



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 31, 2022 – 10:52 AM EDT

PDB ID : 7MHL
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 100 K
Authors : Ebrahim, A.; Riley, B.T.; Kumaran, D.; Andi, B.; Fuchs, M.R.; McSweeney, S.; Keedy, D.A.
Deposited on : 2021-04-15
Resolution : 1.55 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	FAILED
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.27

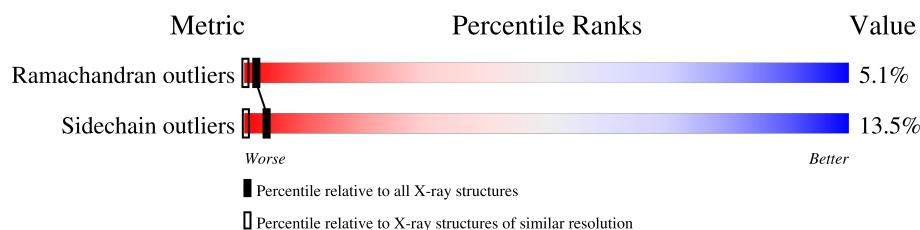
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.55 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Ramachandran outliers	138981	1498 (1.56-1.56)
Sidechain outliers	138945	1495 (1.56-1.56)














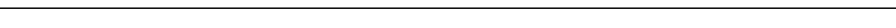











The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$.

Note EDS failed to run properly.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	306	84% 11% . .
1	10-A	306	82% 15% .
1	11-A	306	83% 12% 5%
1	12-A	306	81% 16% .
1	13-A	306	82% 12% 5% .
1	14-A	306	84% 11% 5%
1	15-A	306	84% 14% .
1	16-A	306	83% 12% .
1	17-A	306	79% 17% .














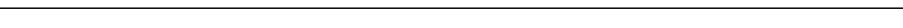






Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	18-A	306	 81% 13% 6%
1	19-A	306	 80% 16% ..
1	2-A	306	 86% 10% .
1	20-A	306	 79% 16% 5%
1	21-A	306	 80% 14% 5% .
1	22-A	306	 81% 14% ..
1	23-A	306	 82% 14% .
1	24-A	306	 82% 14% .
1	25-A	306	 82% 13% ..
1	26-A	306	 81% 15% .
1	27-A	306	 77% 17% 5% .
1	28-A	306	 83% 14% ..
1	29-A	306	 84% 14% .
1	3-A	306	 88% 9% .
1	30-A	306	 85% 12% ..
1	31-A	306	 82% 14% .
1	32-A	306	 82% 16% .
1	33-A	306	 81% 13% 5% .
1	34-A	306	 83% 14% ..
1	35-A	306	 81% 14% ..
1	36-A	306	 81% 14% ..
1	37-A	306	 83% 14% ..
1	38-A	306	 84% 13% .
1	39-A	306	 81% 15% .
1	4-A	306	 86% 10% .

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	40-A	306	 82% 16% ..
1	41-A	306	 82% 13% . .
1	42-A	306	 87% 9% . .
1	43-A	306	 85% 11% ..
1	44-A	306	 86% 11% .
1	45-A	306	 84% 12% . .
1	46-A	306	 87% 11% .
1	47-A	306	 81% 15% .
1	48-A	306	 83% 13% .
1	49-A	306	 84% 12% .
1	5-A	306	 85% 12% .
1	50-A	306	 82% 14% .
1	51-A	306	 86% 11% . .
1	52-A	306	 83% 12% 5%
1	53-A	306	 82% 14% .
1	54-A	306	 86% 10% .
1	6-A	306	 83% 15% ..
1	7-A	306	 84% 13% . .
1	8-A	306	 85% 13% .
1	9-A	306	 83% 15% . .

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 264643 atoms, of which 126576 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called 3C-like proteinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	2-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	3-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	4-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	5-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	6-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	7-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	8-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	9-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	10-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	11-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	12-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	13-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	14-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	15-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	16-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

Continued on next page...

Continued from previous page...

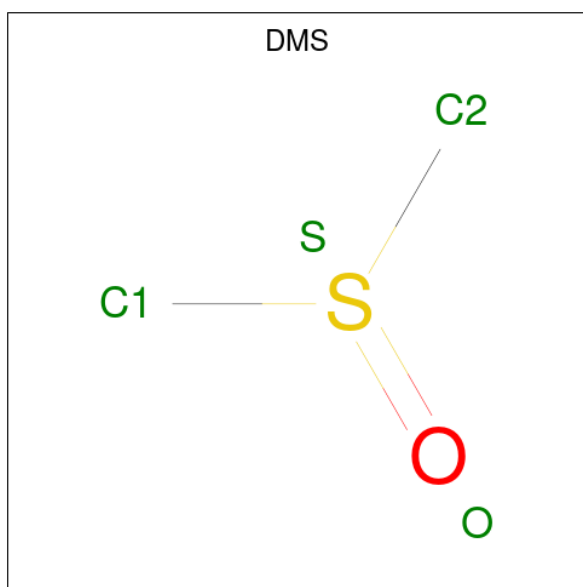
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	18-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	19-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	20-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	21-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	22-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	23-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	24-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	25-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	26-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	27-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	28-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	29-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	30-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	31-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	32-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	33-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	34-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	35-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	36-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	37-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	38-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	39-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	40-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	41-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	42-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	43-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	44-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	45-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	46-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	47-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	48-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	49-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	50-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	51-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	52-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	53-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	54-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

- Molecule 2 is DIMETHYL SULFOXIDE (three-letter code: DMS) (formula: C₂H₆OS).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	44-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	45-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	46-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	47-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	48-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	49-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	50-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	51-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	52-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	53-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	54-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

- Molecule 3 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	1-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	2-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	3-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	4-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	5-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	6-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	7-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	8-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	9-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	10-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	11-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	12-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	13-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	14-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	15-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	16-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	17-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	18-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	19-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	20-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	21-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	22-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	23-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	24-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	25-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	26-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	27-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	28-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	29-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	30-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	31-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	32-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	33-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	34-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	35-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	36-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	37-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	38-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	39-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	40-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	41-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	42-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	43-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	44-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	45-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	46-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	47-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	48-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	49-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	50-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	51-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	52-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	53-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	54-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	190	Total	O	0	0
			190	190		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
4	2-A	172	Total O 172 172	0	0
4	3-A	162	Total O 162 162	0	0
4	4-A	157	Total O 157 157	0	0
4	5-A	164	Total O 164 164	0	0
4	6-A	181	Total O 181 181	0	0
4	7-A	173	Total O 173 173	0	0
4	8-A	177	Total O 177 177	0	0
4	9-A	174	Total O 174 174	0	0
4	10-A	168	Total O 168 168	0	0
4	11-A	164	Total O 164 164	0	0
4	12-A	195	Total O 195 195	0	0
4	13-A	196	Total O 196 196	0	0
4	14-A	152	Total O 152 152	0	0
4	15-A	164	Total O 164 164	0	0
4	16-A	166	Total O 166 166	0	0
4	17-A	176	Total O 176 176	0	0
4	18-A	177	Total O 177 177	0	0
4	19-A	160	Total O 160 160	0	0
4	20-A	161	Total O 161 161	0	0
4	21-A	179	Total O 179 179	0	0
4	22-A	175	Total O 175 175	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	23-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	24-A	164	Total 164	O 164	0	0
4	25-A	166	Total 166	O 166	0	0
4	26-A	178	Total 178	O 178	0	0
4	27-A	181	Total 181	O 181	0	0
4	28-A	167	Total 167	O 167	0	0
4	29-A	158	Total 158	O 158	0	0
4	30-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	31-A	183	Total 183	O 183	0	0
4	32-A	169	Total 169	O 169	0	0
4	33-A	181	Total 181	O 181	0	0
4	34-A	182	Total 182	O 182	0	0
4	35-A	165	Total 165	O 165	0	0
4	36-A	165	Total 165	O 165	0	0
4	37-A	169	Total 169	O 169	0	0
4	38-A	170	Total 170	O 170	0	0
4	39-A	182	Total 182	O 182	0	0
4	40-A	172	Total 172	O 172	0	0
4	41-A	158	Total 158	O 158	0	0
4	42-A	163	Total 163	O 163	0	0
4	43-A	164	Total 164	O 164	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

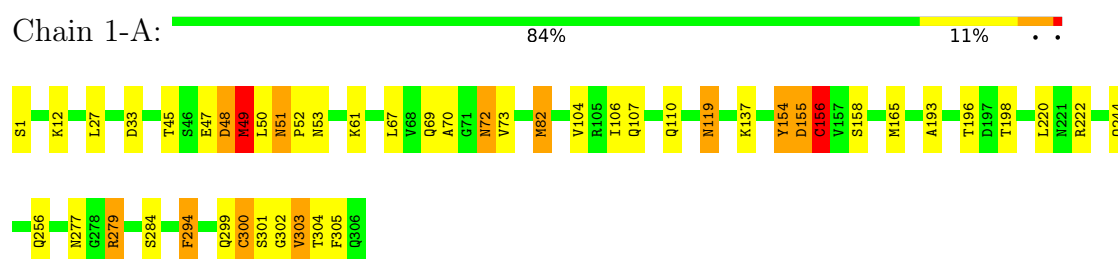
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	44-A	172	Total 172	O 172	0	0
4	45-A	150	Total 150	O 150	0	0
4	46-A	162	Total 162	O 162	0	0
4	47-A	152	Total 152	O 152	0	0
4	48-A	151	Total 151	O 151	0	0
4	49-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	50-A	185	Total 185	O 185	0	0
4	51-A	168	Total 168	O 168	0	0
4	52-A	151	Total 151	O 151	0	0
4	53-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	54-A	174	Total 174	O 174	0	0

3 Residue-property plots

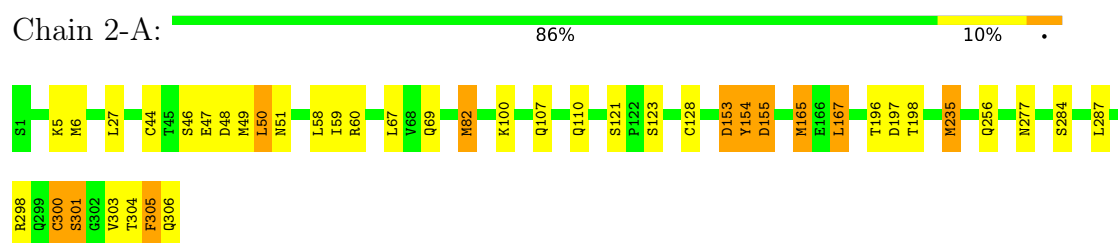
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS failed to run properly.

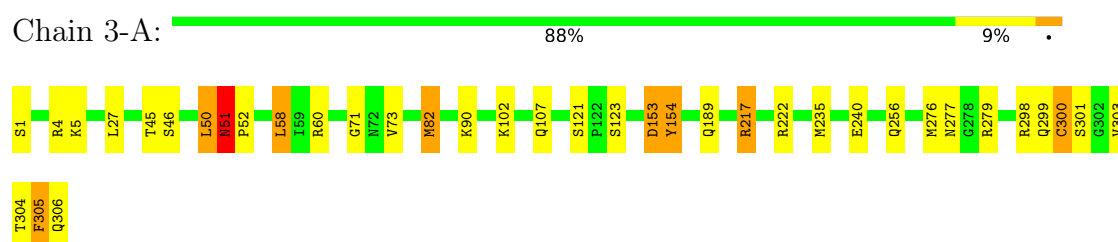
• Molecule 1: 3C-like proteinase



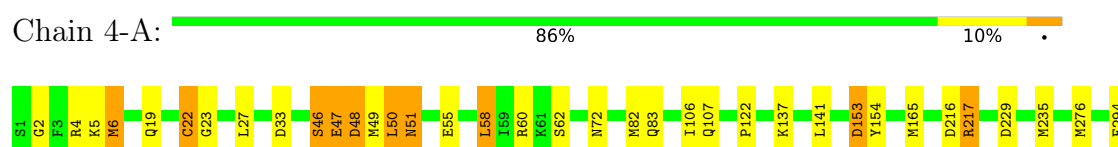
• Molecule 1: 3C-like proteinase

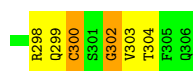


• Molecule 1: 3C-like proteinase



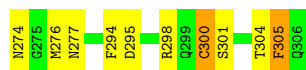
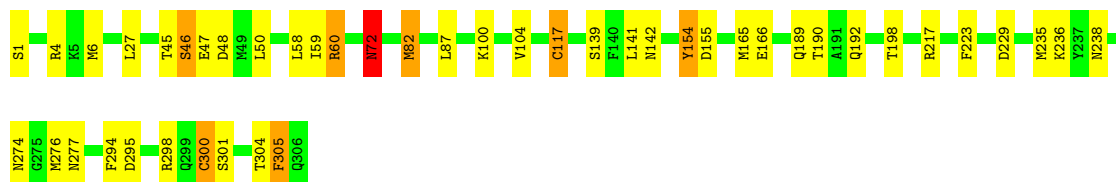
• Molecule 1: 3C-like proteinase





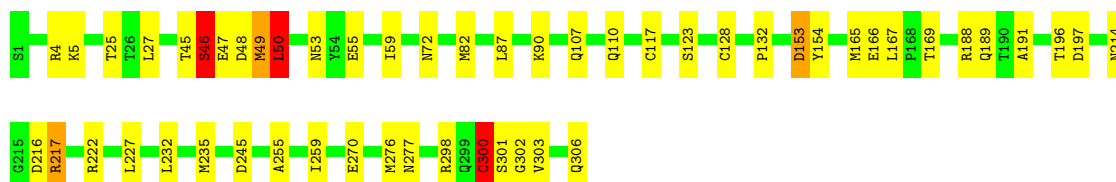
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 5-A: 85% 12% .



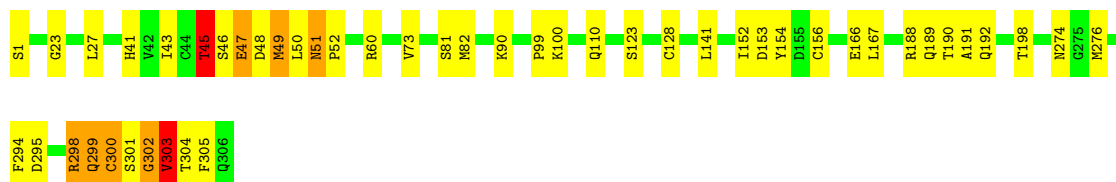
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 6-A: 83% 15% ..



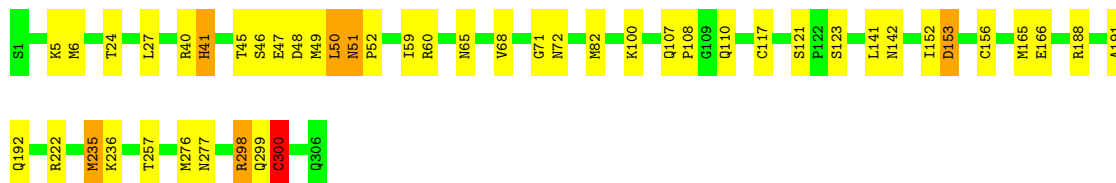
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 7-A: 84% 13% ..



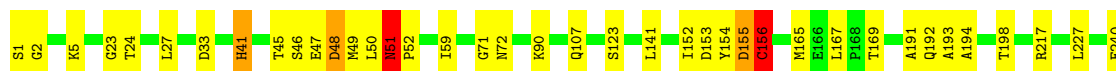
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 8-A: 85% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 9-A: 83% 15% ..





