMATION FOR:

Analysis of human Carbonic Anhydrase II: Docking Reliability and Receptor-Based 3D-QSAR study

Tiziano Tuccinardi,[‡] Elisa Nuti,[‡] Gabriella Ortore,[‡] Claudiu T. Supuran,[†] Armando Rossello,[‡] Adriano Martinelli[‡,]*

Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Pisa, via Bonanno 6, 56126 Pisa, Italy, Polo Scientifico, Laboratorio di Chimica Bioinorganica, Room 188, Università degli Studi di Firenze, Via della Lastruccia 3, 50019 Sesto Fiorentino, Florence, Italy.

[‡] Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Università di Pisa

[†] Laboratorio di Chimica Bioinorganica, Università degli Studi di Firenze

[*] Corresponding author. marti@farm.unipi.it; ; Fax: ++39 050 2219605

Matrix of RMSDs obtained by the cross-docking study using the GoldScore and ChemScore methods.

RMSD < 1.5 | 1.5 < RMSD < 2.5 | 2.5 < RMSD < 3.5 | RMSD > 3.5

Protein

Ligand	1OQ5	1AA2	1BN1	1BN3	1BN4	1BNM	1BNN	1BNQ	1BNT	1BNU	1BNV	1BNW	1CIL	1CIM	1CIN	1CNX	1EOU	1G1D	1G52	1G53	1G54	1I8Z	1I90	1I91	1IF4	1IF5	1IF6	1IF7	1IF8	1IF9	1KWQ	1KWR	1OKL	1OKM	1OKN	1TTM	1XPZ	1XQ0	1YDA	1ZE8	RMSD
1OQ5	5,9	5,9	6,1	6,0	6,0	6,0	6,0	5,9	5,8	6,1	6,0	6,1	5,8	5,9	6,1	5,9	5,9	6,0	5,9	5,9	6,2	5,9	6,0	6,0	5,9	5,9	8,0	5,9	6,0	5,9	6,0	5,9	6,1	6,0	6,0	6,1	5,9	6,1	6,2	6,2	6,0
1A42	4,8	3,3	2,5	2,7	3,4	2,5	3,6	3,2	2,3	2,5	3,1	2,7	2,6	2,6	2,6	2,4	4,1	4,7	2,4	2,5	3,3	3,2	2,4	2,4	3,9	2,6	3,7	3,4	2,5	2,7	2,8	3,5	3,2	4,3	3,4	4,2	4,0	3,1	3,1	3,7	3,1
1BN1	4,8	2,2	1,3	2,1	1,8	4,3	1,2	2,1	1,5	1,4	1,4	4,4	1,4	2,1	4,0	4,1	1,8	1,8	4,6	1,7	4,6	4,7	1,4	4,2	5,9	6,1	6,1	4,9	2,1	1,9	4,1	6,8	6,1	1,4	1,3	3,8	3,9	4,1	3,4	5,9	3,3
1BN3	4,5	4,9	3,4	5,3	3,7	4,5	3,8	4,5	3,5	3,8	3,7	2,7	5,2	3,5	3,6	3,5	4,9	3,2	4,9	4,8	2,4	3,3	3,6	3,8	2,8	1,1	3,6	2,6	3,3	3,4	4,7	4,4	3,2	4,4	3,4	3,6	5,5	3,3	3,1	4,0	3,8
1BN4	5,9	5,5	4,2	6,2	3,8	5,3	3,6	2,0	7,3	2,2	1,1	5,2	1,9	3,7	1,2	6,0	1,8	5,3	2,8	1,9	5,1	4,7	6,3	5,3	6,5	6,1	6,6	3,8	4,4	3,9	2,0	7,1	6,1	3,9	4,2	5,0	4,2	4,9	3,6	6,5	4,4
1BNM	3,5	4,7	4,3	4,0	3,4	3,3	4,2	1,6	1,5	2,7	3,5	2,2	2,3	3,1	3,2	4,7	3,9	3,3	2,5	2,2	2,1	3,1	1,5	3,5	4,9	4,5	4,8	2,6	3,7	1,6	3,7	7,7	3,1	2,8	1,6	3,6	3,5	4,0	2,9	3,5	3,3
1BNN	3,7	5,1	2,5	3,6	2,5	4,8	3,5	4,5	2,6	3,7	3,5	2,7	2,3	2,6	2,8	4,0	5,1	4,6	2,1	3,6	5,0	2,6	2,4	3,6	2,8	2,1	3,8	3,6	4,4	3,7	3,7	5,0	4,9	3,6	4,9	3,7	5,5	4,9	2,3	3,7	3,7
1BNQ	4,4	2,1	2,0	1,9	2,3	2,1	2,1	2,2	2,1	2,1	2,2	2,3	2,1	2,3	2,1	2,0	2,6	0,9	2,1	2,1	2,6	2,0	2,4	2,0	2,2	6,4	2,9	2,7	1,9	2,1	2,2	2,1	2,5	4,0	2,5	3,7	3,6	2,4	2,5	3,1	2,5
1BNT	2,7	2,8	2,9	3,1	3,0	2,7	3,1	2,9	3,0	2,9	2,6	3,0	3,0	2,8	2,9	3,3	4,8	2,9	2,6	3,0	3,0	3,0	5,5	3,7	2,9	5,1	3,3	2,9	2,8	3,1	2,8	3,0	2,8	2,9	2,8	2,8	3,0	2,9	2,7	2,8	3,1
1BNU	2,6	2,6	2,4	2,4	2,4	2,5	2,4	2,6	2,6	2,5	2,4	2,4	2,5	2,5	2,6	2,7	3,3	2,6	2,6	2,7	2,5	2,5	2,4	2,5	2,6	2,8	2,5	2,6	2,4	2,5	2,6	2,6	2,6	2,6	2,5	2,7	2,6	2,6	2,6	2,6	2,6
