

Appendix A

Table of the ^1H , ^{13}C and ^{15}N chemical shifts of the α -spectrin SH3 domain at room temperature, in solution at pH = 3.5, in solution at pH = 7.5 (in italics) and in the solid-state at pH = 7.5 (in the grey box).

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^{α} /H ^{$\alpha\alpha$}	C ^{β} /H ^{$\beta\beta, \beta^3$}	C ^{γ} /H ^{$\gamma\gamma$} , C ^{γ^3} /H ^{γ^3}	C ^{δ} /H ^{$\delta\delta, \delta^3$}	C ^{ϵ} /H ^{$\epsilon\epsilon$}	C ^{ζ} /H ^{$\zeta\zeta, \zeta^3$}	C ^{η} /H ^{$\eta\eta, \eta^3$}
M1			172,0	54,7	32,7	30,8				
				4,12	2,14	2,60				
<i>M1</i>						2,56				
M1										
D2	123,3	8,81	175,9	54,0	40,5					
				4,67	2,77					
					2,69					
<i>D2</i>			176,2	54,2	41,1					
				4,67	2,71					
D2										
E3	121,7	8,68	176,6	56,0	29,1	34,4				
				4,38	2,14	2,37				
					1,94					
<i>E3</i>	121,5	8,75	176,9	57,1	29,9	36,5				
				4,31	2,04	2,26				
					1,96					
E3										
T4	114,4	8,31	175,5	62,2	69,5	21,5				
				4,25	4,20	1,22				
<i>T4</i>	113,9	8,34	175,4	62,3	69,8	21,8				
				4,29	4,25	1,21				

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
T4											
G5	111,3	8,44	173,8	45,2							
				3,94							
G5	111,1	8,38	173,8	45,4							
				3,95							
G5											
K6	119,8	8,00	176,0	55,5	33,3	24,7		28,9	41,9		
				4,36	1,78	1,37		1,65	2,96		
					1,68	1,32					
K6	120,3	7,98	176,0	55,9	33,6	25,0		29,1	42,1		
				4,37	1,71	1,31		1,31	2,95		
K6				56,0		25,0		29,7	42,3		
E7	122,9	8,63	174,3	55,3	30,7	34,7					
				4,51	1,99	2,42					
						2,30					
E7	122,9	8,65	174,5	55,9	31,7	36,9					
				4,46	1,95	2,25					
						2,20					
E7			174,5	55,7	31,7	36,6					
				4,9	2,2	2,0					
L8	123,1	8,48	177,5	53,2	45,2	26,9		25,4			
								23,0			
				5,37	1,70	1,66		0,85			
					1,34			0,78			
L8	122,7	8,61	177,5	53,3	45,3	27,3		25,7			
								23,1			
				5,39	1,74	1,71		0,79			
					1,34						
L8	120,8	8,0	176,9	53,0	46,0	26,4		23,7			
								22,6			
				5,5	1,2	1,2					
V9	111,7	9,17	172,5	57,6	35,8		23,8				
							20,2				
				5,19	1,99		1,04				
							0,82				
V9	111,6	9,14	172,6	57,9	36,0		24,0				
							20,3				

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
				5,16	1,99		1,04				
							0,77				
V9	111,1	8,8	172,5	57,6	35,9		23,9				
							20,7				
				5,4	2,1		1,2				
							1,0				
L10	123,1	8,97	176,7	52,1	46,7	27,3		24,1			
								26,4			
				5,11	1,70	1,26		0,85			
					1,39			0,82			
L10	123,0	8,95	176,7	52,4	46,8	27,3		24,1			
								26,5			
				5,12	1,69	1,27		0,83			
					1,36			0,80			
L10	123,9	9,1	176,5	52,8	46,5	27,3		24,1			
								26,5			
				5,4	1,6	1,2		1,1			
								1,0			
A11	127,0	9,12	178,4	52,1	19,3						
				4,59	1,65						
A11	126,9	9,12	178,4	52,3	19,4						
				4,59	1,66						
A11	127,8	9,2	177,9	52,7	19,6						
				4,8	1,8						
L12	127,5	9,25	175,1	55,5	42,8	26,8		25,4			
								21,7			
				3,89	1,18	1,37		0,70			
					0,71			0,64			
L12	127,7	9,25	175,1	55,6	43,1	27,1		25,7			
								21,9			
				3,88	1,17			0,69			
					0,70			0,62			
L12	128,1	9,1	174,8	55,9	43,1	26,6		25,4			
								21,8			
				4,3	1,5			0,9			
					0,7			0,8			
Y13	111,5	7,13	173,8	54,5	42,8			133,2	118,1		
				4,62	3,06			7,26	6,95		
					2,09						
Y13	111,7	7,13	173,7	54,5	43,1						
				4,58	3,05						
					2,08						
Y13	110,1	7,0	173,6	55,2	43,5	130,7		133,5	118,2	160,1	
				4,7	3,4						
					1,8						