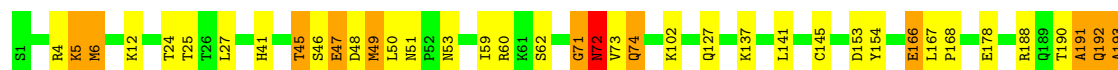
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 10-A: 82% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 11-A: 83% 12% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 12-A: 81% 16% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 13-A: 82% 12% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

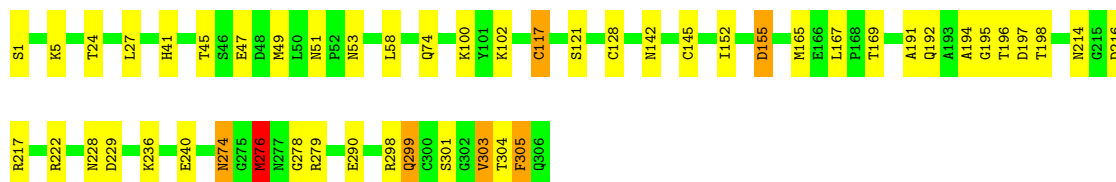
Chain 14-A: 84% 11% 5%





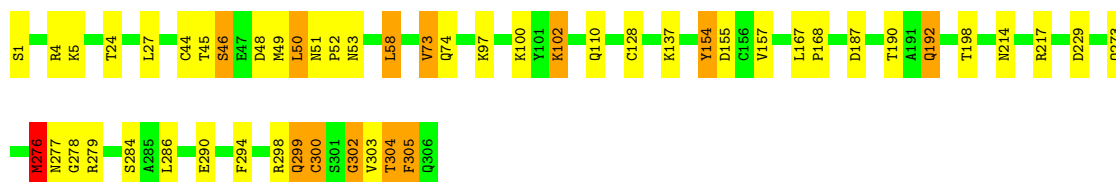
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 15-A: 84% 14% .



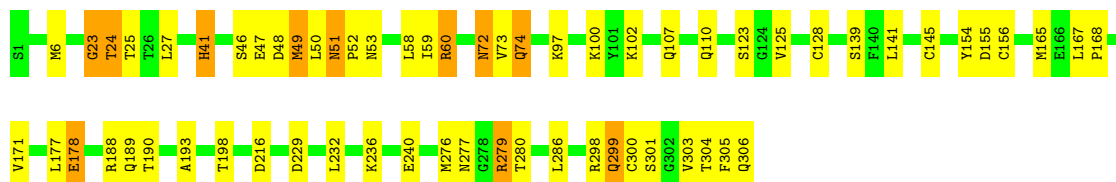
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 16-A: 83% 12% .



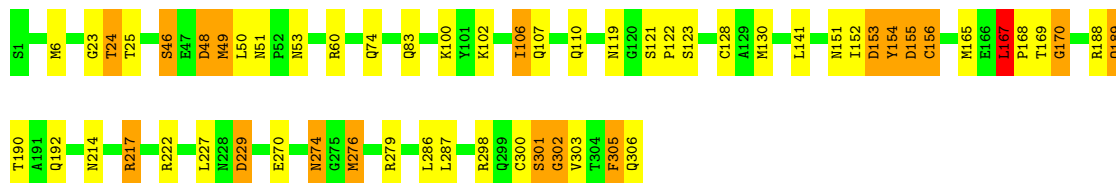
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 17-A: 79% 17% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 18-A: 81% 13% 6%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

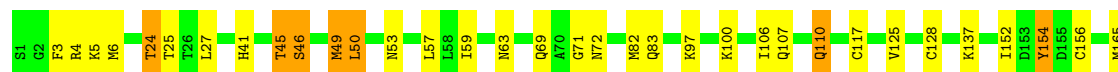
Chain 19-A: 80% 16% . .





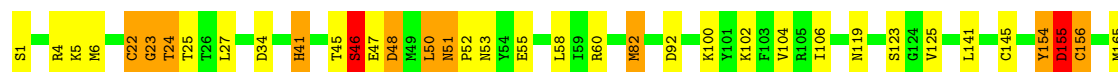
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 20-A: 79% 16% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 21-A: 80% 14% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 22-A: 81% 14% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

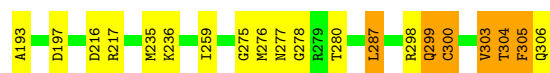
Chain 23-A: 82% 14% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 24-A: 82% 14% 5%





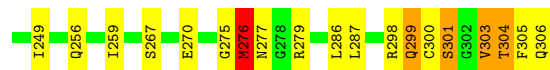
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 25-A: 82% 13% . .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 26-A: 81% 15% .



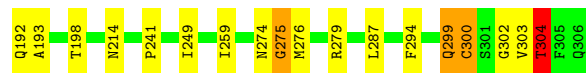
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 27-A: 77% 17% 5% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 28-A: 83% 14% . .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

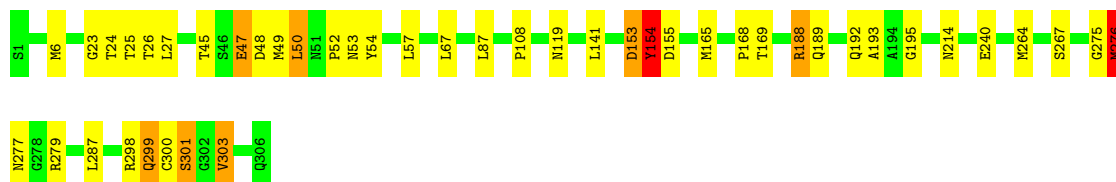
Chain 29-A: 84% 14% .





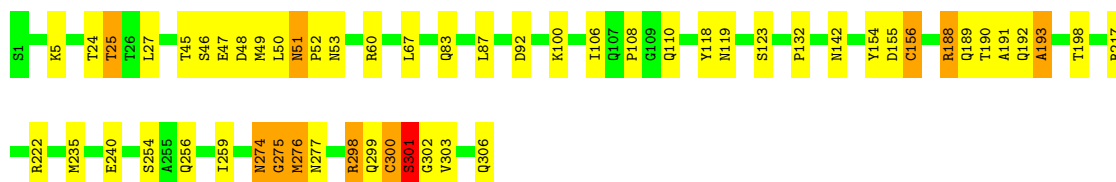
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 30-A: 85% 12% ..



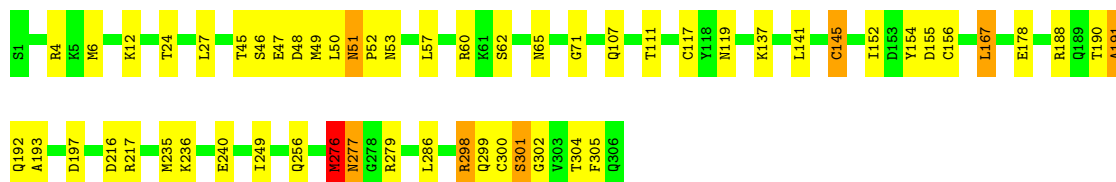
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 31-A: 82% 14% .



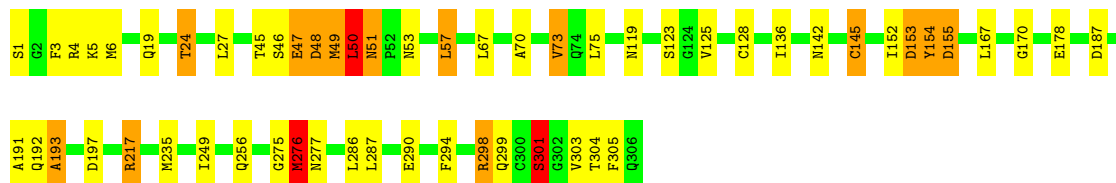
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 32-A: 82% 16% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 33-A: 81% 13% 5% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 34-A: 83% 14% ..





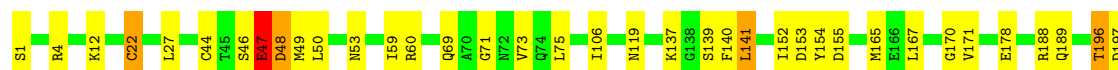
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 35-A: 81% 14% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 36-A: 81% 14% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 37-A: 83% 14% ..



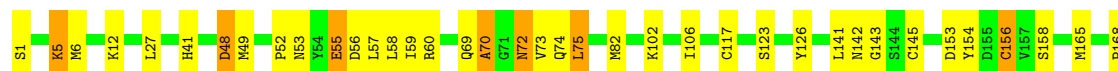
- Molecule 1: 3C-like proteinase

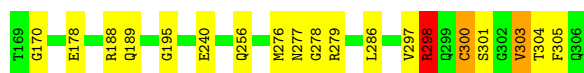
Chain 38-A: 84% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 39-A: 81% 15% .





- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 40-A: 82% 16% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 41-A: 82% 13% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 42-A: 87% 9% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

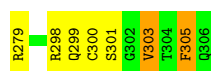
Chain 43-A: 85% 11% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

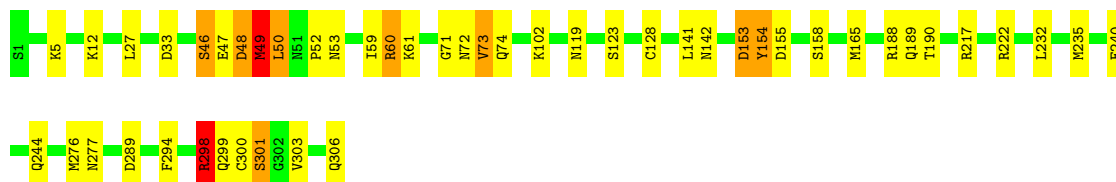
Chain 44-A: 86% 11% .





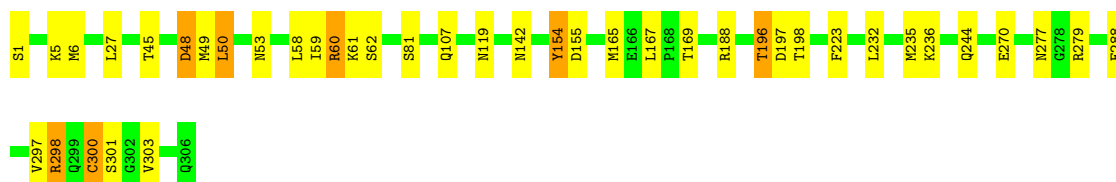
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 45-A: 84% 12% . .



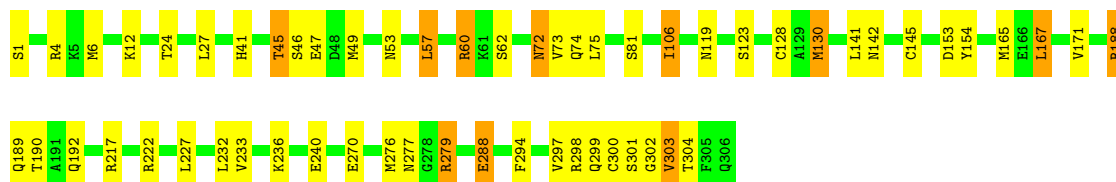
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 46-A: 87% 11% .



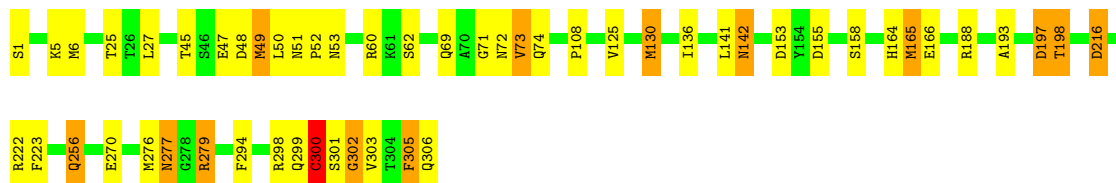
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 47-A: 81% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 48-A: 83% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 49-A: 84% 12% .





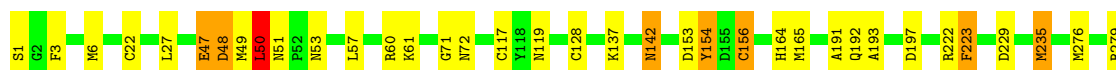
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 50-A: 82% 14% .



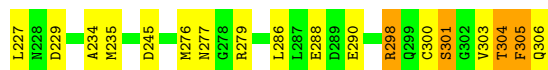
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 51-A: 86% 11% . .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 52-A: 83% 12% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 53-A: 82% 14% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 54-A: 86% 10% .



N277		F294		R298	Q299	C300	S301	G302	V303	T304	F305	Q306
------	--	------	--	------	------	------	------	------	------	------	------	------

4 Data and refinement statistics

EDS failed to run properly - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	113.71Å 53.32Å 44.57Å 90.00° 102.96° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	48.05 – 1.55	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.7 (48.05-1.55)	Depositor
R_{merge}	0.16	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.02 (at 1.55Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, R_{free}	0.166 , 0.227	Depositor
Wilson B-factor (Å ²)	15.2	Xtriage
Anisotropy	0.055	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	264643	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	17.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 10.27% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: DMS, ZN

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	1-A	0.82	6/2420 (0.2%)	0.94	6/3289 (0.2%)
1	2-A	0.73	2/2420 (0.1%)	0.92	9/3289 (0.3%)
1	3-A	0.70	1/2420 (0.0%)	0.91	6/3289 (0.2%)
1	4-A	0.78	2/2420 (0.1%)	0.92	6/3289 (0.2%)
1	5-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.91	3/3289 (0.1%)
1	6-A	0.75	2/2420 (0.1%)	0.91	4/3289 (0.1%)
1	7-A	0.78	3/2420 (0.1%)	0.89	3/3289 (0.1%)
1	8-A	0.78	2/2420 (0.1%)	0.91	3/3289 (0.1%)
1	9-A	0.78	1/2420 (0.0%)	0.96	6/3289 (0.2%)
1	10-A	0.70	0/2420	0.90	2/3289 (0.1%)
1	11-A	0.79	5/2420 (0.2%)	0.93	6/3289 (0.2%)
1	12-A	0.70	1/2420 (0.0%)	0.91	3/3289 (0.1%)
1	13-A	0.76	1/2420 (0.0%)	0.94	4/3289 (0.1%)
1	14-A	0.72	1/2420 (0.0%)	0.90	6/3289 (0.2%)
1	15-A	0.85	4/2420 (0.2%)	0.96	4/3289 (0.1%)
1	16-A	0.74	3/2420 (0.1%)	0.93	6/3289 (0.2%)
1	17-A	0.81	7/2420 (0.3%)	0.96	2/3289 (0.1%)
1	18-A	0.80	4/2420 (0.2%)	0.99	11/3289 (0.3%)
1	19-A	0.73	1/2420 (0.0%)	0.92	2/3289 (0.1%)
1	20-A	0.81	4/2420 (0.2%)	0.93	4/3289 (0.1%)
1	21-A	0.82	2/2420 (0.1%)	0.97	8/3289 (0.2%)
1	22-A	0.79	5/2420 (0.2%)	0.95	4/3289 (0.1%)
1	23-A	0.84	4/2420 (0.2%)	0.94	3/3289 (0.1%)
1	24-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.92	2/3289 (0.1%)
1	25-A	0.81	7/2420 (0.3%)	0.92	4/3289 (0.1%)
1	26-A	0.80	2/2420 (0.1%)	0.92	3/3289 (0.1%)
1	27-A	0.78	2/2420 (0.1%)	0.95	8/3289 (0.2%)
1	28-A	0.75	1/2420 (0.0%)	0.88	0/3289
1	29-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.94	2/3289 (0.1%)
1	30-A	0.72	0/2420	0.93	4/3289 (0.1%)
1	31-A	0.73	3/2420 (0.1%)	0.89	4/3289 (0.1%)
1	32-A	0.72	3/2420 (0.1%)	0.89	0/3289