1BNV	3,5	3,3	3,1	2,6	2,3	1,9	2,9	2,8	3,6	2,8	3,0	2,1	3,6	2,7	1,9	2,3	4,4	3,8	3,6	2,9	3,0	2,7	2,7	2,5	3,8	3,7	4,3	2,6	3,5	1,4	3,2	3,7	2,2	1,3	1,0	3,3	5,1	4,7	2,4	2,7	3,0
1BNW	5,0	1,4	2,0	5,4	3,4	3,4	1,3	2,4	1,2	1,3	1,7	3,5	1,3	1,2	1,3	2,0	4,0	1,4	1,9	1,7	1,8	1,2	5,1	1,1	5,3	5,1	7,2	1,7	1,7	1,9	5,1	6,8	3,1	1,8	2,2	5,2	3,4	3,6	3,0	5,1	3,0
1CIL	3,6	0,4	0,7	0,4	0,8	0,6	0,5	0,6	0,7	0,8	0,8	0,7	0,3	0,7	3,5	3,6	3,4	3,5	0,6	0,4	1,0	0,5	0,4	0,5	3,5	0,8	3,7	0,9	0,5	0,9	0,9	3,5	0,9	0,6	3,6	0,5	3,6	3,6	1,0	0,9	1,5
1CIM	2,7	2,7	2,7	2,7	2,8	2,7	2,7	2,7	2,8	2,7	2,7	2,8	2,6	2,8	2,7	1,4	2,7	2,7	2,7	2,7	2,8	2,8	2,7	2,6	3,6	3,5	3,5	2,7	2,7	2,8	3,2	2,7	2,7	2,7	3,3	2,6	2,7	2,7	2,6	3,6	2,8
1CIN	3,0	0,6	0,8	3,1	0,8	0,8	3,1	0,6	0,8	0,9	0,8	0,7	3,2	3,1	3,1	2,6	3,1	0,8	0,5	1,1	1,1	3,2	0,5	3,1	3,4	0,6	3,7	1,3	3,1	0,8	3,2	3,3	1,0	3,2	3,2	3,1	1,6	1,7	1,1	3,5	2,0
1CNX	5,9	6,1	1,4	6,3	5,9	5,8	5,9	6,4	5,3	5,3	5,2	4,8	5,7	5,8	3,9	5,8	5,9	5,7	5,6	4,0	5,8	6,1	6,4	5,6	6,3	4,0	5,9	3,7	5,7	4,6	5,9	6,1	5,1	4,0	5,4	6,4	6,5	6,1	6,1	6,1	5,5
1EOU	4,6	2,4	4,4	2,4	4,3	4,6	4,4	2,5	1,6	4,4	4,4	2,0	4,4	2,9	4,4	4,5	4,7	1,4	4,5	4,5	2,9	2,7	2,3	4,4	4,9	4,8	2,6	4,4	2,2	4,4	2,7	4,7	2,8	4,3	1,8	2,6	4,9	2,8	2,9	4,6	3,5
1G1D	4,5	2,1	4,8	3,5	3,5	3,9	3,6	4,6	2,1	4,6	4,8	3,7	4,4	4,2	4,1	3,6	1,8	4,4	4,4	4,6	4,6	4,3	3,5	3,7	4,6	3,4	4,7	3,1	3,7	4,4	4,1	4,4	3,4	4,5	4,3	4,7	4,5	3,3	1,2	4,3	3,9
1G52	4,7	4,7	4,7	3,2	3,5	3,9	5,0	4,7	3,5	4,6	5,1	3,6	4,6	3,2	4,4	3,4	1,4	4,7	4,3	4,6	4,6	4,4	3,3	4,4	4,6	1,5	4,8	4,7	3,4	4,4	4,0	4,5	4,5	4,3	4,6	3,4	5,0	1,4	4,3	4,4	4,1
1G53	4,9	4,6	5,0	3,7	4,9	3,8	4,9	4,8	3,9	4,6	4,8	4,0	4,6	4,4	4,6	4,4	4,7	4,5	4,6	4,8	4,6	3,9	3,7	4,5	4,6	4,9	4,4	3,9	4,5	4,3	4,3	4,3	3,8	4,6	4,3	5,0	4,8	1,1	1,6	3,6	4,3
1G54	5,2	5,6	5,5	5,9	5,5	6,1	5,2	5,3	3,9	5,5	5,8	5,3	5,3	4,6	5,1	4,4	2,0	5,4	5,3	5,2	5,6	5,4	4,3	4,9	5,3	2,0	5,5	5,0	5,1	5,1	5,1	5,1	5,2	5,1	5,0	1,9	5,4	3,3	4,9	5,2	4,9
1I8Z	5,0	3,0	4,3	4,3	4,8	3,1	4,2	3,9	4,5	4,6	4,6	4,5	4,6	4,5	4,8	4,6	3,7	4,9	3,1	4,6	3,2	4,3	4,2	4,7	4,5	3,7	7,6	4,9	5,0	4,6	4,4	8,4	4,5	3,0	4,5	4,4	3,5	3,7	4,4	4,6	4,4
1I90	3,9	2,9	2,5	2,7	2,6	2,5	2,5	2,7	2,5	2,5	2,5	2,5	3,8	2,4	2,5	2,5	3,2	2,8	2,5	2,7	2,5	2,5	2,5	3,0	3,0	6,2	3,2	2,5	2,5	2,6	2,5	2,9	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,8	2,8
1I91	3,7	2,8	3,3	3,6	3,3	3,4	3,1	3,8	3,2	3,6	3,3	3,4	4,3	4,2	3,1	2,9	3,8	3,6	4,7	2,7	3,1	3,1	3,2	3,2	3,7	3,9	8,3	2,9	4,2	3,6	3,6	8,3	2,8	2,7	3,1	3,3	4,3	3,5	3,1	3,1	3,7
1IF4	3,4	0,8	0,8	3,2	0,6	0,9	0,7	1,0	0,8	1,1	3,1	0,7	0,6	3,2	3,3	0,6	2,9	3,4	3,2	3,4	3,3	2,5	3,3	0,5	1,6	3,4	3,6	0,5	3,3	0,4	0,6	0,4	3,3	3,3	3,4	0,6	3,4	3,4	1,2	0,6	2,0
1IF5	2,9	1,5	1,0	2,9	1,0	1,0	2,9	1,3	0,8	1,3	1,1	1,0	0,5	2,8	2,9	0,8	1,2	2,9	2,9	2,9	2,9	2,9	0,8	2,9	1,6	3,0	3,0	1,3	3,0	0,7	0,7	1,3	2,9	1,1	2,8	0,6	2,9	2,9	1,2	0,6	1,8