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
D14	117,7	8,31	176,2	54,2 4,59	41,3 2,82						
<i>D14</i>	117,8	8,29	176,3	54,5 4,61	41,6 2,82						
D14	117,6	8,4	176,4	54,7 4,8	41,9 2,9						
Y15	120,0	8,74	172,9	59,4 4,64	43,3 3,00			133,7 6,62	177,3 6,56		
<i>Y15</i>	199,9	8,74	172,9	59,6 4,64	43,5 3,00						
Y15	118,7	8,5	172,6	60,3 4,8	43,6 3,2	129,2			118,4	159,1	
Q16	126,8	7,54	174,1	53,4 4,49	29,1 1,78	33,4 2,28		180,5			
<i>Q16</i>	126,7	7,53	174,0	53,9 4,45	29,4 1,78	33,8 2,27					
Q16	127,0	7,6	174,0	54,1 4,8	29,2 1,9	33,7 2,4					
E17	122,9	7,98	176,1	55,8 4,20	29,1 2,22	33,4 2,25					
<i>E17</i>	123,0	7,91	176,1	56,1 4,23	30,5 2,15	35,1 2,15					
E17	122,8	7,7	175,6	56,0 4,4	30,9 2,0	34,6 1,9		185,0			
K18	120,6	8,83	176,3	55,0 4,41	33,3 1,99	24,4 1,66		28,5 1,75	42,3 3,10		
<i>K18</i>	120,7	8,86	176,3	55,3 4,43	33,5 2,00	24,4 1,68		28,6 1,73		3,10	
K18	119,5	8,6	174,6	54,8 4,7	34,2	24,2 1,5		29,1 1,7		3,1	
S19	115,0	7,67		56,5 4,83	64,1 4,07						
					3,71						

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
S19	114,8	7,60		56,5 4,86	64,1 4,09 3,73						
S19	111,5	7,1	173,0	56,7 4,5	63,6 4,2 3,5						
P20	133,9		176,8	64,6 4,54	31,7 2,46 1,96	27,6 2,08 1,98		51,1 3,89 3,77			
P20			176,8	64,6 4,56	32,0 2,47 1,95	27,5 2,08 1,99		51,2 3,88 3,77			
P20	137,6		176,9	65,2 4,8	31,9 2,5 1,9	27,3 2,2		50,1 2,5			
R21	113,6	7,69	176,5	55,8 4,59	30,1 1,91	27,4 1,66 1,37		43,2 3,00 2,87			
R21	113,9	7,69	176,5	56,0 4,57	30,5 1,91	27,6 1,63 1,37		43,3 2,96 2,89			
R21	112,2	8,1	176,6	55,7				43,0			
E22	121,4	7,87	174,4	55,0 5,48	33,5 2,74 2,22	36,7 2,39 2,08					
E22	121,4	7,84	174,3	55,1 5,45	33,6 2,75 2,18	36,9 2,35 2,05					
E22	122,9	7,6	174,5	55,9 5,4	33,7 2,2	37,4 2,2		183,7			
V23	113,2	7,39	172,6	59,7 4,54	34,8 1,78		20,3 21,1 0,63 0,62				
V23	111,9	7,34	172,7	59,6 4,50	34,9 1,82		20,3 21,6 0,59				
V23	112,0	7,5	171,8	59,3 4,8	35,2 2,1		19,9 21,5 0,8 0,8				
T24	118,5	7,23	174,5	61,7 5,09	70,8 3,97	21,7 1,36					

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
D29	122,2	8,4	175,1	55,3 4,90	42,2 2,90	179,3					
I30	120,2	8,09	176,3	59,9 5,01	37,9 1,78	27,7 1,69	18,6 0,91	12,3 0,88			
I30	120,2	8,06	176,3	59,9 5,02	38,3 1,77	27,9 1,72	18,9 0,91	12,5 0,88			
I30	120,0	8,7	176,6	58,2 5,3	35,8 2,5	26,6 1,7	18,0 0,9	11,2 1,2			
L31	127,2	9,33	175,7	53,4 4,98	43,6 1,60	28,2 1,59		27,3 0,89			
L31	127,3	9,33	175,7	53,6 4,99	43,9 1,58	28,3 1,45		27,4 0,87			
L31	128,7	9,5	176,5	53,1 5,3	42,6 1,6	27,9		27,4 26,6 1,6 1,1			
T32	117,1	8,47	173,9	63,0 4,59	69,5 4,07	22,1 1,14					
T32	117,5	8,43	173,8	63,1 4,56	69,4 4,10	22,6 1,13					
T32	119,1	8,2	173,5	63,0 4,8	69,6 4,5	22,9 1,4					
L33	128,9	9,07	174,7	54,5 4,36	42,8 1,81	26,8 1,16		23,7 25,3 0,70 0,39			
L33	129,0	9,09	174,8	54,6 4,36	43,0 1,79	27,1 1,14		23,7 25,6 0,68 0,40			
L33	130,4	8,9	174,4	54,9 4,7	43,0 1,9	26,7 1,4		23,9 25,5 0,9 0,4			
L34	126,0	9,05	177,7	54,7 4,51	42,8 1,39	26,9 1,43		22,0 25,7 0,74			