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	33-A	0.78	3/2420 (0.1%)	0.93	8/3289 (0.2%)
1	34-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.92	3/3289 (0.1%)
1	35-A	0.75	3/2420 (0.1%)	0.97	7/3289 (0.2%)
1	36-A	0.77	4/2420 (0.2%)	0.95	5/3289 (0.2%)
1	37-A	0.75	1/2420 (0.0%)	0.92	4/3289 (0.1%)
1	38-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.90	5/3289 (0.2%)
1	39-A	0.89	8/2420 (0.3%)	0.91	3/3289 (0.1%)
1	40-A	0.96	4/2420 (0.2%)	0.94	3/3289 (0.1%)
1	41-A	0.76	6/2420 (0.2%)	0.93	6/3289 (0.2%)
1	42-A	0.76	5/2420 (0.2%)	0.91	7/3289 (0.2%)
1	43-A	0.74	3/2420 (0.1%)	0.90	4/3289 (0.1%)
1	44-A	0.70	0/2420	0.87	0/3289
1	45-A	0.71	1/2420 (0.0%)	0.90	5/3289 (0.2%)
1	46-A	0.74	2/2420 (0.1%)	0.91	3/3289 (0.1%)
1	47-A	0.84	6/2420 (0.2%)	0.95	7/3289 (0.2%)
1	48-A	0.73	1/2420 (0.0%)	0.89	5/3289 (0.2%)
1	49-A	0.72	1/2420 (0.0%)	0.90	4/3289 (0.1%)
1	50-A	0.79	4/2420 (0.2%)	0.90	1/3289 (0.0%)
1	51-A	0.77	6/2420 (0.2%)	0.93	6/3289 (0.2%)
1	52-A	0.78	6/2420 (0.2%)	0.95	11/3289 (0.3%)
1	53-A	0.86	5/2420 (0.2%)	0.90	2/3289 (0.1%)
1	54-A	0.78	5/2420 (0.2%)	0.93	4/3289 (0.1%)
All	All	0.77	169/130680 (0.1%)	0.92	241/177606 (0.1%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	1-A	0	9
1	2-A	0	4
1	3-A	0	6
1	4-A	0	4
1	5-A	0	2
1	6-A	0	5
1	7-A	0	6
1	8-A	0	9
1	9-A	0	7
1	10-A	0	7
1	11-A	0	6
1	12-A	0	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	13-A	0	13
1	14-A	0	12
1	15-A	0	6
1	16-A	0	10
1	17-A	0	9
1	18-A	0	12
1	19-A	0	13
1	20-A	0	9
1	21-A	0	10
1	22-A	0	7
1	23-A	0	8
1	24-A	0	8
1	25-A	0	10
1	26-A	0	12
1	27-A	0	8
1	28-A	0	6
1	29-A	0	6
1	30-A	0	8
1	31-A	0	10
1	32-A	0	5
1	33-A	0	13
1	34-A	0	11
1	35-A	0	14
1	36-A	0	8
1	37-A	0	7
1	38-A	0	5
1	39-A	0	10
1	40-A	0	7
1	41-A	0	6
1	42-A	0	7
1	43-A	0	7
1	44-A	0	4
1	45-A	0	7
1	46-A	0	8
1	47-A	0	6
1	48-A	0	8
1	49-A	0	10
1	50-A	0	9
1	51-A	0	7
1	52-A	0	6
1	53-A	0	8
1	54-A	0	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
All	All	0	434

All (169) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	40-A	145	CYS	CB-SG	27.83	2.29	1.82
1	53-A	128	CYS	CB-SG	-19.86	1.48	1.82
1	39-A	145	CYS	CB-SG	18.45	2.13	1.82
1	15-A	145	CYS	CB-SG	17.86	2.12	1.82
1	18-A	128	CYS	CB-SG	16.59	2.10	1.82
1	20-A	128	CYS	CB-SG	-14.55	1.57	1.82
1	47-A	128	CYS	CB-SG	-14.54	1.57	1.82
1	7-A	128	CYS	CB-SG	-13.73	1.58	1.82
1	23-A	300	CYS	CB-SG	-13.64	1.59	1.82
1	8-A	117	CYS	CB-SG	-13.35	1.59	1.82
1	21-A	145	CYS	CB-SG	12.38	2.03	1.82
1	38-A	128	CYS	CB-SG	-12.01	1.61	1.82
1	1-A	156	CYS	CB-SG	-11.24	1.63	1.82
1	23-A	156	CYS	CB-SG	-11.06	1.63	1.82
1	9-A	41	HIS	CA-C	-10.80	1.24	1.52
1	50-A	156	CYS	CB-SG	10.65	2.00	1.82
1	53-A	288	GLU	CB-CG	9.99	1.71	1.52
1	27-A	128	CYS	CB-SG	9.91	1.99	1.82
1	19-A	156	CYS	CB-SG	-9.84	1.65	1.82
1	50-A	300	CYS	CB-SG	9.64	1.98	1.82
1	24-A	117	CYS	CB-SG	9.57	1.98	1.82
1	33-A	145	CYS	CB-SG	9.55	1.98	1.82
1	47-A	288	GLU	CB-CG	9.54	1.70	1.52
1	52-A	156	CYS	CB-SG	9.29	1.98	1.82
1	15-A	117	CYS	CB-SG	9.23	1.98	1.82
1	43-A	156	CYS	CB-SG	9.18	1.97	1.82
1	47-A	145	CYS	CB-SG	9.05	1.97	1.82
1	25-A	44	CYS	CB-SG	-8.91	1.67	1.82
1	4-A	22	CYS	CB-SG	-8.84	1.67	1.82
1	41-A	145	CYS	CB-SG	-8.76	1.67	1.82
1	5-A	300	CYS	CB-SG	-8.69	1.67	1.82
1	26-A	128	CYS	CB-SG	8.60	1.96	1.82
1	1-A	294	PHE	CE1-CZ	8.49	1.53	1.37
1	31-A	156	CYS	CB-SG	-8.41	1.68	1.82
1	21-A	156	CYS	CB-SG	-8.28	1.68	1.82
1	1-A	165	MET	CB-CG	8.05	1.77	1.51
1	53-A	145	CYS	CB-SG	8.03	1.95	1.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	54-A	298	ARG	CB-CG	7.87	1.73	1.52
1	50-A	145	CYS	CB-SG	7.79	1.95	1.82
1	39-A	106	ILE	C-N	-7.78	1.16	1.34
1	45-A	300	CYS	CB-SG	7.70	1.95	1.82
1	20-A	106	ILE	C-N	-7.62	1.16	1.34
1	22-A	82	MET	CB-CG	7.55	1.75	1.51
1	36-A	275	GLY	N-CA	-7.40	1.34	1.46
1	40-A	106	ILE	C-N	-7.36	1.17	1.34
1	22-A	288	GLU	CB-CG	7.32	1.66	1.52
1	35-A	40	ARG	C-N	7.27	1.50	1.34
1	38-A	106	ILE	C-N	-7.10	1.17	1.34
1	33-A	128	CYS	CB-SG	-7.01	1.70	1.82
1	17-A	178	GLU	CG-CD	6.98	1.62	1.51
1	41-A	300	CYS	CB-SG	6.93	1.94	1.82
1	13-A	166	GLU	CG-CD	6.93	1.62	1.51
1	22-A	82	MET	CG-SD	6.93	1.99	1.81
1	40-A	55	GLU	CB-CG	6.89	1.65	1.52
1	51-A	235	MET	CB-CG	6.88	1.73	1.51
1	5-A	117	CYS	CB-SG	-6.85	1.70	1.82
1	7-A	156	CYS	CB-SG	6.78	1.93	1.82
1	6-A	128	CYS	CB-SG	6.75	1.93	1.82
1	31-A	106	ILE	C-N	-6.56	1.19	1.34
1	42-A	300	CYS	CB-SG	6.49	1.93	1.82
1	2-A	300	CYS	CB-SG	-6.47	1.71	1.82
1	36-A	178	GLU	CG-CD	6.45	1.61	1.51
1	41-A	290	GLU	CB-CG	-6.42	1.40	1.52
1	25-A	300	CYS	CB-SG	6.38	1.93	1.82
1	22-A	157	VAL	CB-CG1	6.37	1.66	1.52
1	25-A	290	GLU	CB-CG	6.33	1.64	1.52
1	52-A	178	GLU	CB-CG	6.30	1.64	1.52
1	52-A	178	GLU	CG-CD	6.29	1.61	1.51
1	27-A	106	ILE	C-N	-6.28	1.19	1.34
1	51-A	298	ARG	CB-CG	6.27	1.69	1.52
1	54-A	178	GLU	CB-CG	-6.19	1.40	1.52
1	46-A	270	GLU	CG-CD	6.14	1.61	1.51
1	16-A	128	CYS	CB-SG	-6.11	1.71	1.82
1	6-A	117	CYS	CB-SG	-6.10	1.71	1.82
1	38-A	288	GLU	CB-CG	6.09	1.63	1.52
1	42-A	128	CYS	CB-SG	-6.08	1.72	1.82
1	36-A	47	GLU	CB-CG	6.06	1.63	1.52
1	2-A	44	CYS	CB-SG	-6.05	1.72	1.82
1	25-A	290	GLU	CG-CD	6.05	1.61	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	52-A	288	GLU	CB-CG	6.03	1.63	1.52
1	18-A	106	ILE	C-N	-6.01	1.20	1.34
1	25-A	270	GLU	CB-CG	6.01	1.63	1.52
1	34-A	145	CYS	CB-SG	6.00	1.92	1.82
1	42-A	117	CYS	CA-CB	5.96	1.67	1.53
1	17-A	299	GLN	CG-CD	5.96	1.64	1.51
1	51-A	117	CYS	CB-SG	5.95	1.92	1.82
1	15-A	240	GLU	CG-CD	5.95	1.60	1.51
1	16-A	102	LYS	CB-CG	5.94	1.68	1.52
1	50-A	157	VAL	CB-CG1	5.93	1.65	1.52
1	11-A	166	GLU	CB-CG	5.93	1.63	1.52
1	26-A	110	GLN	CG-CD	5.92	1.64	1.51
1	12-A	117	CYS	CB-SG	-5.92	1.72	1.81
1	39-A	156	CYS	CB-SG	-5.92	1.72	1.81
1	11-A	300	CYS	CB-SG	-5.92	1.72	1.81
1	3-A	240	GLU	CB-CG	-5.90	1.41	1.52
1	17-A	299	GLN	CB-CG	5.88	1.68	1.52
1	22-A	145	CYS	CB-SG	5.87	1.92	1.82
1	42-A	117	CYS	CB-SG	5.85	1.92	1.82
1	51-A	235	MET	CG-SD	5.85	1.96	1.81
1	47-A	188	ARG	CB-CG	5.84	1.68	1.52
1	41-A	97	LYS	CB-CG	5.83	1.68	1.52
1	29-A	290	GLU	CG-CD	5.82	1.60	1.51
1	18-A	229	ASP	CB-CG	5.81	1.64	1.51
1	32-A	117	CYS	CB-SG	-5.77	1.72	1.81
1	20-A	110	GLN	CB-CG	-5.73	1.37	1.52
1	53-A	165	MET	CB-CG	5.73	1.69	1.51
1	23-A	270	GLU	CB-CG	5.72	1.63	1.52
1	36-A	44	CYS	CB-SG	5.72	1.92	1.82
1	17-A	60	ARG	CB-CG	5.69	1.68	1.52
1	49-A	117	CYS	CB-SG	-5.67	1.72	1.81
1	25-A	270	GLU	CG-CD	5.66	1.60	1.51
1	47-A	106	ILE	C-N	-5.66	1.21	1.34
1	25-A	270	GLU	CD-OE2	5.65	1.31	1.25
1	29-A	156	CYS	CB-SG	5.65	1.91	1.82
1	39-A	126	TYR	CE1-CZ	-5.64	1.31	1.38
1	51-A	223	PHE	CE1-CZ	5.62	1.48	1.37
1	31-A	300	CYS	CB-SG	5.59	1.91	1.82
1	32-A	188	ARG	CB-CG	5.58	1.67	1.52
1	17-A	178	GLU	CB-CG	5.58	1.62	1.52
1	18-A	270	GLU	CB-CG	5.56	1.62	1.52
1	15-A	240	GLU	CB-CG	5.55	1.62	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	1-A	294	PHE	CG-CD2	5.54	1.47	1.38
1	24-A	55	GLU	CB-CG	5.53	1.62	1.52
1	51-A	128	CYS	CB-SG	-5.53	1.72	1.81
1	53-A	156	CYS	CB-SG	-5.53	1.72	1.81
1	39-A	117	CYS	CB-SG	-5.50	1.72	1.81
1	32-A	145	CYS	CB-SG	-5.50	1.72	1.81
1	43-A	300	CYS	CB-SG	5.49	1.91	1.82
1	14-A	166	GLU	CB-CG	5.48	1.62	1.52
1	11-A	192	GLN	CB-CG	5.45	1.67	1.52
1	34-A	110	GLN	CB-CG	5.43	1.67	1.52
1	41-A	290	GLU	CG-CD	-5.43	1.43	1.51
1	43-A	4	ARG	CB-CG	5.41	1.67	1.52
1	33-A	276	MET	CB-CG	5.38	1.68	1.51
1	29-A	47	GLU	CB-CG	5.36	1.62	1.52
1	39-A	55	GLU	CB-CG	5.36	1.62	1.52
1	46-A	288	GLU	CG-CD	5.32	1.59	1.51
1	35-A	270	GLU	CG-CD	5.30	1.59	1.51
1	29-A	240	GLU	CG-CD	5.29	1.59	1.51
1	42-A	106	ILE	C-N	-5.28	1.22	1.34
1	1-A	300	CYS	CB-SG	5.27	1.91	1.82
1	17-A	60	ARG	CG-CD	5.26	1.65	1.51
1	52-A	106	ILE	C-N	-5.26	1.22	1.34
1	24-A	157	VAL	CB-CG1	5.25	1.63	1.52
1	52-A	55	GLU	CB-CG	5.25	1.62	1.52
1	23-A	270	GLU	CG-CD	5.24	1.59	1.51
1	24-A	106	ILE	C-N	-5.24	1.22	1.34
1	7-A	298	ARG	CG-CD	5.23	1.65	1.51
1	11-A	5	LYS	CE-NZ	5.21	1.62	1.49
1	28-A	128	CYS	CB-SG	-5.21	1.73	1.81
1	16-A	157	VAL	CB-CG1	5.20	1.63	1.52
1	4-A	48	ASP	CB-CG	-5.19	1.40	1.51
1	54-A	106	ILE	C-N	-5.19	1.22	1.34
1	40-A	156	CYS	CB-SG	5.18	1.91	1.82
1	54-A	270	GLU	CG-CD	5.18	1.59	1.51
1	17-A	47	GLU	CB-CG	-5.15	1.42	1.52
1	20-A	228	ASN	CB-CG	5.15	1.62	1.51
1	54-A	298	ARG	CG-CD	5.13	1.64	1.51
1	48-A	300	CYS	CB-SG	5.13	1.91	1.82
1	38-A	117	CYS	CB-SG	-5.13	1.73	1.81
1	11-A	74	GLN	CB-CG	5.12	1.66	1.52
1	41-A	117	CYS	CB-SG	-5.10	1.73	1.81
1	1-A	106	ILE	C-N	-5.08	1.22	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	39-A	5	LYS	CB-CG	5.08	1.66	1.52
1	8-A	41	HIS	CA-C	5.07	1.66	1.52
1	47-A	240	GLU	CB-CG	-5.07	1.42	1.52
1	35-A	106	ILE	C-N	-5.04	1.22	1.34
1	39-A	300	CYS	CB-SG	-5.03	1.73	1.81
1	37-A	117	CYS	CB-SG	-5.02	1.73	1.81