1IF6	3,5	1,3	0,9	3,4	0,7	1,0	0,9	0,9	3,4	1,3	1,0	0,8	3,4	3,4	3,4	0,9	0,7	3,5	3,4	3,4	3,4	3,5	3,4	0,7	1,5	3,5	3,6	1,3	3,4	0,6	0,7	0,6	3,5	3,4	3,5	0,8	3,4	3,4	1,3	0,8	2,2
1IF7	2,0	2,6	3,1	3,0	3,2	6,0	5,1	5,5	5,3	5,2	5,8	5,4	5,3	5,3	4,4	3,8	2,0	3,2	3,1	5,2	5,5	1,9	5,2	4,9	6,4	6,8	6,4	3,2	4,9	3,1	1,8	7,2	5,7	2,0	5,5	5,4	5,8	6,0	5,6	6,7	4,6
1IF8	2,2	4,2	5,5	4,9	4,9	6,6	1,9	4,0	2,1	2,6	6,8	5,7	6,3	1,9	3,4	2,6	5,3	4,8	5,4	4,7	6,2	2,6	2,0	5,9	6,7	6,5	8,6	4,8	2,8	4,9	4,9	7,1	2,7	3,0	5,1	6,2	7,0	7,0	5,0	6,6	4,8
1IF9	1,7	4,8	4,8	4,7	4,7	4,8	4,7	5,0	4,8	4,4	4,9	4,8	4,4	4,8	4,2	4,9	4,5	4,8	4,9	4,9	4,9	3,6	4,7	4,7	5,8	6,0	6,9	4,8	4,8	5,8	3,7	5,6	5,5	3,0	4,8	5,6	4,9	4,8	4,9	5,9	4,8
1KWQ	1,9	3,4	2,7	2,4	3,0	2,7	3,0	3,0	2,7	3,0	2,8	2,8	4,2	2,4	2,7	2,7	3,1	2,8	2,7	2,8	2,9	1,5	4,3	3,1	3,5	2,5	3,1	2,8	1,9	2,7	4,1	3,7	2,6	2,8	1,8	3,0	3,0	3,2	2,4	3,5	2,9
1KWR	3,7	2,6	3,2	4,6	4,4	2,6	2,8	2,6	4,6	2,7	1,5	4,3	3,9	2,7	1,3	1,3	3,4	2,8	3,9	3,9	1,8	0,6	4,3	2,8	4,3	4,5	3,0	1,3	2,9	2,8	4,5	4,4	3,3	1,4	2,8	2,5	2,8	2,6	2,8	4,6	3,1
1OKL	2,2	0,7	0,6	0,5	0,6	0,6	0,7	0,5	0,5	0,5	0,8	0,6	3,9	0,6	0,5	1,6	2,4	0,9	0,5	4,0	0,6	0,6	0,6	0,6	1,1	0,9	4,0	1,8	0,6	1,7	0,7	2,5	0,8	1,9	0,9	0,6	1,1	1,2	2,7	1,0	1,2
1OKM	4,3	1,1	4,6	1,1	4,7	4,5	4,0	1,0	4,3	4,4	4,6	3,2	3,1	1,0	4,3	4,2	4,7	3,5	4,3	1,1	3,3	1,3	3,3	4,1	3,3	1,7	4,1	3,2	4,0	4,1	4,2	4,0	3,3	4,4	0,8	4,2	4,4	4,0	4,1	1,7	3,4
1OKN	5,9	5,6	6,3	5,7	5,6	5,7	5,9	2,1	5,8	5,9	5,8	5,7	5,6	5,4	5,0	5,6	5,4	5,4	5,8	5,6	5,6	6,0	5,6	5,8	5,7	5,8	5,9	4,5	5,7	4,4	5,1	5,3	5,0	4,5	5,5	6,0	5,7	6,2	5,7	5,9	5,5
1TTM	3,8	4,1	3,8	2,8	3,2	4,0	3,4	4,1	4,1	3,2	3,6	4,0	3,9	2,3	3,1	3,0	3,5	3,9	4,0	4,3	3,8	2,6	4,0	3,3	3,4	2,4	2,5	2,5	2,6	4,0	3,1	3,4	3,0	2,6	2,7	3,9	3,5	1,3	3,2	3,4	3,4
1XPZ	2,4	1,6	1,6	1,6	1,6	1,6	1,7	1,6	1,7	1,7	1,7	1,7	2,4	1,3	1,6	1,7	5,0	1,4	1,6	1,2	5,2	1,4	1,4	1,5	4,2	2,5	2,4	1,7	2,2	1,6	1,4	6,7	1,6	1,7	1,6	1,7	2,5	4,0	5,2	5,2	2,7
1XQ0	3,3	3,3	3,4	3,3	3,3	4,3	3,3	3,4	3,4	2,5	3,4	3,2	3,4	3,1	3,4	3,4	3,3	3,3	3,3	3,4	3,3	3,4	3,3	3,7	3,5	3,4	6,5	3,4	3,3	3,2	4,3	6,8	3,1	3,2	3,0	3,5	3,4	3,9	3,3	5,2	3,6
1YDA	2,4	3,8	3,8	1,8	2,0	3,7	3,6	3,8	3,8	3,5	3,5	1,9	3,8	1,8	3,6	3,2	2,6	3,4	3,6	1,8	3,5	3,7	3,8	1,9	3,8	2,1	1,7	1,9	3,6	1,9	3,7	2,6	1,6	3,3	2,6	1,7	1,9	2,2	2,6	1,7	2,8
1ZE8	3,2	1,3	1,3	1,1	1,3	1,3	1,0	1,3	1,8	1,2	1,2	1,0	1,6	1,6	1,1	1,6	5,0	0,9	1,6	0,9	1,0	1,2	1,3	1,1	1,1	1,0	0,6	0,8	1,1	1,7	1,9	5,9	1,0	1,0	1,0	1,0	0,9	1,2	1,3	0,9	1,5
RMSD	3,8	3,0	3,0	3,3	3,1	3,3	3,1	2,9	3,0	3,0	3,2	3,0	3,3	3,0	3,1	3,2	3,4	3,4	3,3	3,2	3,5	3,0	3,2	3,2	3,9	3,8	4,5	2,9	3,2	2,9	3,3	4,6	3,3	3,0	3,2	3,3	3,9	3,5	3,0	3,8	3,4
DA	.18	.40	.39	.31	.35	.33	.34	.43	.40	.41	.36	.39	.30	.38	.29	.33	.30	.26	.29	.36	.29	.39	.33	.31	.20	.28	.13	.41	.30	.43	.29	.16	.29	.39	.35	.33	.20	.24	.43	.23	.26