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
L34	126,4	9,07	177,6	55,0	42,7	27,5		1,13			0,70
				4,51	1,41				26,1		
					1,12				0,69		
L34	125,8	8,9	177,4	55,0	42,9	26,8			22,1		
				4,9	1,3	1,5			25,8		
									0,9		
N35	113,8	7,62	174,6	54,2	41,0	176,3					
				4,72	2,79						
					2,64						
N35	113,9	7,59		54,3	41,0						
				4,70	2,73						
					2,68						
N35	113,9	7,4	174,5	54,3	40,5	175,6					
				5,0	2,9						
S36	123,7	9,18	173,5	56,5	61,7						
				3,91	2,85						
					2,04						
S36	123,7	9,13	173,6	56,3	62,0						
				3,86	2,82						
					2,02						
S36	125,1	9,2	173,5	57,0	62,0						
				4,4	3,4						
					2,4						
T37	115,0	8,17	175,5	65,1	69,2	21,9					
				3,97	4,25	1,32					
T37	114,8	8,19	175,4	65,3	69,4	22,1					
				3,96	4,21	1,31					
T37	112,8	8,1	175,9	65,0	70,7	22,4					
				4,4	4,5	1,6					
N38	122,3	8,68	174,7	53,2	40,5	178,2					
				4,88	3,68						
					2,90						
N38	122,5	8,68	174,7	53,3	40,5						
				4,85	3,70						
					2,90						
N38	126,0	9,1	174,7	54,2	41,7	178,5					
				5,0	4,1						
					3,1						
K39	120,8	8,50	176,4	58,1	32,5	24,1		28,8	42,1		
				4,25	1,83	1,44		1,69	3,02		
					1,78						

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
K39	120,8	8,50	176,4	58,2 4,24	32,6 1,79	24,4 1,42		29,3 1,74	42,5 3,07		
K39	121,6	8,6	176,3	58,5	32,9	23,9		29,7	41,8		
D40	114,4	8,19	177,1	55,3 4,54	43,1 2,64						
D40	114,7	8,20	177,2	55,4 4,54	43,7 2,62						
D40	115,5	8,0	177,1	55,8 4,8	44,3 2,5	179,7					
W41	122,5	8,19	174,3	55,8	32,0			127,5	119,1	114,5 120,8	125,5
W41	122,7	8,19	174,3	56,0	32,3			7,03	7,03	7,32 6,56	7,18
W41	123,0	8,4	174,2	56,1 5,2	32,6 2,8			128,5 128,5	139,0 118,9	114,7 120,8	125,8
W42	124,6	9,36	174,3	53,7	31,4			125,2	120,5	114,5 120,6	124,2
W42	124,8	9,36	174,2	53,9	31,6			7,49	7,03	7,48 6,66	7,15
W42	124,0	9,0	174,2	53,9 5,8	31,6	112,2		126,0 129,3	139,3 120,9	114,7 120,2	124,2
K43	124,1	8,89	175,4	55,0 4,38	34,3 1,52	25,7 1,00		29,0 1,33	2,62 2,53		
K43	124,1	8,86	175,5	55,2 4,37	34,5 1,52	26,0 0,99		29,3 1,30			
K43	123,8	8,9	175,3	55,2 4,6	34,7 1,3	26,2 1,1		29,5 1,7	2,9		