All (241) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	19-A	156	CYS	CA-CB-SG	-15.62	85.88	114.00
1	40-A	145	CYS	CA-CB-SG	14.02	139.24	114.00
1	23-A	156	CYS	CA-CB-SG	-13.82	89.12	114.00
1	35-A	41	HIS	N-CA-CB	13.06	134.12	110.60
1	15-A	145	CYS	CA-CB-SG	10.60	133.07	114.00
1	25-A	145	CYS	CA-CB-SG	10.08	132.15	114.00
1	47-A	130	MET	CG-SD-CE	-9.47	85.05	100.20
1	33-A	145	CYS	CA-CB-SG	9.38	130.88	114.00
1	35-A	40	ARG	C-N-CA	-9.33	98.38	121.70
1	27-A	167	LEU	CA-CB-CG	9.01	136.03	115.30
1	22-A	156	CYS	CA-CB-SG	-9.00	97.80	114.00
1	38-A	165	MET	CG-SD-CE	8.89	114.43	100.20
1	33-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-8.75	110.43	118.30
1	9-A	41	HIS	CA-C-N	-8.69	98.08	117.20
1	33-A	197	ASP	CB-CG-OD1	8.65	126.09	118.30
1	39-A	145	CYS	CA-CB-SG	8.63	129.53	114.00
1	1-A	82	MET	CG-SD-CE	8.60	113.96	100.20
1	52-A	117	CYS	CA-CB-SG	-8.50	98.70	114.00
1	4-A	50	LEU	CA-CB-CG	8.22	134.22	115.30
1	34-A	56	ASP	CB-CG-OD1	8.11	125.60	118.30
1	35-A	41	HIS	CA-CB-CG	8.07	127.32	113.60
1	14-A	167	LEU	CB-CG-CD1	-8.03	97.35	111.00
1	3-A	235	MET	CG-SD-CE	7.97	112.96	100.20
1	9-A	33	ASP	CB-CG-OD2	-7.94	111.15	118.30
1	23-A	276	MET	CG-SD-CE	7.79	112.67	100.20
1	43-A	49	MET	CA-CB-CG	7.78	126.53	113.30
1	18-A	229	ASP	CB-CG-OD1	7.69	125.22	118.30
1	36-A	287	LEU	CB-CG-CD1	7.55	123.84	111.00
1	49-A	153	ASP	CB-CG-OD1	7.54	125.08	118.30
1	9-A	302	GLY	N-CA-C	7.44	131.71	113.10
1	22-A	82	MET	CB-CG-SD	7.37	134.50	112.40
1	52-A	50	LEU	CA-CB-CG	7.35	132.20	115.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	45-A	300	CYS	CA-CB-SG	7.31	127.16	114.00
1	13-A	44	CYS	CA-CB-SG	-7.18	101.08	114.00
1	51-A	156	CYS	CA-CB-SG	7.13	126.84	114.00
1	1-A	165	MET	CB-CG-SD	7.06	133.59	112.40
1	51-A	235	MET	CB-CG-SD	7.04	133.52	112.40
1	52-A	197	ASP	CB-CG-OD2	7.00	124.60	118.30
1	48-A	6	MET	CG-SD-CE	6.93	111.29	100.20
1	42-A	154	TYR	CB-CG-CD2	6.93	125.16	121.00
1	34-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.92	131.22	115.30
1	3-A	58	LEU	CA-CB-CG	6.91	131.18	115.30
1	38-A	286	LEU	CA-CB-CG	6.89	131.15	115.30
1	2-A	287	LEU	CB-CG-CD2	6.88	122.69	111.00
1	18-A	50	LEU	CA-CB-CG	-6.87	99.51	115.30
1	52-A	49	MET	CB-CG-SD	6.85	132.94	112.40
1	17-A	51	ASN	C-N-CD	-6.80	105.64	120.60
1	34-A	56	ASP	CB-CG-OD2	-6.77	112.21	118.30
1	40-A	82	MET	CG-SD-CE	6.76	111.01	100.20
1	18-A	305	PHE	CB-CG-CD2	-6.69	116.12	120.80
1	53-A	6	MET	CB-CG-SD	-6.67	92.40	112.40
1	38-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.63	130.55	115.30
1	11-A	49	MET	CB-CG-SD	-6.62	92.54	112.40
1	13-A	141	LEU	CA-CB-CG	6.61	130.50	115.30
1	30-A	264	MET	CG-SD-CE	6.59	110.75	100.20
1	30-A	141	LEU	CA-CB-CG	-6.59	100.14	115.30
1	9-A	41	HIS	O-C-N	6.57	133.21	122.70
1	20-A	128	CYS	CA-CB-SG	-6.55	102.21	114.00
1	47-A	188	ARG	CG-CD-NE	6.53	125.52	111.80
1	33-A	75	LEU	CB-CG-CD1	-6.51	99.93	111.00
1	2-A	82	MET	CG-SD-CE	6.47	110.56	100.20
1	23-A	82	MET	CA-CB-CG	6.47	124.30	113.30
1	54-A	298	ARG	CA-CB-CG	6.46	127.62	113.40
1	15-A	167	LEU	CA-CB-CG	6.45	130.13	115.30
1	27-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.43	130.10	115.30
1	27-A	167	LEU	CB-CG-CD1	6.43	121.93	111.00
1	7-A	302	GLY	N-CA-C	6.38	129.05	113.10
1	14-A	229	ASP	CB-CG-OD1	-6.38	112.56	118.30
1	25-A	300	CYS	CA-CB-SG	6.35	125.43	114.00
1	42-A	276	MET	CG-SD-CE	6.31	110.30	100.20
1	18-A	6	MET	CG-SD-CE	6.30	110.29	100.20
1	4-A	58	LEU	CB-CG-CD1	-6.29	100.30	111.00
1	51-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.29	129.76	115.30
1	35-A	106	ILE	C-N-CA	6.26	137.34	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	27-A	287	LEU	CB-CG-CD1	6.25	121.62	111.00
1	9-A	156	CYS	CA-CB-SG	-6.25	102.76	114.00
1	8-A	82	MET	CA-CB-CG	6.24	123.90	113.30
1	36-A	276	MET	CA-CB-CG	6.24	123.90	113.30
1	49-A	294	PHE	CB-CG-CD2	6.24	125.17	120.80
1	30-A	6	MET	CB-CG-SD	-6.21	93.77	112.40
1	39-A	153	ASP	CB-CG-OD2	-6.19	112.73	118.30
1	36-A	216	ASP	CB-CG-OD1	-6.17	112.74	118.30
1	18-A	155	ASP	CB-CG-OD2	-6.17	112.75	118.30
1	52-A	49	MET	CA-CB-CG	6.17	123.79	113.30
1	22-A	276	MET	CA-CB-CG	6.15	123.75	113.30
1	37-A	287	LEU	CB-CG-CD1	6.13	121.42	111.00
1	3-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.12	129.39	115.30
1	35-A	276	MET	CG-SD-CE	-6.12	90.41	100.20
1	46-A	49	MET	CB-CG-SD	6.09	130.68	112.40
1	31-A	275	GLY	N-CA-C	6.08	128.31	113.10
1	52-A	276	MET	CA-CB-CG	6.08	123.64	113.30
1	20-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.07	129.26	115.30
1	21-A	82	MET	CB-CG-SD	6.04	130.51	112.40
1	36-A	106	ILE	C-N-CA	6.04	136.79	121.70
1	12-A	154	TYR	CA-CB-CG	6.02	124.84	113.40
1	25-A	165	MET	CG-SD-CE	6.00	109.81	100.20
1	2-A	58	LEU	CB-CG-CD2	-6.00	100.80	111.00
1	35-A	73	VAL	CG1-CB-CG2	-5.99	101.32	110.90
1	18-A	167	LEU	CA-CB-CG	5.97	129.04	115.30
1	49-A	245	ASP	CB-CG-OD2	5.96	123.66	118.30
1	22-A	165	MET	CB-CG-SD	5.93	130.18	112.40
1	9-A	33	ASP	CB-CG-OD1	5.87	123.58	118.30
1	12-A	128	CYS	CA-CB-SG	5.87	124.56	114.00
1	2-A	235	MET	CG-SD-CE	5.87	109.58	100.20
1	17-A	165	MET	CB-CG-SD	-5.86	94.82	112.40
1	10-A	128	CYS	CA-CB-SG	-5.84	103.49	114.00
1	40-A	165	MET	CB-CG-SD	5.82	129.85	112.40
1	42-A	117	CYS	CA-CB-SG	5.81	124.46	114.00
1	24-A	287	LEU	CB-CG-CD2	5.79	120.85	111.00
1	6-A	153	ASP	CB-CG-OD2	5.79	123.51	118.30
1	16-A	276	MET	CG-SD-CE	5.79	109.47	100.20
1	4-A	217	ARG	NE-CZ-NH2	-5.79	117.41	120.30
1	52-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.78	123.50	118.30
1	11-A	6	MET	CB-CG-SD	-5.77	95.08	112.40
1	2-A	155	ASP	CB-CG-OD1	5.75	123.47	118.30
1	20-A	217	ARG	NE-CZ-NH1	5.74	123.17	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	54-A	298	ARG	CB-CG-CD	5.73	126.49	111.60
1	8-A	235	MET	CG-SD-CE	5.72	109.35	100.20
1	5-A	155	ASP	CB-CG-OD2	5.71	123.44	118.30
1	48-A	197	ASP	CB-CA-C	5.69	121.78	110.40
1	4-A	6	MET	CB-CG-SD	-5.69	95.33	112.40
1	21-A	276	MET	CG-SD-CE	-5.66	91.14	100.20
1	37-A	48	ASP	CB-CG-OD1	5.66	123.39	118.30
1	33-A	276	MET	CA-CB-CG	5.66	122.91	113.30
1	46-A	298	ARG	NE-CZ-NH1	5.65	123.12	120.30
1	52-A	153	ASP	CB-CG-OD2	-5.65	113.22	118.30
1	15-A	167	LEU	CB-CG-CD1	5.64	120.59	111.00
1	11-A	153	ASP	CB-CG-OD1	-5.64	113.23	118.30
1	33-A	276	MET	CB-CG-SD	5.61	129.24	112.40
1	3-A	154	TYR	N-CA-C	5.61	126.14	111.00
1	14-A	49	MET	CA-CB-CG	5.60	122.82	113.30
1	21-A	45	THR	CA-CB-CG2	-5.60	104.56	112.40
1	45-A	298	ARG	NE-CZ-NH1	5.60	123.10	120.30
1	21-A	155	ASP	CB-CG-OD2	5.59	123.33	118.30
1	53-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.59	123.33	118.30
1	6-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-5.59	113.27	118.30
1	41-A	276	MET	CG-SD-CE	5.59	109.14	100.20
1	42-A	154	TYR	CB-CG-CD1	-5.59	117.65	121.00
1	1-A	33	ASP	CB-CG-OD1	5.59	123.33	118.30
1	36-A	22	CYS	CA-CB-SG	-5.58	103.96	114.00
1	35-A	276	MET	CA-CB-CG	5.57	122.76	113.30
1	26-A	276	MET	CG-SD-CE	5.56	109.10	100.20
1	6-A	153	ASP	CB-CG-OD1	-5.56	113.29	118.30
1	3-A	50	LEU	CB-CG-CD2	5.56	120.45	111.00
1	41-A	300	CYS	CA-CB-SG	5.55	123.99	114.00
1	20-A	287	LEU	CB-CG-CD1	5.55	120.43	111.00
1	45-A	50	LEU	CA-CB-CG	5.54	128.04	115.30
1	48-A	130	MET	CG-SD-CE	-5.54	91.34	100.20
1	14-A	49	MET	CG-SD-CE	5.53	109.04	100.20
1	45-A	49	MET	CG-SD-CE	5.52	109.03	100.20
1	2-A	287	LEU	CB-CG-CD1	-5.52	101.62	111.00
1	18-A	130	MET	CA-CB-CG	5.51	122.66	113.30
1	42-A	17	MET	CG-SD-CE	5.51	109.01	100.20
1	25-A	276	MET	CA-CB-CG	5.50	122.64	113.30
1	5-A	82	MET	CB-CG-SD	5.49	128.86	112.40
1	16-A	58	LEU	CA-CB-CG	5.48	127.91	115.30
1	18-A	50	LEU	C-N-CA	5.48	135.39	121.70
1	13-A	49	MET	CG-SD-CE	5.47	108.96	100.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	27-A	127	GLN	CA-CB-CG	5.46	125.42	113.40
1	18-A	305	PHE	CB-CG-CD1	5.46	124.62	120.80
1	27-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-5.45	113.39	118.30
1	54-A	294	PHE	CB-CG-CD2	5.45	124.62	120.80
1	6-A	50	LEU	CA-CB-CG	5.45	127.83	115.30
1	47-A	128	CYS	CB-CA-C	-5.44	99.52	110.40
1	21-A	106	ILE	C-N-CA	5.43	135.27	121.70
1	39-A	6	MET	CB-CG-SD	-5.43	96.11	112.40
1	43-A	279	ARG	CG-CD-NE	-5.42	100.42	111.80
1	18-A	128	CYS	CB-CA-C	5.42	121.23	110.40
1	33-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.40	123.16	118.30
1	41-A	240	GLU	CA-CB-CG	5.40	125.28	113.40
1	27-A	106	ILE	C-N-CA	-5.40	108.21	121.70
1	49-A	153	ASP	CB-CG-OD2	-5.40	113.44	118.30
1	29-A	49	MET	CG-SD-CE	5.39	108.83	100.20
1	31-A	156	CYS	CA-CB-SG	-5.39	104.30	114.00
1	5-A	295	ASP	CB-CG-OD2	-5.38	113.45	118.30
1	12-A	154	TYR	CB-CA-C	5.37	121.14	110.40
1	16-A	48	ASP	CB-CG-OD1	5.36	123.13	118.30
1	51-A	197	ASP	CB-CG-OD1	-5.36	113.47	118.30
1	47-A	141	LEU	CA-CB-CG	-5.36	102.97	115.30
1	1-A	165	MET	CA-CB-CG	5.34	122.38	113.30
1	30-A	6	MET	CG-SD-CE	-5.33	91.67	100.20
1	27-A	153	ASP	CB-CG-OD2	5.33	123.10	118.30
1	51-A	22	CYS	CA-CB-SG	-5.33	104.40	114.00
1	52-A	145	CYS	CA-CB-SG	5.33	123.60	114.00
1	21-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.33	123.10	118.30
1	42-A	154	TYR	CA-CB-CG	5.33	123.52	113.40
1	1-A	49	MET	CG-SD-CE	5.32	108.71	100.20
1	1-A	155	ASP	CB-CG-OD2	5.32	123.08	118.30
1	3-A	82	MET	CB-CG-SD	5.32	128.35	112.40
1	54-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.31	123.08	118.30
1	11-A	71	GLY	N-CA-C	-5.27	99.93	113.10
1	50-A	44	CYS	CA-CB-SG	-5.26	104.52	114.00
1	19-A	128	CYS	CA-CB-SG	-5.26	104.53	114.00
1	21-A	156	CYS	CA-CB-SG	-5.26	104.53	114.00
1	2-A	58	LEU	CD1-CG-CD2	5.25	126.26	110.50
1	43-A	6	MET	CB-CG-SD	-5.25	96.64	112.40
1	41-A	49	MET	CG-SD-CE	5.25	108.60	100.20
1	14-A	106	ILE	C-N-CA	5.24	134.81	121.70
1	37-A	232	LEU	CA-CB-CG	-5.24	103.25	115.30
1	38-A	75	LEU	CB-CG-CD2	5.24	119.91	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	14-A	229	ASP	CB-CG-OD2	5.23	123.01	118.30
1	48-A	197	ASP	CB-CG-OD1	-5.23	113.60	118.30
1	47-A	236	LYS	CB-CG-CD	-5.21	98.06	111.60
1	8-A	51	ASN	N-CA-C	-5.21	96.95	111.00
1	42-A	298	ARG	CA-CB-CG	5.18	124.80	113.40
1	47-A	236	LYS	CD-CE-NZ	-5.18	99.79	111.70
1	26-A	227	LEU	CA-CB-CG	-5.17	103.40	115.30
1	46-A	58	LEU	CA-CB-CG	5.17	127.18	115.30
1	18-A	155	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.95	118.30
1	26-A	127	GLN	CA-CB-CG	5.16	124.76	113.40
1	45-A	153	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.94	118.30
1	29-A	153	ASP	CB-CG-OD2	5.16	122.94	118.30
1	2-A	167	LEU	CB-CG-CD1	5.15	119.76	111.00
1	2-A	165	MET	CG-SD-CE	5.15	108.44	100.20
1	7-A	295	ASP	CB-CG-OD2	-5.15	113.67	118.30
1	31-A	302	GLY	N-CA-C	-5.14	100.25	113.10
1	4-A	48	ASP	CB-CG-OD1	-5.13	113.68	118.30
1	48-A	197	ASP	CB-CG-OD2	5.13	122.91	118.30
1	43-A	153	ASP	CB-CG-OD1	5.12	122.91	118.30
1	38-A	197	ASP	CB-CG-OD2	5.12	122.91	118.30
1	24-A	153	ASP	CB-CG-OD1	5.11	122.90	118.30
1	15-A	276	MET	CA-CB-CG	5.10	121.97	113.30
1	41-A	276	MET	CB-CG-SD	5.10	127.69	112.40
1	33-A	57	LEU	CA-CB-CG	5.09	127.01	115.30
1	47-A	57	LEU	CA-CB-CG	5.09	127.00	115.30
1	16-A	50	LEU	CA-CB-CG	5.08	126.99	115.30
1	16-A	187	ASP	CB-CG-OD2	-5.08	113.72	118.30
1	13-A	286	LEU	CB-CG-CD1	5.08	119.63	111.00
1	11-A	276	MET	CB-CG-SD	5.07	127.61	112.40
1	4-A	58	LEU	CA-CB-CG	5.06	126.93	115.30
1	11-A	145	CYS	CA-CB-SG	-5.05	104.91	114.00
1	51-A	50	LEU	CB-CG-CD1	5.05	119.58	111.00
1	16-A	154	TYR	CB-CG-CD1	-5.04	117.97	121.00
1	21-A	50	LEU	CB-CG-CD1	-5.03	102.45	111.00
1	37-A	49	MET	CB-CG-SD	5.03	127.48	112.40
1	7-A	295	ASP	CB-CG-OD1	5.02	122.82	118.30
1	10-A	50	LEU	CB-CG-CD2	5.02	119.54	111.00
1	41-A	249	ILE	CG1-CB-CG2	5.02	122.44	111.40
1	31-A	106	ILE	C-N-CA	-5.02	109.15	121.70
1	52-A	57	LEU	CB-CG-CD1	5.02	119.53	111.00
1	52-A	197	ASP	CB-CG-OD1	-5.01	113.79	118.30

There are no chirality outliers.