GoldScore

RMSD < 1.5 | 1.5 < RMSD < 2.5 | 2.5 < RMSD < 3.5 | RMSD > 3.5

Protein

Ligand	1OQ5	1AA2	1BN1	1BN3	1BN4	1BNM	1BNN	1BNQ	1BNT	1BNU	1BNV	1BNW	1CIL	1CIM	1CIN	1CNX	1EOU	1G1D	1G52	1G53	1G54	1I8Z	1I90	1I91	1IF4	1IF5	1IF6	1IF7	1IF8	1IF9	1KWQ	1KWR	1OKL	1OKM	1OKN	1TTM	1XPZ	1XQ0	1YDA	1ZE8	RMSD
1OQ5	5,4	5,4	5,4	5,5	5,4	5,5	5,4	5,4	5,5	5,4	5,4	5,5	5,6	5,4	5,4	5,4	5,3	5,4	5,3	5,3	5,3	5,3	5,4	5,4	5,3	5,5	5,3	5,4	5,4	5,3	5,4	5,3	5,4	5,3	5,3	5,4	5,3	5,4	5,7	5,3	5,4
1A42	4,4	0,8	4,5	1,5	4,1	1,0	4,2	4,3	4,4	1,0	0,9	1,0	1,0	1,0	1,1	1,1	4,1	4,3	3,9	4,2	0,9	4,5	4,6	4,4	4,2	4,4	4,2	4,4	4,2	4,4	1,0	0,9	1,0	4,4	4,2	7,3	1,3	4,6	4,6	4,2	4,4
1BN1	1,6	1,8	1,3	1,7	1,8	1,9	1,3	2,2	1,8	1,9	1,7	1,8	2,3	1,7	1,7	1,7	1,9	1,9	1,3	1,3	1,8	1,7	1,8	2,0	1,6	1,8	6,9	1,7	1,8	1,7	1,6	1,8	1,5	1,7	1,8	1,8	2,0	2,0	1,5	1,7	1,9
1BN3	1,9	3,0	3,6	3,5	3,7	3,4	3,6	3,5	2,6	4,0	3,6	3,5	3,3	2,0	3,6	3,6	2,2	1,8	3,9	3,6	3,8	3,8	4,0	3,8	3,5	3,0	3,3	3,3	3,5	3,6	2,2	3,3	3,7	2,4	2,8	2,0	3,4	3,5	3,6	3,3	3,2
1BN4	1,6	1,7	1,6	1,7	1,7	1,6	1,8	2,2	1,6	1,6	1,6	1,6	1,6	1,5	1,6	1,6	1,8	1,7	1,3	1,7	1,7	1,2	1,5	1,3	1,7	2,0	1,7	1,7	1,6	5,1	1,5	1,6	1,6	1,6	1,6	1,7	1,3	5,1	1,5	1,9	1,8
1BNM	4,3	1,8	1,4	1,8	4,1	4,5	1,7	4,0	1,7	1,5	1,8	1,7	1,6	1,6	1,7	1,5	7,3	3,8	4,5	4,5	4,0	1,4	4,1	4,3	4,3	4,5	4,1	1,7	3,9	1,6	3,6	1,6	4,4	1,6	3,6	4,6	4,6	4,6	7,3	2,5	3,1
1BNN	2,3	2,4	2,5	2,4	2,6	2,4	2,6	2,7	2,0	2,0	1,9	1,9	2,5	2,4	2,0	2,0	2,3	2,0	2,5	2,5	2,5	2,4	2,5	2,7	2,3	2,7	2,4	2,0	1,9	1,9	2,4	2,4	1,9	2,0	2,5	2,5	2,5	2,5	3,6	2,4	2,3
1BNQ	3,5	4,1	4,2	2,1	4,0	1,0	4,0	4,0	3,4	1,0	1,0	1,0	4,1	1,0	1,2	3,3	4,2	4,0	4,2	4,1	3,4	4,0	3,6	4,1	4,1	4,1	1,2	4,0	3,5	3,6	0,8	2,8	4,1	3,5	6,9	4,0	4,3	4,3	2,0	4,3	3,3
1BNT	1,5	2,5	2,9	2,2	3,4	3,1	3,3	3,5	1,5	1,9	2,9	2,6	1,6	2,0	2,7	2,5	3,5	2,8	3,2	3,1	2,7	1,6	3,4	3,5	3,2	2,4	1,3	3,0	1,4	1,3	3,1	1,7	3,5	3,2	3,1	3,7	2,5	3,8	2,5	3,0	2,7
1BNU	2,0	1,3	3,2	2,6	3,3	1,3	3,3	1,3	1,5	1,4	2,0	1,3	1,3	2,5	3,0	2,9	2,8	2,5	3,0	3,6	2,5	2,5	2,5	3,5	2,6	2,6	1,3	3,4	1,5	2,8	1,3	1,3	3,0	3,0	1,3	2,6	2,6	3,8	1,7	2,5	2,4
1BNV	2,9	3,8	2,9	3,0	2,7	7,3	3,0	2,8	2,7	2,9	2,7	3,0	2,8	3,0	3,2	2,8	2,9	3,0	2,7	2,7	3,1	3,0	3,2	3,8	3,0	3,3	3,0	2,9	2,8	7,4	3,1	2,9	2,7	7,4	7,3	3,0	3,2	3,0	7,3	3,0	3,5
1BNW	1,7	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	3,7	1,9	2,1	1,9	1,9	2,3	1,8	1,8	1,8	1,8	1,9	1,9	1,9	2,0	1,9	1,9	2,1	2,0	2,0	1,9	1,9	1,9	1,8	1,7	1,9	1,8	1,9	1,8	2,2	2,1	2,0	2,0	1,8	2,0
1CIL	3,4	0,9	3,3	1,6	3,6	1,1	3,5	3,5	3,4	3,3	3,5	3,4	3,4	1,3	1,0	3,3	3,3	3,5	3,5	3,3	0,8	3,4	3,5	3,3	3,3	3,3	3,3	3,0	3,2	3,5	3,3	1,0	2,5	3,8	3,5	3,4	3,5	3,7	1,5	1,6	3,3
1CIM	1,8	1,0	2,2	1,4	2,7	0,9	1,0	2,7	0,8	1,5	1,9	0,9	1,0	1,0	1,1	2,6	2,5	1,9	2,7	2,8	2,6	2,6	2,7	3,0	2,8	2,7	1,2	2,0	1,9	1,7	1,1	2,0	2,7	1,9	1,2	1,1	2,7	1,5	2,8	2,6	1,8
1CIN	2,9	1,3	2,9	1,6	3,0	1,1	3,1	2,9	1,1	3,1	3,0	3,0	1,0	1,1	3,1	3,0	2,9	2,2	3,1	2,9	2,9	3,1	3,1	3,3	2,8	2,8	2,5	2,8	3,3	1,6	3,0	2,1	3,2	3,0	2,1	1,5	3,2	2,8	3,3	2,7	2,6
1CNX	4,5	5,1	4,4	4,3	4,8	4,5	6,6	4,6	4,8	3,4	4,7	4,5	4,4	4,3	4,8	1,3	4,2	1,6	1,4	5,0	4,5	4,9	4,5	4,4	6,0	2,9	5,0	4,3	4,3	4,3	5,0	4,4	4,9	4,6	4,5	4,5	5,6	6,4	2,2	6,6	4,4
1EOU	3,7	3,8	3,7	3,8	3,7	4,1	3,8	3,6	3,7	3,6	4,0	3,8	4,1	3,7	3,8	3,7	5,4	3,9	3,8	3,6	3,8	3,8	3,8	3,7	3,9	3,9	3,7	3,7	3,7	6,3	3,8	4,2	4,1	3,5	3,7	3,9	4,1	4,2	4,3	4,1	3,9
1G1D	1,1	1,5	1,3	1,3	1,2	1,4	1,0	1,4	1,3	1,3	1,4	1,3	1,5	1,3	1,4	1,3	1,1	1,4	1,2	1,4	0,8	1,3	1,3	1,3	1,3	1,0	1,4	1,4	1,3	1,1

Matrix of RMSDs obtained by the cross-docking study using the AUTODOCK3.0 program (using the first cluster and the best populated one, respectively).