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
V44	122,1	9,41	173,5	58,9	36,6		21,2				
							18,8				
				5,37	2,09		0,84				
							0,78				
<i>V44</i>	122,2	9,44	173,4	58,9	36,7		21,6				
							19,0				
				5,37	2,11		0,79				
							0,75				
V44	122,2	9,3	173,2	58,9	36,8		21,1				
							18,7				
				5,6	2,2		1,0				
							0,9				
E45	118,6	8,71	174,9	54,0	32,5	34,2					
				5,40	1,94	2,22					
					1,86						
<i>E45</i>	119,3	8,69	175,2	54,4	34,0	37,2					
				5,39	1,88	2,05					
E45	120,0	8,1	175,2	54,7	34,1	37,5					
				5,5	2,0	2,5					
V46	124,8	8,87	174,6	60,4	33,5		21,1				
							19,0				
				4,49	2,09		1,04				
							0,97				
<i>V46</i>	124,8	8,90	174,6	60,5	33,7		21,2				
							19,3				
				4,50	2,11		1,03				
							0,98				
V46	125,6	8,9		60,2	33,4		20,9				
							19,7				
				5,1	2,4		1,4				
							0,8				
N47	126,4	9,43	174,2	55,0	37,4	177,7					
				4,30	3,03						
					2,90						
<i>N47</i>	126,4	9,41	174,0	55,2	37,6						
				4,29	2,97						
					2,90						
N47											
D48	113,2	8,74	174,7	54,7	38,9						
				4,44	2,93						
<i>D48</i>	113,6	8,76	174,8	55,3	40,0						
				4,33	2,85						

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
D48											
R49	120,4	8,19	174,5	55,0	32,5	27,2		43,5			
				4,64	1,88	1,77		3,32			
						1,65		3,29			
R49	120,1	8,12	174,4	55,3	33,1	27,3		43,7			
				4,65	1,85	1,77		3,34			
						1,59		3,27			
R49	122,1	8,4	174,4	55,3	34,2	27,2		43,8			
				4,80	2,30	2,10		3,60			
Q50	118,6	8,48	176,0	53,2	31,4	33,4		179,6			
				5,50	1,86	2,30					
					1,68	2,12					
Q50	118,4	8,37	176,1	53,3	31,2	33,7					
				5,52	1,91	2,38					
					1,59	2,16					
Q50	116,8	8,4	175,9	53,3	31,3	33,5	179,7				
				6,2	1,9	2,5					
G51	107,2	8,66	170,5	45,4							
				3,94							
G51	107,6	8,72	170,4	45,6							
				3,94							
G51	107,1	8,7	170,5	45,9							
				4,2							
F52	119,0	9,20	175,6	58,4	42,3			131,5	131,5	129,8	
				5,63	3,16			7,37	7,11	7,31	
					2,61						
F52	119,0	9,16	175,6	58,5	42,5						
				5,63	3,17						
					2,60						
F52	118,9	9,0	175,4	59,1	42,3			131,5	131,5	129,2	
				5,8	3,4						
					2,8						
V53	110,9	9,07		57,8	33,5		22,4				
							17,5				
				4,80	1,75		1,09				
							0,68				
V53	110,8	9,04			33,8						
							17,6				
V53	110,4	8,8	172,5	58,3	33,6		22,4				

(continued)

Residue	N	H ^N	C	C ^α /H ^{αα}	C ^β /H ^{ββ,β3}	C ^γ /H ^{γγ}	C ^{γ3} /H ^{γ3}	C ^δ /H ^{δδ,δ3}	C ^ε /H ^{εε}	C ^ζ /H ^{ζζ,ζ3}	C ^η /H ^{ηη,η3}
							17,2				
				5,0	1,9		1,2				
							0,8				
P54	137,4		177,9	61,7	30,1	27,8			50,1		
				3,55	1,28	0,65			2,47		
					0,82				2,18		
<i>P54</i>			177,9	61,8	30,2	28,1			50,0		
				3,54	1,27	0,65			2,45		
					0,81				2,15		
P54	136,9		177,5	61,9	30,1	28,1			50,1		
				3,6	1,0	0,6			2,4		
					0,5						
A55	128,9	7,49	178,5	54,2	15,9						
				2,66	-0,07						
<i>A55</i>	129,0	7,50	178,6	54,4	16,0						
				2,65	-0,06						
A55	129,1	7,4	178,7	54,5	15,7						
				2,8	-0,1						
A56	113,2	7,85	178,2	52,7	17,7						
				3,99	1,18						
<i>A56</i>	113,4	7,86	178,2	52,8	17,9						
				4,00	1,18						
A56	113,3	7,9	177,9	53,1	18,1						
				4,30	1,40						
Y57	115,9	7,72	174,6	56,0	37,7				130,9	118,2	
				4,72	3,37				6,70	6,82	
					3,00						
<i>Y57</i>	116,1	7,71		56,2	37,9						
				4,73	3,38						
					2,99						
Y57	113,4	7,3	174,1	54,8	37,4	130,7			130,8	117,6	157,2
V58	110,9	7,43	173,7	57,8	35,8		22,6				
							19,4				
				5,53	1,88		0,76				
							0,75				
<i>V58</i>	111,2	7,41	173,6	58,2	35,9		22,8				
							19,6				
				5,49	1,89		0,76				
							0,73				
V58	111,0	7,3	173,6	57,9	35,7		22,5				