All (434) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	279	ARG	Sidechain
1	1-A	299	GLN	Peptide
1	1-A	300	CYS	Peptide
1	1-A	303	VAL	Peptide
1	1-A	48	ASP	Peptide
1	1-A	49	MET	Peptide
1	1-A	69	GLN	Peptide
1	1-A	70	ALA	Peptide
1	1-A	72	ASN	Peptide
1	10-A	222	ARG	Sidechain
1	10-A	299	GLN	Peptide
1	10-A	300	CYS	Peptide
1	10-A	302	GLY	Peptide
1	10-A	303	VAL	Peptide
1	10-A	44	CYS	Peptide
1	10-A	51	ASN	Peptide
1	11-A	191	ALA	Peptide
1	11-A	193	ALA	Peptide
1	11-A	298	ARG	Sidechain
1	11-A	301	SER	Peptide
1	11-A	47	GLU	Peptide
1	11-A	72	ASN	Peptide
1	12-A	188	ARG	Sidechain
1	12-A	24	THR	Peptide
1	12-A	25	THR	Peptide
1	12-A	299	GLN	Peptide
1	12-A	300	CYS	Peptide
1	12-A	302	GLY	Peptide
1	12-A	44	CYS	Peptide
1	12-A	46	SER	Peptide
1	12-A	71	GLY	Peptide
1	13-A	217	ARG	Sidechain
1	13-A	275	GLY	Peptide
1	13-A	276	MET	Peptide
1	13-A	299	GLN	Peptide
1	13-A	301	SER	Peptide
1	13-A	46	SER	Peptide
1	13-A	47	GLU	Peptide
1	13-A	48	ASP	Peptide
1	13-A	50	LEU	Peptide
1	13-A	69	GLN	Peptide
1	13-A	70	ALA	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	13-A	71	GLY	Peptide
1	13-A	72	ASN	Peptide
1	14-A	154	TYR	Peptide
1	14-A	190	THR	Peptide
1	14-A	192	GLN	Peptide
1	14-A	195	GLY	Peptide
1	14-A	275	GLY	Peptide
1	14-A	278	GLY	Peptide
1	14-A	298	ARG	Peptide
1	14-A	301	SER	Peptide
1	14-A	304	THR	Peptide
1	14-A	50	LEU	Peptide
1	14-A	71	GLY	Peptide
1	14-A	72	ASN	Peptide
1	15-A	274	ASN	Peptide
1	15-A	276	MET	Peptide
1	15-A	278	GLY	Peptide
1	15-A	298	ARG	Peptide
1	15-A	299	GLN	Peptide
1	15-A	303	VAL	Peptide
1	16-A	154	TYR	Peptide
1	16-A	273	GLN	Peptide
1	16-A	276	MET	Peptide
1	16-A	299	GLN	Peptide
1	16-A	302	GLY	Peptide
1	16-A	304	THR	Peptide
1	16-A	4	ARG	Sidechain
1	16-A	44	CYS	Peptide
1	16-A	51	ASN	Peptide
1	16-A	73	VAL	Peptide
1	17-A	154	TYR	Peptide
1	17-A	167	LEU	Peptide
1	17-A	189	GLN	Peptide
1	17-A	193	ALA	Peptide
1	17-A	23	GLY	Peptide
1	17-A	305	PHE	Peptide
1	17-A	48	ASP	Peptide
1	17-A	50	LEU	Peptide
1	17-A	72	ASN	Peptide
1	18-A	151	ASN	Peptide
1	18-A	153	ASP	Peptide
1	18-A	155	ASP	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	18-A	167	LEU	Peptide
1	18-A	170	GLY	Peptide
1	18-A	189	GLN	Peptide
1	18-A	217	ARG	Sidechain
1	18-A	274	ASN	Peptide
1	18-A	276	MET	Peptide
1	18-A	302	GLY	Peptide
1	18-A	48	ASP	Peptide
1	18-A	51	ASN	Peptide
1	19-A	155	ASP	Peptide
1	19-A	167	LEU	Peptide
1	19-A	169	THR	Peptide
1	19-A	193	ALA	Peptide
1	19-A	25	THR	Peptide
1	19-A	273	GLN	Peptide
1	19-A	298	ARG	Peptide
1	19-A	302	GLY	Peptide
1	19-A	305	PHE	Peptide
1	19-A	45	THR	Peptide
1	19-A	46	SER	Peptide
1	19-A	51	ASN	Peptide
1	19-A	72	ASN	Peptide
1	2-A	153	ASP	Peptide
1	2-A	298	ARG	Peptide
1	2-A	304	THR	Peptide
1	2-A	47	GLU	Peptide
1	20-A	152	ILE	Peptide
1	20-A	154	TYR	Peptide
1	20-A	156	CYS	Peptide
1	20-A	193	ALA	Peptide
1	20-A	195	GLY	Peptide
1	20-A	222	ARG	Sidechain
1	20-A	298	ARG	Peptide
1	20-A	301	SER	Peptide
1	20-A	4	ARG	Sidechain
1	21-A	141	LEU	Peptide
1	21-A	154	TYR	Peptide
1	21-A	168	PRO	Peptide
1	21-A	170	GLY	Peptide
1	21-A	217	ARG	Sidechain
1	21-A	23	GLY	Peptide
1	21-A	274	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	21-A	276	MET	Peptide
1	21-A	46	SER	Peptide
1	21-A	5	LYS	Peptide
1	22-A	141	LEU	Peptide
1	22-A	143	GLY	Peptide
1	22-A	151	ASN	Peptide
1	22-A	276	MET	Peptide
1	22-A	303	VAL	Peptide
1	22-A	41	HIS	Peptide
1	22-A	51	ASN	Peptide
1	23-A	142	ASN	Peptide
1	23-A	151	ASN	Peptide
1	23-A	156	CYS	Peptide
1	23-A	24	THR	Peptide
1	23-A	275	GLY	Peptide
1	23-A	276	MET	Peptide
1	23-A	46	SER	Peptide
1	23-A	47	GLU	Peptide
1	24-A	151	ASN	Peptide
1	24-A	192	GLN	Peptide
1	24-A	24	THR	Peptide
1	24-A	275	GLY	Peptide
1	24-A	299	GLN	Peptide
1	24-A	304	THR	Peptide
1	24-A	47	GLU	Peptide
1	24-A	49	MET	Peptide
1	25-A	127	GLN	Peptide
1	25-A	152	ILE	Peptide
1	25-A	155	ASP	Mainchain,Peptide
1	25-A	275	GLY	Peptide
1	25-A	298	ARG	Peptide,Sidechain
1	25-A	299	GLN	Peptide
1	25-A	303	VAL	Peptide
1	25-A	73	VAL	Peptide
1	26-A	139	SER	Peptide
1	26-A	154	TYR	Peptide
1	26-A	155	ASP	Peptide
1	26-A	193	ALA	Peptide
1	26-A	275	GLY	Peptide
1	26-A	299	GLN	Peptide
1	26-A	300	CYS	Peptide
1	26-A	301	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	26-A	304	THR	Peptide
1	26-A	46	SER	Peptide
1	26-A	50	LEU	Peptide
1	26-A	72	ASN	Peptide
1	27-A	128	CYS	Peptide
1	27-A	152	ILE	Mainchain
1	27-A	154	TYR	Peptide
1	27-A	192	GLN	Peptide
1	27-A	193	ALA	Peptide
1	27-A	290	GLU	Peptide
1	27-A	300	CYS	Peptide
1	27-A	46	SER	Peptide
1	28-A	154	TYR	Peptide
1	28-A	275	GLY	Peptide
1	28-A	299	GLN	Peptide
1	28-A	304	THR	Peptide
1	28-A	46	SER	Peptide
1	28-A	48	ASP	Peptide
1	29-A	127	GLN	Peptide
1	29-A	275	GLY	Peptide
1	29-A	300	CYS	Peptide
1	29-A	302	GLY	Peptide
1	29-A	303	VAL	Peptide
1	29-A	49	MET	Peptide
1	3-A	153	ASP	Peptide
1	3-A	217	ARG	Sidechain
1	3-A	299	GLN	Peptide
1	3-A	303	VAL	Peptide
1	3-A	4	ARG	Sidechain
1	3-A	51	ASN	Peptide
1	30-A	153	ASP	Peptide
1	30-A	154	TYR	Peptide
1	30-A	155	ASP	Peptide
1	30-A	25	THR	Peptide
1	30-A	276	MET	Peptide
1	30-A	300	CYS	Peptide
1	30-A	45	THR	Peptide
1	30-A	47	GLU	Peptide
1	31-A	118	TYR	Peptide
1	31-A	188	ARG	Sidechain
1	31-A	193	ALA	Peptide
1	31-A	25	THR	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	31-A	274	ASN	Peptide
1	31-A	276	MET	Peptide
1	31-A	301	SER	Peptide
1	31-A	46	SER	Peptide
1	31-A	49	MET	Peptide
1	31-A	51	ASN	Peptide
1	32-A	191	ALA	Peptide
1	32-A	276	MET	Peptide
1	32-A	48	ASP	Peptide
1	32-A	49	MET	Peptide
1	32-A	51	ASN	Peptide
1	33-A	1	SER	Peptide
1	33-A	153	ASP	Peptide
1	33-A	155	ASP	Peptide
1	33-A	193	ALA	Peptide
1	33-A	217	ARG	Sidechain
1	33-A	275	GLY	Peptide
1	33-A	301	SER	Peptide
1	33-A	47	GLU	Peptide
1	33-A	48	ASP	Peptide
1	33-A	49	MET	Peptide
1	33-A	50	LEU	Peptide
1	33-A	51	ASN	Peptide
1	33-A	70	ALA	Peptide
1	34-A	1	SER	Peptide
1	34-A	168	PRO	Peptide
1	34-A	191	ALA	Peptide
1	34-A	193	ALA	Peptide
1	34-A	298	ARG	Peptide,Sidechain
1	34-A	304	THR	Peptide
1	34-A	46	SER	Peptide
1	34-A	48	ASP	Peptide
1	34-A	49	MET	Peptide
1	34-A	51	ASN	Peptide
1	35-A	196	THR	Peptide
1	35-A	273	GLN	Peptide
1	35-A	276	MET	Peptide
1	35-A	298	ARG	Sidechain
1	35-A	300	CYS	Peptide
1	35-A	301	SER	Peptide
1	35-A	302	GLY	Peptide
1	35-A	41	HIS	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	35-A	44	CYS	Peptide
1	35-A	46	SER	Peptide
1	35-A	48	ASP	Peptide
1	35-A	60	ARG	Sidechain
1	35-A	71	GLY	Peptide
1	35-A	72	ASN	Peptide
1	36-A	139	SER	Peptide
1	36-A	153	ASP	Peptide
1	36-A	170	GLY	Peptide
1	36-A	196	THR	Peptide
1	36-A	275	GLY	Peptide
1	36-A	278	GLY	Peptide
1	36-A	299	GLN	Peptide
1	36-A	48	ASP	Peptide
1	37-A	197	ASP	Peptide
1	37-A	276	MET	Peptide
1	37-A	278	GLY	Peptide
1	37-A	298	ARG	Peptide
1	37-A	302	GLY	Peptide
1	37-A	44	CYS	Peptide
1	37-A	71	GLY	Peptide
1	38-A	155	ASP	Peptide
1	38-A	275	GLY	Peptide
1	38-A	276	MET	Peptide
1	38-A	47	GLU	Peptide
1	38-A	50	LEU	Peptide
1	39-A	170	GLY	Peptide
1	39-A	195	GLY	Peptide
1	39-A	276	MET	Peptide
1	39-A	297	VAL	Peptide
1	39-A	298	ARG	Peptide
1	39-A	301	SER	Peptide
1	39-A	48	ASP	Peptide
1	39-A	69	GLN	Peptide
1	39-A	70	ALA	Peptide
1	39-A	72	ASN	Peptide
1	4-A	153	ASP	Peptide
1	4-A	302	GLY	Peptide
1	4-A	47	GLU	Peptide
1	4-A	51	ASN	Peptide
1	40-A	193	ALA	Peptide
1	40-A	217	ARG	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	40-A	275	GLY	Peptide
1	40-A	276	MET	Peptide
1	40-A	277	ASN	Peptide
1	40-A	302	GLY	Peptide
1	40-A	73	VAL	Peptide
1	41-A	154	TYR	Peptide
1	41-A	156	CYS	Peptide
1	41-A	164	HIS	Peptide
1	41-A	279	ARG	Peptide
1	41-A	300	CYS	Peptide
1	41-A	72	ASN	Peptide
1	42-A	152	ILE	Peptide
1	42-A	154	TYR	Peptide
1	42-A	276	MET	Peptide
1	42-A	279	ARG	Sidechain
1	42-A	303	VAL	Peptide
1	42-A	304	THR	Peptide
1	42-A	47	GLU	Peptide
1	43-A	152	ILE	Peptide
1	43-A	153	ASP	Peptide
1	43-A	279	ARG	Sidechain
1	43-A	297	VAL	Peptide
1	43-A	4	ARG	Sidechain
1	43-A	71	GLY	Peptide
1	43-A	72	ASN	Peptide
1	44-A	305	PHE	Peptide
1	44-A	4	ARG	Sidechain
1	44-A	47	GLU	Peptide
1	44-A	50	LEU	Peptide
1	45-A	188	ARG	Sidechain
1	45-A	217	ARG	Sidechain
1	45-A	46	SER	Peptide
1	45-A	48	ASP	Peptide
1	45-A	49	MET	Peptide
1	45-A	50	LEU	Peptide
1	45-A	52	PRO	Peptide
1	46-A	196	THR	Peptide
1	46-A	279	ARG	Sidechain
1	46-A	298	ARG	Peptide
1	46-A	300	CYS	Peptide
1	46-A	45	THR	Peptide
1	46-A	48	ASP	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	46-A	59	ILE	Peptide
1	46-A	60	ARG	Sidechain
1	47-A	153	ASP	Peptide
1	47-A	171	VAL	Peptide
1	47-A	189	GLN	Peptide
1	47-A	279	ARG	Sidechain
1	47-A	302	GLY	Peptide
1	47-A	60	ARG	Sidechain
1	48-A	1	SER	Peptide
1	48-A	164	HIS	Peptide
1	48-A	193	ALA	Peptide
1	48-A	216	ASP	Peptide
1	48-A	279	ARG	Sidechain
1	48-A	299	GLN	Peptide
1	48-A	302	GLY	Peptide
1	48-A	45	THR	Peptide
1	49-A	141	LEU	Peptide
1	49-A	142	ASN	Peptide
1	49-A	164	HIS	Peptide
1	49-A	165	MET	Peptide
1	49-A	217	ARG	Sidechain
1	49-A	222	ARG	Sidechain
1	49-A	275	GLY	Peptide
1	49-A	277	ASN	Peptide
1	49-A	278	GLY	Peptide
1	49-A	45	THR	Peptide
1	5-A	46	SER	Peptide
1	5-A	72	ASN	Peptide
1	50-A	1	SER	Peptide
1	50-A	142	ASN	Peptide
1	50-A	164	HIS	Peptide
1	50-A	193	ALA	Peptide
1	50-A	222	ARG	Sidechain
1	50-A	23	GLY	Peptide
1	50-A	299	GLN	Peptide
1	50-A	4	ARG	Sidechain
1	50-A	50	LEU	Peptide
1	51-A	142	ASN	Peptide
1	51-A	164	HIS	Peptide
1	51-A	279	ARG	Sidechain
1	51-A	298	ARG	Sidechain
1	51-A	301	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	51-A	48	ASP	Peptide
1	51-A	49	MET	Peptide
1	52-A	152	ILE	Peptide
1	52-A	217	ARG	Sidechain
1	52-A	298	ARG	Sidechain
1	52-A	301	SER	Peptide
1	52-A	304	THR	Peptide
1	52-A	50	LEU	Peptide
1	53-A	1	SER	Peptide
1	53-A	156	CYS	Peptide
1	53-A	299	GLN	Peptide
1	53-A	4	ARG	Sidechain
1	53-A	45	THR	Peptide
1	53-A	48	ASP	Peptide
1	53-A	60	ARG	Sidechain
1	53-A	72	ASN	Peptide
1	54-A	141	LEU	Peptide
1	54-A	153	ASP	Peptide
1	54-A	154	TYR	Peptide
1	54-A	155	ASP	Peptide
1	54-A	194	ALA	Peptide
1	54-A	299	GLN	Peptide
1	54-A	301	SER	Peptide
1	54-A	304	THR	Peptide
1	54-A	305	PHE	Peptide
1	54-A	51	ASN	Peptide
1	6-A	188	ARG	Sidechain
1	6-A	189	GLN	Peptide
1	6-A	217	ARG	Sidechain
1	6-A	300	CYS	Peptide
1	6-A	46	SER	Peptide
1	7-A	152	ILE	Peptide
1	7-A	299	GLN	Peptide
1	7-A	301	SER	Peptide
1	7-A	302	GLY	Peptide
1	7-A	303	VAL	Peptide
1	7-A	45	THR	Peptide
1	8-A	152	ILE	Peptide
1	8-A	153	ASP	Peptide
1	8-A	298	ARG	Peptide
1	8-A	299	GLN	Peptide
1	8-A	300	CYS	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	8-A	41	HIS	Peptide
1	8-A	51	ASN	Peptide
1	8-A	68	VAL	Peptide
1	8-A	71	GLY	Peptide
1	9-A	155	ASP	Peptide
1	9-A	156	CYS	Peptide
1	9-A	299	GLN	Peptide
1	9-A	304	THR	Peptide
1	9-A	41	HIS	Peptide
1	9-A	48	ASP	Peptide
1	9-A	51	ASN	Peptide