RMSD < 1.5 | 1.5 < RMSD < 2.5 | 2.5 < RMSD < 3.5 | RMSD > 3.5

Protein

Ligand	1OQ5	1A42	1BN1	1BN3	1BN4	1BNM	1BNN	1BNQ	1BNT	1BNU	1BNV	1BNW	1CIL	1CIM	1CIN	1CNX	1EOU	1G1D	1GS2	1GS3	1GS4	1I8Z	1I90	1I91	1IF4	1IF5	1IF6	1IF7	1IF8	1IF9	1KWQ	1KWR	1OKL	1OKM	1OKN	1TTM	1XPZ	1XQ0	1YDA	1ZE8	RMSD
1OQ5	3.4	2.1	3.9	3.3	5.8	3.4	3.1	3.9	4.0	2.9	3.5	3.8	4.0	3.2	3.2	3.4	3.3	3.2	3.2	3.9	3.7	3.3	2.1	3.5	2.4	5.3	4.7	3.1	3.9	3.1	3.4	4.4	3.2	3.4	3.2	2.3	1.9	5.8	3.2	2.7	3.5
1A42	2.6	1.9	2.1	2.0	1.0	2.6	3.0	2.2	1.0	2.2	2.0	2.0	1.0	2.0	2.0	1.9	2.9	2.4	1.9	2.1	2.1	1.9	2.2	1.9	3.0	3.0	2.9	2.2	2.1	1.9	1.6	4.3	2.0	2.0	2.7	2.1	2.9	2.0	2.1	2.9	2.5
1BN1	4.2	4.2	3.9	4.0	3.8	4.2	4.0	5.3	3.9	4.0	4.0	4.1	5.9	3.9	4.1	4.1	4.5	5.4	4.0	3.6	4.1	3.9	3.6	3.6	3.5	4.2	4.1	3.4	3.7	4.2	3.6	4.1	3.6	4.2	4.0	3.2	5.1	3.2	2.4	3.2	4.0
1BN3	3.9	3.9	4.8	3.7	4.0	3.9	3.7	4.7	4.7	3.4	3.4	3.6	4.0	3.0	3.4	3.3	3.7	3.8	5.0	4.8	3.5	3.8	4.0	3.2	4.0	4.1	4.1	3.2	4.7	3.3	1.0	4.2	3.5	4.7	3.7	3.7	3.6	3.6	3.9	4.1	3.8
1BN4	4.1	5.3	4.1	4.3	3.5	3.9	4.2	5.4	5.4	3.7	3.7	3.9	4.2	4.2	4.2	4.2	4.3	5.2	3.9	3.8	5.3	3.9	5.3	5.2	4.0	4.6	4.8	3.8	4.2	3.8	4.3	3.7	3.8	3.8	3.8	4.8	5.2	4.0	3.0	4.4	4.3
1BNM	3.5	3.5	3.3	1.1	4.7	3.5	3.1	4.4	1.2	3.3	4.3	4.7	4.4	1.2	3.4	3.2	3.3	4.0	4.6	4.5	2.6	1.2	4.5	3.2	5.0	4.2	4.4	4.3	4.2	3.0	4.1	4.2	4.4	4.3	3.6	3.5	4.6	4.3	4.1	4.4	3.7
1BNN	3.5	3.7	3.3	1.4	3.3	3.2	2.8	4.8	1.3	3.4	3.1	3.4	3.8	3.1	3.3	3.4	3.5	3.6	5.0	3.0	3.8	1.3	4.0	2.8	4.2	4.0	3.9	3.2	3.2	3.1	3.1	4.1	3.2	4.8	3.6	1.4	1.5	3.2	3.9	3.9	3.3
1BNQ	2.9	1.7	1.8	1.8	1.4	2.2	2.7	1.8	1.8	2.0	1.8	1.8	1.9	1.6	1.8	1.4	2.5	2.6	1.8	1.7	1.8	1.5	1.8	2.6	4.0	3.0	2.6	2.5	1.5	1.7	1.5	2.3	1.9	1.7	2.0	2.7	2.4	2.4	2.6	2.6	2.1
1BNT	3.7	3.6	2.0	1.4	4.9	3.7	4.9	5.0	3.7	3.7	4.7	4.8	3.8	2.7	3.6	3.6	3.5	3.5	3.6	3.6	3.2	4.8	4.9	2.9	2.5	3.8	3.7	3.4	3.3	2.0	4.8	3.8	3.6	3.6	3.5	3.7	3.6	3.6	4.2	3.7	3.7
1BNU	3.2	3.5	2.5	2.3	3.0	3.1	3.4	3.4	3.4	3.3	3.1	3.3	3.4	2.4	3.3	2.4	3.3	3.2	3.2	3.2	3.3	3.3	3.3	3.3	3.6	3.3	3.6	3.2	3.2	2.6	2.5	3.8	3.4	3.2	3.3	3.3	3.2	3.2	2.2	3.7	3.2
1BNV	3.1	3.3	2.5	2.7	2.6	3.6	2.7	3.4	2.4	3.0	2.9	2.7	3.4	2.8	2.6	2.5	3.5	3.2	2.6	2.8	4.1	3.1	2.6	2.7	3.3	3.5	3.3	3.1	2.5	2.0	2.9	3.5	3.5	2.4	3.5	2.8	3.9	3.6	3.9	3.3	3.0
1BNW	3.1	2.5	2.8	3.0	2.9	4.0	3.8	3.2	3.4	3.1	3.6	3.9	3.4	3.6	3.4	3.4	3.5	3.4	3.2	3.6	3.5	2.0	3.6	3.7	3.4	4.6	4.4	2.8	3.8	3.3	3.6	4.8	3.3	3.4	3.0	3.2	3.7	3.8	2.7	4.6	3.5
1CIL	1.7	2.8	1.3	1.4	1.6	0.8	3.0	2.7	1.3	3.0	0.8	1.4	2.6	1.3	1.0	1.2	2.0	2.7	1.4	1.3	1.5	1.2	1.2	3.0	4.7	4.1	3.5	0.8	0.8	1.3	1.4	4.7	1.1	1.4	2.8	2.2	2.9	3.1	1.3	2.0	2.0
1CIM	2.7	2.8	3.2	3.5	3.2	3.2	2.7	2.9	3.2	3.5	2.7	3.2	2.9	3.2	3.2	3.0	3.1	2.8	3.2	3.5	2.6	3.5	4.2	3.5	4.1	4.2	4.5	2.4	2.7	3.5	3.2	4.5	4.2	2.8	2.6	3.3	4.1	4.2	3.3	4.1	3.3
1CIN	2.5	2.9	1.5	1.5	3.0	1.6	2.9	2.6	1.5	2.8	1.5	1.6	2.7	1.3	1.4	1.2	2.0	2.7	0.9	1.0	2.7	2.9	1.3	3.0	4.2	4.2	3.5	1.4	2.8	1.3	3.0	3.1	4.0	1.5	1.9	2.2	2.9	2.9	1.4	3.3	2.3
1CNX	5.9	6.1	6.0	6.0	6.0	6.0	6.1	6.1	5.4	6.0	6.1	6.7	6.4	6.0	6.1	4.1	3.4	6.1	6.1	6.3	6.2	6.1	3.7	3.7	4.0	4.2	4.9	4.3	3.4	5.6	3.8	4.5	6.1	6.1	2.8	4.0	3.8	4.3	3.3	3.9	5.1
1EOU	2.9	3.1	2.2	2.4	2.3	2.2	2.2	3.1	2.2	2.3	2.1	2.2	2.2	2.4	2.2	3.2	3.0	2.9	2.2	2.2	3.1	2.3	2.2	2.4	3.0	4.6	2.8	2.2	2.2	3.6	3.1	3.0	2.9	3.1	3.1	2.3	2.2	2.7	3.1	2.5	2.6
1G1D	4.9	3.4	4.0	4.3	4.1	4.1	4.3	5.3	3.8	4.3	4.1	4.1	5.0	3.8	3.8	3.7	5.0	3.7	4.0	3.7	3.8	3.8	3.8	3.3	4.2	3.0	4.2	3.6	4.1	3.5	3.6	4.1	5.1	4.1	3.5	5.1	4.9	5.3	3.4	5.0	4.1
1GS2	3.9	3.5	4.1	4.1	4.1	3.9	4.3	4.2	3.8	4.3	4.1	4.2	3.9	4.1	4.0	4.0	3.7	4.1	3.9	3.9	4.2	4.0	3.9	3.8	4.3	5.6	4.3	4.1	4.0	3.8	5.3	4.3	4.0	4.0	3.2	5.5	5.1	5.7	4.9	4.4	4.2
1GS3	3.7	3.8	4.1	4.2	4.2	3.8	4.4	3.8	3.7	4.0	4.2	4.0	3.8	3.8	3.8	3.7	4.9	3.6	3.7	3.7	4.0	4.1	3.8	3.1	3.8	5.0	4.2	3.9	3.9	3.6	3.5	4.7	4.1	3.9	3.8	4.1	4.0	4.8	3.6	4.0	4.0
1GS4	5.4	5.5	4.5	4.6	4.3	4.3	4.3	5.4	4.1	5.6	4.3	4.2	5.4	4.0	4.1	4.1	3.7	5.5	4.0	4.0	4.1	4.2	5.4	3.6	5.6	5.5	4.9	3.7	5.5	4.0	3.9	4.6	5.3	4.2	3.6	5.6	5.6	5.3	4.0	4.5	4.6
1I8Z	2.8	3.0	2.8	2.9	2.9	2.8	2.8	2.9	3.5	3.2	2.3	2.4	2.7	3.0	2.9	3.0	3.1	2.7	2.5	3.2	2.5	3.1	2.7	2.8	3.1	5.0	5.4	3.3	3.3	2.9	2.5	4.5	2.8	3.2	3.0	3.3	3.1	2.9	2.7	3.3	3.1
1I90	3.5	3.3	2.0	2.0	2.1	3.5	2.8	3.7	3.5	3.7	3.1	3.5	3.4	2.0	2.1	1.9	3.5	3.5	3.6	3.6	3.2	4.0	2.5	3.3	3.6	3.6	3.5	3.0	3.6	2.0	1.8	3.4	3.4	3.5	3.4	3.5	3.6	3.4	2.6	3.4	3.1
1I91	3.6	3.4	2.8	3.0	2.8	3.4	2.7	3.6	2.9	3.6	2.2	2.5	3.6	3.4	3.6	3.5	3.5	3.2	3.6	3.5	5.3	3.0	3.7	2.9	3.4	3.9	5.0	3.8	2.7	3.6	2.9	3.5	3.7	3.9	3.3	3.2	3.5	3.5	2.9	3.4	3.4
1IF4	4.2	1.6	2.0	1.8	2.1	1.8	1.5	1.7	1.6	1.7	1.7	1.8	1.7	4.3	1.9	2.0	3.0	1.7	1.5	1.6	2.1	1.8	1.6	1.7	4.9	5.3	7.0	2.3	1.9	2.1	1.7	4.4	2.1	1.7	1.9	3.6	1.6	1.7	2.0	5.2	2.5
1IF5	2.1	2.0	1.7	2.2	2.1	1.9	2.1	2.0	2.1	2.2	1.6	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	1.9	2.1	2.0	2.1	2.0	2.0	1.7	1.7	2.1	6.4	1.7	1.9	1.9	1.7	2.2	2.1	2.1	1.9	3.0	2.8	1.9	2.1	2.0	2.1
1IF6	3.7	1.7	1.9	1.7	2.3	2.2	1.8	3.8	1.8	3.8	1.7	1.8	1.8	1.8	3.8	3.8	3.8	1.9	1.8	1.8	3.8	1.8	1.8	2.3	1.7	5.0	1.8	2.1	1.8	2.2	3.8	4.9	1.9	2.3	3.8	3.8	3.9	1.5	4.1	3.7	2.6