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	1-A	2367	2314	2313	0	0
1	2-A	2367	2314	2313	0	0
1	3-A	2367	2314	2313	0	0
1	4-A	2367	2314	2313	0	0
1	5-A	2367	2314	2313	0	0
1	6-A	2367	2314	2313	0	0
1	7-A	2367	2314	2313	0	0
1	8-A	2367	2314	2313	0	0
1	9-A	2367	2314	2313	0	0
1	10-A	2367	2314	2313	0	0
1	11-A	2367	2314	2313	0	0
1	12-A	2367	2314	2313	0	0
1	13-A	2367	2314	2313	0	0
1	14-A	2367	2314	2312	0	0
1	15-A	2367	2314	2314	0	0
1	16-A	2367	2314	2313	0	0
1	17-A	2367	2314	2313	0	0
1	18-A	2367	2314	2312	0	0
1	19-A	2367	2314	2313	0	0
1	20-A	2367	2314	2312	0	0
1	21-A	2367	2314	2314	0	0
1	22-A	2367	2314	2313	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	23-A	2367	2314	2313	0	0
1	24-A	2367	2314	2313	0	0
1	25-A	2367	2314	2313	0	0
1	26-A	2367	2314	2313	0	0
1	27-A	2367	2314	2313	0	0
1	28-A	2367	2314	2313	0	0
1	29-A	2367	2314	2313	0	0
1	30-A	2367	2314	2313	0	0
1	31-A	2367	2314	2313	0	0
1	32-A	2367	2314	2313	0	0
1	33-A	2367	2314	2313	0	0
1	34-A	2367	2314	2313	0	0
1	35-A	2367	2314	2311	0	0
1	36-A	2367	2314	2313	0	0
1	37-A	2367	2314	2313	0	0
1	38-A	2367	2314	2312	0	0
1	39-A	2367	2314	2313	0	0
1	40-A	2367	2314	2313	0	0
1	41-A	2367	2314	2313	0	0
1	42-A	2367	2314	2313	0	0
1	43-A	2367	2314	2313	0	0
1	44-A	2367	2314	2313	0	0
1	45-A	2367	2314	2313	0	0
1	46-A	2367	2314	2313	0	0
1	47-A	2367	2314	2312	0	0
1	48-A	2367	2314	2313	0	0
1	49-A	2367	2314	2313	0	0
1	50-A	2367	2314	2313	0	0
1	51-A	2367	2314	2313	0	0
1	52-A	2367	2314	2313	0	0
1	53-A	2367	2314	2313	0	0
1	54-A	2367	2314	2313	0	0
2	1-A	20	30	30	0	0
2	2-A	20	30	30	0	0
2	3-A	20	30	30	0	0
2	4-A	20	30	30	0	0
2	5-A	20	30	30	0	0
2	6-A	20	30	30	0	0
2	7-A	20	30	30	0	0
2	8-A	20	30	30	0	0
2	9-A	20	30	30	0	0
2	10-A	20	30	30	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	11-A	20	30	30	0	0
2	12-A	20	30	30	0	0
2	13-A	20	30	30	0	0
2	14-A	20	30	30	0	0
2	15-A	20	30	30	0	0
2	16-A	20	30	30	0	0
2	17-A	20	30	30	0	0
2	18-A	20	30	30	0	0
2	19-A	20	30	30	0	0
2	20-A	20	30	30	0	0
2	21-A	20	30	30	0	0
2	22-A	20	30	30	0	0
2	23-A	20	30	30	0	0
2	24-A	20	30	30	0	0
2	25-A	20	30	30	0	0
2	26-A	20	30	30	0	0
2	27-A	20	30	30	0	0
2	28-A	20	30	30	0	0
2	29-A	20	30	30	0	0
2	30-A	20	30	30	0	0
2	31-A	20	30	30	0	0
2	32-A	20	30	30	0	0
2	33-A	20	30	30	0	0
2	34-A	20	30	30	0	0
2	35-A	20	30	30	0	0
2	36-A	20	30	30	0	0
2	37-A	20	30	30	0	0
2	38-A	20	30	30	0	0
2	39-A	20	30	30	0	0
2	40-A	20	30	30	0	0
2	41-A	20	30	30	0	0
2	42-A	20	30	30	0	0
2	43-A	20	30	30	0	0
2	44-A	20	30	30	0	0
2	45-A	20	30	30	0	0
2	46-A	20	30	30	0	0
2	47-A	20	30	30	0	0
2	48-A	20	30	30	0	0
2	49-A	20	30	30	0	0
2	50-A	20	30	30	0	0
2	51-A	20	30	30	0	0
2	52-A	20	30	30	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	53-A	20	30	30	0	0
2	54-A	20	30	30	0	0
3	1-A	1	0	0	0	0
3	2-A	1	0	0	0	0
3	3-A	1	0	0	0	0
3	4-A	1	0	0	0	0
3	5-A	1	0	0	0	0
3	6-A	1	0	0	0	0
3	7-A	1	0	0	0	0
3	8-A	1	0	0	0	0
3	9-A	1	0	0	0	0
3	10-A	1	0	0	0	0
3	11-A	1	0	0	0	0
3	12-A	1	0	0	0	0
3	13-A	1	0	0	0	0
3	14-A	1	0	0	0	0
3	15-A	1	0	0	0	0
3	16-A	1	0	0	0	0
3	17-A	1	0	0	0	0
3	18-A	1	0	0	0	0
3	19-A	1	0	0	0	0
3	20-A	1	0	0	0	0
3	21-A	1	0	0	0	0
3	22-A	1	0	0	0	0
3	23-A	1	0	0	0	0
3	24-A	1	0	0	0	0
3	25-A	1	0	0	0	0
3	26-A	1	0	0	0	0
3	27-A	1	0	0	0	0
3	28-A	1	0	0	0	0
3	29-A	1	0	0	0	0
3	30-A	1	0	0	0	0
3	31-A	1	0	0	0	0
3	32-A	1	0	0	0	0
3	33-A	1	0	0	0	0
3	34-A	1	0	0	0	0
3	35-A	1	0	0	0	0
3	36-A	1	0	0	0	0
3	37-A	1	0	0	0	0
3	38-A	1	0	0	0	0
3	39-A	1	0	0	0	0
3	40-A	1	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	41-A	1	0	0	0	0
3	42-A	1	0	0	0	0
3	43-A	1	0	0	0	0
3	44-A	1	0	0	0	0
3	45-A	1	0	0	0	0
3	46-A	1	0	0	0	0
3	47-A	1	0	0	0	0
3	48-A	1	0	0	0	0
3	49-A	1	0	0	0	0
3	50-A	1	0	0	0	0
3	51-A	1	0	0	0	0
3	52-A	1	0	0	0	0
3	53-A	1	0	0	0	0
3	54-A	1	0	0	0	0
4	1-A	190	0	0	0	0
4	2-A	172	0	0	0	0
4	3-A	162	0	0	0	0
4	4-A	157	0	0	0	0
4	5-A	164	0	0	0	0
4	6-A	181	0	0	0	0
4	7-A	173	0	0	0	0
4	8-A	177	0	0	0	0
4	9-A	174	0	0	0	0
4	10-A	168	0	0	0	0
4	11-A	164	0	0	0	0
4	12-A	195	0	0	0	0
4	13-A	196	0	0	0	0
4	14-A	152	0	0	0	0
4	15-A	164	0	0	0	0
4	16-A	166	0	0	0	0
4	17-A	176	0	0	0	0
4	18-A	177	0	0	0	0
4	19-A	160	0	0	0	0
4	20-A	161	0	0	0	0
4	21-A	179	0	0	0	0
4	22-A	175	0	0	0	0
4	23-A	170	0	0	0	0
4	24-A	164	0	0	0	0
4	25-A	166	0	0	0	0
4	26-A	178	0	0	0	0
4	27-A	181	0	0	0	0
4	28-A	167	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	29-A	158	0	0	0	0
4	30-A	170	0	0	0	0
4	31-A	183	0	0	0	0
4	32-A	169	0	0	0	0
4	33-A	181	0	0	0	0
4	34-A	182	0	0	0	0
4	35-A	165	0	0	0	0
4	36-A	165	0	0	0	0
4	37-A	169	0	0	0	0
4	38-A	170	0	0	0	0
4	39-A	182	0	0	0	0
4	40-A	172	0	0	0	0
4	41-A	158	0	0	0	0
4	42-A	163	0	0	0	0
4	43-A	164	0	0	0	0
4	44-A	172	0	0	0	0
4	45-A	150	0	0	0	0
4	46-A	162	0	0	0	0
4	47-A	152	0	0	0	0
4	48-A	151	0	0	0	0
4	49-A	145	0	0	0	0
4	50-A	185	0	0	0	0
4	51-A	168	0	0	0	0
4	52-A	151	0	0	0	0
4	53-A	145	0	0	0	0
4	54-A	174	0	0	0	0
All	All	138067	126576	126517	0	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). Clashscore could not be calculated for this entry.

There are no clashes within the asymmetric unit.

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles ⓘ

5.3.1 Protein backbone ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	1-A	304/306 (99%)	277 (91%)	17 (6%)	10 (3%)	4	0
1	2-A	304/306 (99%)	277 (91%)	18 (6%)	9 (3%)	4	0
1	3-A	304/306 (99%)	280 (92%)	16 (5%)	8 (3%)	5	0
1	4-A	304/306 (99%)	281 (92%)	12 (4%)	11 (4%)	3	0
1	5-A	304/306 (99%)	271 (89%)	22 (7%)	11 (4%)	3	0
1	6-A	304/306 (99%)	274 (90%)	16 (5%)	14 (5%)	2	0
1	7-A	304/306 (99%)	273 (90%)	15 (5%)	16 (5%)	2	0
1	8-A	304/306 (99%)	273 (90%)	20 (7%)	11 (4%)	3	0
1	9-A	304/306 (99%)	265 (87%)	16 (5%)	23 (8%)	1	0
1	10-A	304/306 (99%)	273 (90%)	13 (4%)	18 (6%)	1	0
1	11-A	304/306 (99%)	266 (88%)	24 (8%)	14 (5%)	2	0
1	12-A	304/306 (99%)	270 (89%)	15 (5%)	19 (6%)	1	0
1	13-A	304/306 (99%)	271 (89%)	18 (6%)	15 (5%)	2	0
1	14-A	304/306 (99%)	266 (88%)	25 (8%)	13 (4%)	2	0
1	15-A	304/306 (99%)	265 (87%)	26 (9%)	13 (4%)	2	0
1	16-A	304/306 (99%)	269 (88%)	16 (5%)	19 (6%)	1	0
1	17-A	304/306 (99%)	262 (86%)	24 (8%)	18 (6%)	1	0
1	18-A	304/306 (99%)	257 (84%)	28 (9%)	19 (6%)	1	0
1	19-A	304/306 (99%)	258 (85%)	25 (8%)	21 (7%)	1	0
1	20-A	304/306 (99%)	263 (86%)	22 (7%)	19 (6%)	1	0
1	21-A	304/306 (99%)	260 (86%)	24 (8%)	20 (7%)	1	0
1	22-A	304/306 (99%)	261 (86%)	23 (8%)	20 (7%)	1	0
1	23-A	304/306 (99%)	265 (87%)	21 (7%)	18 (6%)	1	0
1	24-A	304/306 (99%)	264 (87%)	25 (8%)	15 (5%)	2	0
1	25-A	304/306 (99%)	264 (87%)	22 (7%)	18 (6%)	1	0
1	26-A	304/306 (99%)	269 (88%)	22 (7%)	13 (4%)	2	0
1	27-A	304/306 (99%)	266 (88%)	15 (5%)	23 (8%)	1	0
1	28-A	304/306 (99%)	269 (88%)	21 (7%)	14 (5%)	2	0
1	29-A	304/306 (99%)	272 (90%)	18 (6%)	14 (5%)	2	0
1	30-A	304/306 (99%)	271 (89%)	14 (5%)	19 (6%)	1	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	31-A	304/306 (99%)	264 (87%)	24 (8%)	16 (5%)	2	0
1	32-A	304/306 (99%)	262 (86%)	25 (8%)	17 (6%)	2	0
1	33-A	304/306 (99%)	266 (88%)	19 (6%)	19 (6%)	1	0
1	34-A	304/306 (99%)	269 (88%)	15 (5%)	20 (7%)	1	0
1	35-A	304/306 (99%)	268 (88%)	22 (7%)	14 (5%)	2	0
1	36-A	304/306 (99%)	267 (88%)	20 (7%)	17 (6%)	2	0
1	37-A	304/306 (99%)	277 (91%)	13 (4%)	14 (5%)	2	0
1	38-A	304/306 (99%)	270 (89%)	23 (8%)	11 (4%)	3	0
1	39-A	304/306 (99%)	267 (88%)	23 (8%)	14 (5%)	2	0
1	40-A	304/306 (99%)	266 (88%)	23 (8%)	15 (5%)	2	0
1	41-A	304/306 (99%)	262 (86%)	26 (9%)	16 (5%)	2	0
1	42-A	304/306 (99%)	266 (88%)	25 (8%)	13 (4%)	2	0
1	43-A	304/306 (99%)	270 (89%)	20 (7%)	14 (5%)	2	0
1	44-A	304/306 (99%)	266 (88%)	21 (7%)	17 (6%)	2	0
1	45-A	304/306 (99%)	269 (88%)	21 (7%)	14 (5%)	2	0
1	46-A	304/306 (99%)	268 (88%)	26 (9%)	10 (3%)	4	0
1	47-A	304/306 (99%)	266 (88%)	23 (8%)	15 (5%)	2	0
1	48-A	304/306 (99%)	268 (88%)	16 (5%)	20 (7%)	1	0
1	49-A	304/306 (99%)	266 (88%)	23 (8%)	15 (5%)	2	0
1	50-A	304/306 (99%)	264 (87%)	22 (7%)	18 (6%)	1	0
1	51-A	304/306 (99%)	270 (89%)	18 (6%)	16 (5%)	2	0
1	52-A	304/306 (99%)	271 (89%)	21 (7%)	12 (4%)	3	0
1	53-A	304/306 (99%)	278 (91%)	15 (5%)	11 (4%)	3	0
1	54-A	304/306 (99%)	267 (88%)	23 (8%)	14 (5%)	2	0
All	All	16416/16524 (99%)	14479 (88%)	1100 (7%)	837 (5%)	2	0

All (837) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	51	ASN
1	1-A	53	ASN
1	1-A	155	ASP
1	1-A	193	ALA
1	2-A	46	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	50	LEU
1	2-A	154	TYR
1	2-A	277	ASN
1	3-A	46	SER
1	3-A	51	ASN
1	3-A	73	VAL
1	3-A	300	CYS
1	3-A	305	PHE
1	4-A	48	ASP
1	4-A	51	ASN
1	4-A	154	TYR
1	4-A	299	GLN
1	4-A	300	CYS
1	5-A	48	ASP
1	5-A	50	LEU
1	5-A	60	ARG
1	5-A	72	ASN
1	5-A	300	CYS
1	5-A	301	SER
1	5-A	305	PHE
1	6-A	45	THR
1	6-A	46	SER
1	6-A	48	ASP
1	6-A	49	MET
1	6-A	50	LEU
1	6-A	154	TYR
1	6-A	191	ALA
1	6-A	300	CYS
1	6-A	301	SER
1	7-A	47	GLU
1	7-A	48	ASP
1	7-A	49	MET
1	7-A	191	ALA
1	7-A	192	GLN
1	7-A	305	PHE
1	8-A	24	THR
1	8-A	45	THR
1	8-A	49	MET
1	8-A	50	LEU
1	8-A	52	PRO
1	8-A	191	ALA
1	8-A	192	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	300	CYS
1	9-A	49	MET
1	9-A	51	ASN
1	9-A	52	PRO
1	9-A	72	ASN
1	9-A	152	ILE
1	9-A	154	TYR
1	9-A	156	CYS
1	9-A	191	ALA
1	9-A	193	ALA
1	9-A	194	ALA
1	9-A	300	CYS
1	9-A	301	SER
1	9-A	302	GLY
1	10-A	23	GLY
1	10-A	49	MET
1	10-A	129	ALA
1	10-A	155	ASP
1	10-A	191	ALA
1	10-A	193	ALA
1	10-A	194	ALA
1	10-A	300	CYS
1	10-A	305	PHE
1	11-A	46	SER
1	11-A	48	ASP
1	11-A	72	ASN
1	11-A	301	SER
1	11-A	302	GLY
1	11-A	305	PHE
1	12-A	3	PHE
1	12-A	48	ASP
1	12-A	51	ASN
1	12-A	52	PRO
1	12-A	72	ASN
1	12-A	73	VAL
1	12-A	153	ASP
1	12-A	191	ALA
1	12-A	192	GLN
1	12-A	194	ALA
1	12-A	300	CYS
1	13-A	3	PHE
1	13-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	46	SER
1	13-A	50	LEU
1	13-A	51	ASN
1	13-A	72	ASN
1	13-A	142	ASN
1	13-A	155	ASP
1	13-A	278	GLY
1	13-A	300	CYS
1	14-A	45	THR
1	14-A	51	ASN
1	14-A	192	GLN
1	14-A	194	ALA
1	14-A	304	THR
1	15-A	49	MET
1	15-A	74	GLN
1	15-A	191	ALA
1	15-A	196	THR
1	15-A	279	ARG
1	15-A	299	GLN
1	15-A	303	VAL
1	16-A	24	THR
1	16-A	45	THR
1	16-A	74	GLN
1	16-A	155	ASP
1	16-A	190	THR
1	16-A	192	GLN
1	16-A	277	ASN
1	16-A	278	GLY
1	17-A	24	THR
1	17-A	25	THR
1	17-A	46	SER
1	17-A	49	MET
1	17-A	52	PRO
1	17-A	74	GLN
1	17-A	171	VAL
1	17-A	300	CYS
1	17-A	304	THR
1	18-A	23	GLY
1	18-A	24	THR
1	18-A	46	SER
1	18-A	49	MET
1	18-A	153	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	154	TYR
1	18-A	156	CYS
1	18-A	167	LEU
1	18-A	168	PRO
1	18-A	189	GLN
1	18-A	192	GLN
1	18-A	305	PHE
1	19-A	25	THR
1	19-A	47	GLU
1	19-A	154	TYR
1	19-A	168	PRO
1	19-A	169	THR
1	19-A	190	THR
1	19-A	279	ARG
1	19-A	297	VAL
1	19-A	299	GLN
1	19-A	304	THR
1	20-A	24	THR
1	20-A	25	THR
1	20-A	46	SER
1	20-A	49	MET
1	20-A	71	GLY
1	20-A	170	GLY
1	20-A	189	GLN
1	20-A	193	ALA
1	20-A	275	GLY
1	20-A	279	ARG
1	20-A	304	THR
1	20-A	305	PHE
1	21-A	41	HIS
1	21-A	46	SER
1	21-A	48	ASP
1	21-A	50	LEU
1	21-A	51	ASN
1	21-A	52	PRO
1	21-A	155	ASP
1	21-A	170	GLY
1	21-A	193	ALA
1	21-A	279	ARG
1	21-A	301	SER
1	21-A	303	VAL
1	22-A	24	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	25	THR
1	22-A	48	ASP
1	22-A	50	LEU
1	22-A	51	ASN
1	22-A	52	PRO
1	22-A	193	ALA
1	22-A	198	THR
1	22-A	275	GLY
1	22-A	279	ARG
1	22-A	301	SER
1	22-A	303	VAL
1	22-A	305	PHE
1	23-A	50	LEU
1	23-A	51	ASN
1	23-A	52	PRO
1	23-A	155	ASP
1	23-A	191	ALA
1	23-A	194	ALA
1	23-A	277	ASN
1	23-A	279	ARG
1	23-A	280	THR
1	24-A	45	THR
1	24-A	48	ASP
1	24-A	193	ALA
1	24-A	276	MET
1	24-A	299	GLN
1	24-A	300	CYS
1	25-A	47	GLU
1	25-A	51	ASN
1	25-A	193	ALA
1	25-A	276	MET
1	25-A	299	GLN
1	25-A	300	CYS
1	26-A	24	THR
1	26-A	47	GLU
1	26-A	48	ASP
1	26-A	51	ASN
1	26-A	276	MET
1	26-A	303	VAL
1	26-A	304	THR
1	27-A	23	GLY
1	27-A	24	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET
1	27-A	51	ASN
1	27-A	153	ASP
1	27-A	156	CYS
1	27-A	193	ALA
1	27-A	275	GLY
1	27-A	277	ASN
1	27-A	298	ARG
1	27-A	303	VAL
1	28-A	24	THR
1	28-A	46	SER
1	28-A	156	CYS
1	28-A	299	GLN
1	28-A	304	THR
1	29-A	46	SER
1	29-A	51	ASN
1	29-A	154	TYR
1	29-A	193	ALA
1	29-A	198	THR
1	29-A	276	MET
1	29-A	299	GLN
1	30-A	48	ASP
1	30-A	54	TYR
1	30-A	154	TYR
1	30-A	168	PRO
1	30-A	192	GLN
1	30-A	193	ALA
1	30-A	275	GLY
1	30-A	301	SER
1	30-A	303	VAL
1	31-A	47	GLU
1	31-A	48	ASP
1	31-A	50	LEU
1	31-A	52	PRO
1	31-A	119	ASN
1	31-A	155	ASP
1	31-A	275	GLY
1	31-A	298	ARG
1	31-A	300	CYS
1	31-A	301	SER
1	31-A	303	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	50	LEU
1	32-A	191	ALA
1	32-A	193	ALA
1	32-A	298	ARG
1	32-A	304	THR
1	33-A	24	THR
1	33-A	48	ASP
1	33-A	50	LEU
1	33-A	154	TYR
1	33-A	191	ALA
1	33-A	192	GLN
1	33-A	193	ALA
1	33-A	276	MET
1	33-A	298	ARG
1	33-A	301	SER
1	33-A	303	VAL
1	33-A	305	PHE
1	34-A	46	SER
1	34-A	47	GLU
1	34-A	192	GLN
1	34-A	198	THR
1	34-A	275	GLY
1	34-A	276	MET
1	34-A	277	ASN
1	34-A	299	GLN
1	34-A	303	VAL
1	35-A	49	MET
1	35-A	50	LEU
1	35-A	192	GLN
1	35-A	197	ASP
1	35-A	277	ASN
1	35-A	303	VAL
1	36-A	47	GLU
1	36-A	48	ASP
1	36-A	141	LEU
1	36-A	154	TYR
1	36-A	196	THR
1	36-A	197	ASP
1	36-A	198	THR
1	36-A	303	VAL
1	36-A	304	THR
1	36-A	305	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	47	GLU
1	37-A	48	ASP
1	37-A	154	TYR
1	37-A	168	PRO
1	37-A	191	ALA
1	37-A	276	MET
1	37-A	304	THR
1	38-A	191	ALA
1	38-A	277	ASN
1	39-A	70	ALA
1	39-A	75	LEU
1	39-A	142	ASN
1	39-A	143	GLY
1	39-A	154	TYR
1	39-A	277	ASN
1	39-A	298	ARG
1	39-A	303	VAL
1	40-A	48	ASP
1	40-A	75	LEU
1	40-A	193	ALA
1	40-A	276	MET
1	40-A	277	ASN
1	40-A	300	CYS
1	40-A	301	SER
1	41-A	50	LEU
1	41-A	51	ASN
1	41-A	52	PRO
1	41-A	75	LEU
1	41-A	192	GLN
1	41-A	277	ASN
1	41-A	278	GLY
1	41-A	297	VAL
1	42-A	46	SER
1	42-A	47	GLU
1	42-A	49	MET
1	42-A	277	ASN
1	42-A	297	VAL
1	42-A	305	PHE
1	43-A	24	THR
1	43-A	49	MET
1	43-A	152	ILE
1	43-A	153	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	300	CYS
1	43-A	301	SER
1	43-A	303	VAL
1	44-A	46	SER
1	44-A	49	MET
1	44-A	71	GLY
1	44-A	72	ASN
1	44-A	153	ASP
1	44-A	154	TYR
1	44-A	192	GLN
1	44-A	300	CYS
1	44-A	301	SER
1	44-A	305	PHE
1	45-A	46	SER
1	45-A	47	GLU
1	45-A	59	ILE
1	45-A	61	LYS
1	45-A	154	TYR
1	45-A	155	ASP
1	45-A	301	SER
1	46-A	50	LEU
1	46-A	60	ARG
1	46-A	155	ASP
1	46-A	197	ASP
1	47-A	45	THR
1	47-A	72	ASN
1	47-A	142	ASN
1	47-A	154	TYR
1	47-A	303	VAL
1	48-A	47	GLU
1	48-A	48	ASP
1	48-A	50	LEU
1	48-A	52	PRO
1	48-A	71	GLY
1	48-A	73	VAL
1	48-A	141	LEU
1	48-A	142	ASN
1	48-A	165	MET
1	48-A	298	ARG
1	48-A	300	CYS
1	48-A	301	SER
1	48-A	305	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	49-A	47	GLU
1	49-A	48	ASP
1	49-A	142	ASN
1	49-A	165	MET
1	49-A	194	ALA
1	49-A	276	MET
1	49-A	298	ARG
1	49-A	300	CYS
1	49-A	303	VAL
1	50-A	71	GLY
1	50-A	154	TYR
1	50-A	165	MET
1	50-A	299	GLN
1	50-A	300	CYS
1	50-A	303	VAL
1	50-A	305	PHE
1	51-A	3	PHE
1	51-A	50	LEU
1	51-A	72	ASN
1	51-A	165	MET
1	51-A	300	CYS
1	52-A	51	ASN
1	52-A	72	ASN
1	52-A	194	ALA
1	52-A	234	ALA
1	52-A	235	MET
1	52-A	304	THR
1	52-A	305	PHE
1	53-A	70	ALA
1	53-A	71	GLY
1	53-A	154	TYR
1	53-A	193	ALA
1	53-A	300	CYS
1	53-A	303	VAL
1	53-A	304	THR
1	54-A	50	LEU
1	54-A	154	TYR
1	54-A	192	GLN
1	54-A	194	ALA
1	54-A	277	ASN
1	54-A	300	CYS
1	54-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	54-A	303	VAL
1	1-A	50	LEU
1	1-A	154	TYR
1	2-A	59	ILE
1	2-A	155	ASP
1	2-A	305	PHE
1	3-A	52	PRO
1	3-A	154	TYR
1	4-A	2	GLY
1	5-A	46	SER
1	5-A	277	ASN
1	6-A	303	VAL
1	7-A	23	GLY
1	7-A	51	ASN
1	7-A	52	PRO
1	7-A	300	CYS
1	7-A	303	VAL
1	9-A	2	GLY
1	9-A	24	THR
1	9-A	45	THR
1	9-A	50	LEU
1	9-A	153	ASP
1	9-A	305	PHE
1	10-A	2	GLY
1	10-A	72	ASN
1	10-A	301	SER
1	10-A	302	GLY
1	11-A	53	ASN
1	11-A	193	ALA
1	12-A	50	LEU
1	12-A	301	SER
1	13-A	298	ARG
1	14-A	48	ASP
1	14-A	72	ASN
1	14-A	154	TYR
1	14-A	299	GLN
1	14-A	300	CYS
1	15-A	195	GLY
1	16-A	168	PRO
1	17-A	23	GLY
1	17-A	41	HIS
1	17-A	190	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	303	VAL
1	18-A	274	ASN
1	18-A	300	CYS
1	19-A	49	MET
1	19-A	195	GLY
1	19-A	300	CYS
1	20-A	45	THR
1	21-A	23	GLY
1	21-A	24	THR
1	21-A	119	ASN
1	22-A	23	GLY
1	22-A	46	SER
1	22-A	47	GLU
1	23-A	23	GLY
1	23-A	48	ASP
1	23-A	142	ASN
1	23-A	276	MET
1	24-A	3	PHE
1	24-A	191	ALA
1	24-A	303	VAL
1	25-A	48	ASP
1	25-A	155	ASP
1	25-A	192	GLN
1	25-A	303	VAL
1	26-A	71	GLY
1	26-A	298	ARG
1	26-A	305	PHE
1	27-A	46	SER
1	27-A	50	LEU
1	27-A	59	ILE
1	27-A	276	MET
1	27-A	304	THR
1	28-A	23	GLY
1	28-A	47	GLU
1	28-A	193	ALA
1	28-A	275	GLY
1	28-A	300	CYS
1	29-A	23	GLY
1	29-A	223	PHE
1	29-A	303	VAL
1	30-A	23	GLY
1	31-A	24	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	189	GLN
1	31-A	191	ALA
1	31-A	193	ALA
1	31-A	277	ASN
1	32-A	24	THR
1	32-A	46	SER
1	32-A	52	PRO
1	32-A	276	MET
1	32-A	300	CYS
1	32-A	301	SER
1	33-A	47	GLU
1	33-A	170	GLY
1	33-A	277	ASN
1	33-A	304	THR
1	34-A	48	ASP
1	34-A	154	TYR
1	34-A	190	THR
1	34-A	195	GLY
1	35-A	23	GLY
1	35-A	154	TYR
1	35-A	169	THR
1	35-A	275	GLY
1	36-A	50	LEU
1	36-A	275	GLY
1	37-A	170	GLY
1	37-A	302	GLY
1	37-A	303	VAL
1	38-A	48	ASP
1	38-A	72	ASN
1	38-A	192	GLN
1	38-A	275	GLY
1	38-A	300	CYS
1	39-A	72	ASN
1	39-A	278	GLY
1	39-A	300	CYS
1	40-A	23	GLY
1	40-A	302	GLY
1	41-A	23	GLY
1	41-A	46	SER
1	41-A	47	GLU
1	41-A	74	GLN
1	41-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	300	CYS
1	42-A	303	VAL
1	43-A	154	TYR
1	44-A	47	GLU
1	45-A	71	GLY
1	45-A	299	GLN
1	45-A	303	VAL
1	46-A	154	TYR
1	46-A	277	ASN
1	46-A	297	VAL
1	47-A	46	SER
1	47-A	301	SER
1	48-A	49	MET
1	48-A	72	ASN
1	48-A	198	THR
1	48-A	302	GLY
1	49-A	71	GLY
1	49-A	277	ASN
1	50-A	24	THR
1	50-A	45	THR
1	50-A	192	GLN
1	50-A	301	SER
1	51-A	71	GLY
1	51-A	303	VAL
1	52-A	71	GLY
1	52-A	193	ALA
1	52-A	277	ASN
1	52-A	300	CYS
1	52-A	303	VAL
1	53-A	47	GLU
1	53-A	72	ASN
1	53-A	302	GLY
1	54-A	71	GLY
1	54-A	244	GLN
1	1-A	52	PRO
1	3-A	71	GLY
1	6-A	47	GLU
1	6-A	277	ASN
1	6-A	302	GLY
1	7-A	45	THR
1	7-A	73	VAL
1	7-A	81	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	71	GLY
1	9-A	192	GLN
1	10-A	192	GLN
1	10-A	304	THR
1	11-A	45	THR
1	11-A	51	ASN
1	12-A	167	LEU
1	12-A	299	GLN
1	13-A	191	ALA
1	13-A	192	GLN
1	13-A	277	ASN
1	14-A	53	ASN
1	14-A	279	ARG
1	15-A	274	ASN
1	16-A	46	SER
1	16-A	305	PHE
1	17-A	156	CYS
1	17-A	168	PRO
1	17-A	279	ARG
1	18-A	25	THR
1	19-A	24	THR
1	19-A	302	GLY
1	19-A	305	PHE
1	20-A	274	ASN
1	20-A	300	CYS
1	21-A	275	GLY
1	22-A	277	ASN
1	22-A	299	GLN
1	23-A	54	TYR
1	23-A	298	ARG
1	23-A	302	GLY
1	24-A	155	ASP
1	24-A	277	ASN
1	24-A	305	PHE
1	25-A	24	THR
1	25-A	301	SER
1	25-A	304	THR
1	26-A	23	GLY
1	26-A	277	ASN
1	27-A	155	ASP
1	28-A	302	GLY
1	29-A	277	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	24	THR
1	30-A	47	GLU
1	30-A	52	PRO
1	30-A	195	GLY
1	30-A	277	ASN
1	30-A	299	GLN
1	32-A	47	GLU
1	33-A	46	SER
1	33-A	73	VAL
1	34-A	52	PRO
1	34-A	194	ALA
1	34-A	301	SER
1	34-A	304	THR
1	34-A	305	PHE
1	35-A	40	ARG
1	36-A	276	MET
1	37-A	45	THR
1	37-A	193	ALA
1	37-A	198	THR
1	38-A	44	CYS
1	38-A	303	VAL
1	38-A	304	THR
1	41-A	155	ASP
1	42-A	276	MET
1	42-A	301	SER
1	43-A	72	ASN
1	43-A	155	ASP
1	44-A	50	LEU
1	44-A	52	PRO
1	44-A	299	GLN
1	45-A	60	ARG
1	45-A	298	ARG
1	46-A	196	THR
1	47-A	167	LEU
1	47-A	297	VAL
1	47-A	298	ARG
1	47-A	299	GLN
1	48-A	277	ASN
1	49-A	302	GLY
1	50-A	46	SER
1	50-A	72	ASN
1	50-A	297	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	50-A	298	ARG
1	50-A	302	GLY
1	51-A	47	GLU
1	51-A	154	TYR
1	51-A	191	ALA
1	51-A	193	ALA
1	51-A	299	GLN
1	51-A	305	PHE
1	53-A	49	MET
1	54-A	48	ASP
1	1-A	119	ASN
1	1-A	302	GLY
1	4-A	46	SER
1	4-A	55	GLU
1	5-A	154	TYR
1	8-A	40	ARG
1	8-A	48	ASP
1	10-A	48	ASP
1	11-A	192	GLN
1	15-A	305	PHE
1	16-A	50	LEU
1	16-A	279	ARG
1	20-A	50	LEU
1	20-A	297	VAL
1	20-A	299	GLN
1	21-A	22	CYS
1	22-A	40	ARG
1	22-A	155	ASP
1	23-A	304	THR
1	25-A	156	CYS
1	25-A	194	ALA
1	27-A	48	ASP
1	29-A	48	ASP
1	29-A	256	GLN
1	30-A	188	ARG
1	30-A	276	MET
1	32-A	192	GLN
1	34-A	45	THR
1	34-A	49	MET
1	35-A	71	GLY
1	35-A	305	PHE
1	36-A	277	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	304	THR
1	40-A	194	ALA
1	40-A	299	GLN
1	41-A	48	ASP
1	41-A	305	PHE
1	42-A	60	ARG
1	42-A	153	ASP
1	43-A	50	LEU
1	43-A	304	THR
1	44-A	108	PRO
1	44-A	193	ALA
1	45-A	72	ASN
1	47-A	277	ASN
1	47-A	300	CYS
1	48-A	62	SER
1	49-A	154	TYR
1	49-A	305	PHE
1	50-A	2	GLY
1	50-A	277	ASN
1	51-A	142	ASN
1	54-A	51	ASN
1	54-A	193	ALA
1	1-A	156	CYS
1	2-A	60	ARG
1	6-A	255	ALA
1	7-A	50	LEU
1	7-A	299	GLN
1	8-A	46	SER
1	9-A	23	GLY
1	10-A	168	PRO
1	11-A	191	ALA
1	12-A	305	PHE
1	14-A	302	GLY
1	15-A	194	ALA
1	15-A	304	THR
1	16-A	299	GLN
1	16-A	300	CYS
1	16-A	304	THR
1	19-A	303	VAL
1	20-A	3	PHE
1	21-A	304	THR
1	23-A	73	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	51	ASN
1	25-A	128	CYS
1	26-A	153	ASP
1	27-A	128	CYS
1	27-A	168	PRO
1	27-A	305	PHE
1	28-A	51	ASN
1	28-A	192	GLN
1	28-A	303	VAL
1	30-A	50	LEU
1	32-A	277	ASN
1	36-A	71	GLY
1	37-A	255	ALA
1	40-A	119	ASN
1	40-A	278	GLY
1	43-A	298	ARG
1	47-A	24	THR
1	47-A	233	VAL
1	49-A	50	LEU
1	2-A	301	SER
1	12-A	193	ALA
1	13-A	154	TYR
1	15-A	155	ASP
1	16-A	52	PRO
1	17-A	301	SER
1	18-A	188	ARG
1	18-A	301	SER
1	19-A	48	ASP
1	21-A	299	GLN
1	24-A	23	GLY
1	24-A	278	GLY
1	25-A	46	SER
1	32-A	167	LEU
1	33-A	51	ASN
1	35-A	195	GLY
1	36-A	256	GLN
1	38-A	71	GLY
1	40-A	304	THR
1	46-A	61	LYS
1	46-A	301	SER
1	48-A	256	GLN
1	51-A	51	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	51-A	304	THR
1	4-A	23	GLY
1	4-A	302	GLY
1	4-A	303	VAL
1	5-A	59	ILE
1	11-A	73	VAL
1	12-A	71	GLY
1	17-A	51	ASN
1	19-A	51	ASN
1	19-A	71	GLY
1	19-A	278	GLY
1	36-A	278	GLY
1	39-A	168	PRO
1	40-A	9	PRO
1	42-A	152	ILE
1	9-A	278	GLY
1	12-A	23	GLY
1	16-A	302	GLY
1	18-A	170	GLY
1	18-A	302	GLY
1	21-A	278	GLY
1	27-A	120	GLY
1	32-A	71	GLY
1	45-A	73	VAL
1	10-A	73	VAL
1	16-A	303	VAL
1	29-A	71	GLY
1	39-A	52	PRO
1	54-A	157	VAL
1	11-A	71	GLY
1	25-A	297	VAL
1	32-A	302	GLY
1	43-A	168	PRO
1	44-A	303	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	1-A	263/263 (100%)	228 (87%)	35 (13%)	4	0
1	2-A	263/263 (100%)	232 (88%)	31 (12%)	5	0
1	3-A	263/263 (100%)	235 (89%)	28 (11%)	6	0
1	4-A	263/263 (100%)	230 (88%)	33 (12%)	4	0
1	5-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	6-A	263/263 (100%)	225 (86%)	38 (14%)	3	0
1	7-A	263/263 (100%)	231 (88%)	32 (12%)	5	0
1	8-A	263/263 (100%)	233 (89%)	30 (11%)	5	0
1	9-A	263/263 (100%)	233 (89%)	30 (11%)	5	0
1	10-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	0
1	11-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	12-A	263/263 (100%)	228 (87%)	35 (13%)	4	0
1	13-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	0
1	14-A	263/263 (100%)	228 (87%)	35 (13%)	4	0
1	15-A	263/263 (100%)	229 (87%)	34 (13%)	4	0
1	16-A	263/263 (100%)	236 (90%)	27 (10%)	7	0
1	17-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	0
1	18-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	0
1	19-A	263/263 (100%)	225 (86%)	38 (14%)	3	0
1	20-A	263/263 (100%)	219 (83%)	44 (17%)	2	0
1	21-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	22-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	23-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	24-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	25-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	26-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	27-A	263/263 (100%)	209 (80%)	54 (20%)	1	0
1	28-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	0
1	29-A	263/263 (100%)	231 (88%)	32 (12%)	5	0
1	30-A	263/263 (100%)	237 (90%)	26 (10%)	8	0
1	31-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	32-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	33-A	263/263 (100%)	225 (86%)	38 (14%)	3	0
1	34-A	263/263 (100%)	233 (89%)	30 (11%)	5	0
1	35-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	36-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	37-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	38-A	263/263 (100%)	228 (87%)	35 (13%)	4	0
1	39-A	263/263 (100%)	229 (87%)	34 (13%)	4	0
1	40-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	41-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	42-A	263/263 (100%)	234 (89%)	29 (11%)	6	0
1	43-A	263/263 (100%)	232 (88%)	31 (12%)	5	0
1	44-A	263/263 (100%)	233 (89%)	30 (11%)	5	0
1	45-A	263/263 (100%)	229 (87%)	34 (13%)	4	0
1	46-A	263/263 (100%)	238 (90%)	25 (10%)	8	0
1	47-A	263/263 (100%)	225 (86%)	38 (14%)	3	0
1	48-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	0
1	49-A	263/263 (100%)	230 (88%)	33 (12%)	4	0
1	50-A	263/263 (100%)	229 (87%)	34 (13%)	4	0
1	51-A	263/263 (100%)	240 (91%)	23 (9%)	10	1
1	52-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	0
1	53-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	54-A	263/263 (100%)	236 (90%)	27 (10%)	7	0
All	All	14202/14202 (100%)	12290 (86%)	1912 (14%)	4	0