1IF7	4.5	2.6	4.4	3.6	5.0	4.5	2.6	5.3	4.5	2.9	4.5	2.9	4.4	6.0	2.7	2.3	4.3	2.6	2.6	4.5	5.0	2.6	2.5	2.3	3.1	3.2	4.1	2.9	4.3	2.4	3.5	3.4	3.3	3.3	2.5	4.4	3.1	3.2	4.6	2.8	3.1
1IF8	5.2	5.2	4.4	4.9	5.5	4.7	4.9	4.9	5.3	4.2	5.1	4.6	5.1	3.5	4.3	4.1	2.5	5.2	5.0	4.5	4.5	4.9	5.1	4.7	3.2	3.4	3.7	4.3	3.9	2.5	4.4	3.7	3.7	2.5	2.8	3.3	4.9	3.3	2.2	3.2	4.2
1IF9	5.3	5.2	5.2	3.8	5.0	3.2	5.3	4.9	5.3	4.8	4.8	5.3	5.3	3.7	2.9	2.8	3.8	4.9	4.8	4.8	5.2	5.2	4.8	5.1	3.7	5.6	4.5	3.0	4.9	4.8	4.9	4.0	3.0	2.9	3.4	5.2	5.1	5.1	3.2	3.4	4.5
1KWQ	2.2	2.0	1.9	2.1	2.2	2.1	2.0	4.3	2.0	1.9	2.5	1.9	2.9	1.8	2.6	2.5	2.8	2.2	2.5	2.5	1.8	1.7	2.7	2.0	4.8	3.9	4.5	1.9	2.0	1.9	1.7	4.8	1.7	1.9	2.1	2.4	2.2	2.4	2.0	3.8	2.5
1KWR	2.8	3.8	1.8	1.7	2.5	3.7	2.4	3.5	1.7	1.7	2.4	2.4	2.7	1.4	2.4	2.6	4.2	3.8	2.4	2.4	0.8	3.7	2.8	2.4	4.3	4.2	4.5	2.4	2.4	2.4	3.7	4.8	2.8	2.4	3.5	1.8	1.8	3.6	2.0	4.1	2.8
1OKL	2.0	1.4	2.1	1.5	1.9	2.2	4.3	2.1	1.9	1.9	1.9	4.3	2.1	4.3	1.3	1.7	2.3	4.3	2.0	1.7	1.8	1.5	0.9	4.3	2.8	4.2	2.5	2.0	1.8	2.0	1.6	2.7	2.1	2.0	2.0	1.7	1.5	1.4	1.9	4.5	2.3
1OKM	3.6	4.0	4.1	3.6	3.4	3.2	4.3	3.4	3.5	4.2	4.0	4.1	3.6	4.1	4.1	3.1	3.5	3.4	3.3	3.6	3.1	3.1	3.5	3.7	4.9	4.0	4.0	3.7	3.3	3.4	3.5	3.9	3.3	3.2	3.1	4.4	2.9	3.1	3.2	3.6	3.7
1OKN	3.8	3.9	3.6	5.4	3.6	5.0	3.7	4.8	4.5	3.6	4.6	3.9	5.9	3.7	4.0	3.5	3.3	3.4	5.7	3.6	3.6	3.8	4.3	3.7	5.2	3.9	5.2	3.8	3.9	4.5	3.6	4.1	3.7	3.8	3.8	3.4	4.3	4.6	3.7	4.3	4.1
1TTM	5.4	3.0	2.6	2.1	2.8	3.3	2.9	2.9	5.8	2.4	2.6	2.5	3.2	2.0	5.7	5.3	3.2	3.1	2.7	2.7	2.9	2.3	2.9	2.9	3.9	5.1	3.8	2.5	2.7	2.4	5.3	4.1	5.4	2.2	3.0	2.5	5.8	2.8	2.1	3.9	3.4
1XPZ	1.9	2.6	2.1	2.8	2.2	2.5	2.0	2.6	2.3	1.7	2.0	2.1	2.7	2.1	2.2	2.1	2.9	2.4	2.3	1.9	5.1	2.0	2.3	5.1	3.0	4.7	3.6	2.5	2.0	2.4	1.9	3.6	2.2	2.0	2.6	2.5	2.7	2.9	2.9	5.3	2.7
1XQ0	2.7	5.2	5.3	2.6	1.4	2.4	2.1	1.5	1.7	2.3	5.1	5.5	1.5	1.5	1.4	2.1	5.5	2.8	2.6	2.8	2.5	2.2	1.4	2.6	5.9	6.1	3.8	2.9	2.8	2.8	2.8	6.0	2.6	2.7	2.4	5.6	2.6	5.6	2.2	5.7	3.2
1YDA	4.1	4.3	2.6	2.4	2.4	3.9	2.5	3.9	2.3	2.4	1.9	2.4	4.1	2.7	2.4	2.5	4.5	2.8	3.4	3.5	2.3	2.3	3.2	2.9	5.0	5.0	4.8	2.3	2.0	2.3	2.5	4.9	5.1	2.4	2.9	2.6	2.5	2.8	2.1	4.7	3.1
1ZE8	3.7	3.9	3.7	2.8	3.2	3.7	3.3	3.7	4.0	2.6	2.5	3.2	3.8	2.6	2.4	2.9	2.7	3.8	2.2	2.4	3.1	3.1	4.0	3.3	4.4	4.8	3.9	3.4	2.2	3.1	3.8	4.0	2.2	2.3	3.1	3.1	3.2	4.6	2.3	4.4	3.3
RMSD	3.6	3.4	3.1	2.9	3.2	3.3	3.3	3.7	3.1	3.2	3.1	3.3	3.5	3.0	3.0	3.0	3.4	3.4	3.2	3.2	3.3	2.9	3.2	3.2	3.9	4.3	4.1	3.0	3.1	2.9	3.1	4.0	3.3	3.0	3.1	3.4	3.5	3.5	2.9	3.8	3.3

AUTODOCK3.0, first cluster

RMSD < 1.5 | 1.5 < RMSD < 2.5 | 2.5 < RMSD < 3.5 | RMSD > 3.5

Protein

Ligand	1OQ5	1A42	1BN1	1BN3	1BN4	1BNM	1BNN	1BNQ	1BNT	1BNU	1BNV	1BNW	1CIL	1CIM	1CIN	1CNX	1EOU	1G1D	1GS2	1GS3	1GS4	1I8Z	1I90	1I91	1IF4	1IF5	1IF6	1IF7	1IF8	1IF9	1KWQ	1KWR	1OKL	1OKM	1OKN	1TTM	1XPZ	1XQ0	1YDA	1ZE8	RMSD
1OQ5	4.5	4.4	3.3	5.7	3.7	3.4	5.9	3.5	3.5	3.5	3.6	3.8	3.8	3.2	3.8	3.0	4.2	3.8	3.7	3.2	5.7	3.3	3.3	3.5	2.4	2.6	4.1	3.5	3.4	3.4	2.1	4.4	3.2	3.4	4.3	3.7	5.9	5.6	3.8	2.7	3.8
1A42	2.4	2.6	2.6	2.0	2.6	1.6	2.7	2.2	2.5	2.9	2.3	2.5	1.9	2.6	2.5	2.5	2.3	2.2	2.6	1.9	2.4	2.6	2.3	2.5	3.0	2.8	2.9	2.3	2.4	2.6	2.4	2.7	2.0	2.3	2.4	3.0	3.0	3.0	2.6	2.6	2.5
1BN1	4.2	4.5	3.9	4.0	3.8	4.2	4.0	3.7	3.9	4.0	4.0	3.9	3.9	3.8	3.9	3.3	2.6	3.8	4.0	3.9	3.9	4.1	4.0	3.2	4.5	4.2	4.3	3.6	4.0	3.7	3.8	3.9	4.0	3.9	3.8	4.0	5.3	3.8	4.0	2.8	3.9
1BN3	3.9	3.9	3.7	3.7	3.8	3.4	3.7	4.7	3.4	3.8	3.4	3.6	4.7	3.0	3.7	3.6	3.7	3.8	5.0	3.3	3.4	3.8	4.7	3.5	4.0	4.1	4.1	3.8	3.5	3.3	1.0	3.8	3.4	3.7	4.4	3.6	3.6	3.6	4.5	3.8	3.7
1BN4	4.1	3.9	5.6	3.9	3.5	3.9	3.5	3.8	3.8	5.3	5.2	4.1	3.9	5.0	4.8	4.8	3.8	4.1	3.9	3.8	5.3	4.2	4.0	4.0	5.0	4.6	4.1	5.2	3.8	4.9	3.8	4.5	3.9	5.5	3.8	5.2	5.0	4.9	4.8	3.8	4.4
1BNM	2.9	1.1	1.1	1.1	2.3	1.0	3.1	1.0	1.2	3.4	0.8	1.1	1.2	1.2	0.9	1.2	2.9	1.0	0.9	0.9	1.0	1.2	0.9	1.3	4.2	4.5	3.9	1.2	1.0	1.1	0.9	4.2	0.9	1.2	3.1	3.5	3.1	3.0	2.4	3.2	1.9
1BNN	3.5	3.3	3.3	3.6	4.0	3.5	3.7	4.0	1.3	3.6	2.8	2.8	3.8	4.0	3.3	1.4	3.5	3.6	2.9	3.0	2.8	1.3	4.0	4.3	4.0	4.0	3.9	3.2	4.0	4.0	3.1	4.1	3.7	4.8	3.6	3.1	2.8	3.2	1.3	3.9	3.4
1BNQ	2.2	4.5	1.8	1.8	1.4	2.2	2.0	1.8	1.6	2.2	2.5	1.8	1.9	1.6	1.6	2.2	2.7	2.6	1.8	1.5	1.8	1.3	1.6	2.5	2.5	3.0	2.6	2.2	2.6	2.2	2.3	2.3	2.2	2.7	2.7	2.6	2.1	2.6	3.0	2.3	2.3
1BNT	4.6	4.3	2.0	1.6	3.8	4.6	4.9	4.2	3.7	3.7	4.7	3.7	3.8	2.7	3.0	2.9	3.5	4.2	4.8	4.8	4.9	4.8	4.9	2.2	3.8	4.5	3.7	4.1	4.8	4.1	2.5	4.3	3.6	3.0	3.5	4.5	4.6	4.7	4.2	4.5	3.9
1BNU	3.3	3.5	3.5	2.4	2.4	3.1	3.4	3.1	2.2	3.6	3.1	3.5	3.2	3.5	3.4	3.3	3.2	3.2	3.0	3.3	4.0	2.1	3.3	3.3	3.3	3.3	3.6	3.9	3.3	3.1	2.1	3.6	3.4	3.2	3.2	3.1	3.2	3.2	3.4	3.2	3.2
1BNV	3.1	3.3	3.0	2.7	3.1	3.2	3.0	2.9	3.2	3.0	2.9	3.0	2.4	5.1	3.0	2.9	3.9	3.2	2.9	3.6	2.5	3.1	2.9	2.7	3.3	4.2	3.2	3.1	2.5	5.1	2.9	3.5	3.4	4.9	2.4	2.8	3.5	3.6	2.8	3.3	3.2
1BNW	3.3	4.1	2.8	2.2	3.5	3.6	3.7	3.2	2.8	3.1	3.9	3.9	3.2	2.1	2.0	2.3	3.8	3.2	4.2	3.6	4.1	2.0	3.1	3.3	4.7	4.7	4.5	3.4	3.8	3.7	1.9	4.8	3.4	3.4	3.3	2.7	4.2	4.0	1.9	4.6	3.4
1CIL	1.7	5.4	1.3	2.8	2.6	0.8	3.0	5.3	1.3	1.3	5.2	1.2	2.8	1.3	1.4	2.8	4.1	5.5	5.5	5.5	2.8	1.2	5.3	5.9	4.4	5.4	3.9	4.8	0.8	5.1	1.4	4.2	3.2	5.3	2.8	3.0	5.6	3.1	3.9	2.3	3.4
1CIM	2.7	3.3	3.2	3.2	3.2	3.1	3.3	2.9	3.0	3.1	3.3	3.3	4.1	3.3	3.3	3.1	3.9	2.8	3.0	3.0	3.2	3.1	3.2	3.2	4.3	4.2	4.0	3.1	3.1	3.1	3.1	4.5	3.2	3.2	2.9	3.2	2.8	3.2	3.3	4.1	3.3
1CIN	1.6	1.4	1.5	2.9	3.0	3.0	2.9	1.1	1.5	3.0	2.9	2.9	2.7	2.9	3.0	2.7	2.6	2.7	0.9	2.8	2.7	2.7	2.7	3.0	3.2	3.5	3.3	0.9	2.8	2.6	3.0	4.4	2.7	2.8	2.2	3.0	2.9	2.9	2.6	2.7	2.6
1CNX	3.7	4.3	6.0	6.1	4.5	6.0	6.0	3.9	5.7	4.2	4.1	6.3	6.4	4.3	4.1	4.3	3.4	6.1	6.1	5.7	6.2	6.8	6.1	3.7	3.9	4.6	4.3	5.9	3.4	3.9	3.5	4.5	4.5	6.0	2.8	3.6	3.9	6.0	3.1	6.9	4.9
1EOU	3.2	4.8	3.5	2.0	3.3	3.2	3.2	3.1	2.2	3.3	3.0	3.2	3.2	3.6	3.3	3.4	3.0	3.2	3.3	3.1	3.2	3.3	2.2	3.1	3.2	3.0	2.8	3.3	3.3	3.7	3.0	3.1	4.1	3.2	3.3	3.1	2.9	3.3	3.1	3.0	3.2
1G1D	4.9	4.4	3.9	3.9	3.7	3.9	4.2	3.1	3.8	4.0	4.1	2.9	5.0	3.8	3.8	4.7	5.0	3.7	4.0	3.7	4.9	3.8	5.0	3.6	4.0	5.1	3.9	3.4	3.1	5.0	3.6	5.2	4.0	3.6	3.6	5.2	4.9	5.3	3.4	5.0	4.2
1GS2	3.9	3.5	4.1	4.1	4.2	3.9	4.3	4.2	3.6	2.8