All (1912) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	1	SER
1	1-A	12	LYS
1	1-A	27	LEU
1	1-A	45	THR
1	1-A	47	GLU
1	1-A	48	ASP
1	1-A	49	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	51	ASN
1	1-A	61	LYS
1	1-A	67	LEU
1	1-A	72	ASN
1	1-A	73	VAL
1	1-A	82	MET
1	1-A	104	VAL
1	1-A	107	GLN
1	1-A	110	GLN
1	1-A	119	ASN
1	1-A	137	LYS
1	1-A	154	TYR
1	1-A	156	CYS
1	1-A	158	SER
1	1-A	196	THR
1	1-A	198	THR
1	1-A	220	LEU
1	1-A	222	ARG
1	1-A	244	GLN
1	1-A	256	GLN
1	1-A	277	ASN
1	1-A	279	ARG
1	1-A	284	SER
1	1-A	294	PHE
1	1-A	301	SER
1	1-A	303	VAL
1	1-A	304	THR
1	1-A	305	PHE
1	2-A	5	LYS
1	2-A	6	MET
1	2-A	27	LEU
1	2-A	48	ASP
1	2-A	49	MET
1	2-A	50	LEU
1	2-A	51	ASN
1	2-A	67	LEU
1	2-A	69	GLN
1	2-A	82	MET
1	2-A	100	LYS
1	2-A	107	GLN
1	2-A	110	GLN
1	2-A	121	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	123	SER
1	2-A	128	CYS
1	2-A	153	ASP
1	2-A	154	TYR
1	2-A	165	MET
1	2-A	167	LEU
1	2-A	196	THR
1	2-A	197	ASP
1	2-A	198	THR
1	2-A	235	MET
1	2-A	256	GLN
1	2-A	284	SER
1	2-A	300	CYS
1	2-A	301	SER
1	2-A	303	VAL
1	2-A	305	PHE
1	2-A	306	GLN
1	3-A	1	SER
1	3-A	5	LYS
1	3-A	27	LEU
1	3-A	45	THR
1	3-A	50	LEU
1	3-A	51	ASN
1	3-A	58	LEU
1	3-A	60	ARG
1	3-A	82	MET
1	3-A	90	LYS
1	3-A	102	LYS
1	3-A	107	GLN
1	3-A	121	SER
1	3-A	123	SER
1	3-A	153	ASP
1	3-A	189	GLN
1	3-A	217	ARG
1	3-A	222	ARG
1	3-A	256	GLN
1	3-A	276	MET
1	3-A	277	ASN
1	3-A	279	ARG
1	3-A	298	ARG
1	3-A	300	CYS
1	3-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	304	THR
1	3-A	305	PHE
1	3-A	306	GLN
1	4-A	4	ARG
1	4-A	5	LYS
1	4-A	6	MET
1	4-A	19	GLN
1	4-A	22	CYS
1	4-A	27	LEU
1	4-A	33	ASP
1	4-A	46	SER
1	4-A	47	GLU
1	4-A	49	MET
1	4-A	50	LEU
1	4-A	58	LEU
1	4-A	60	ARG
1	4-A	62	SER
1	4-A	72	ASN
1	4-A	82	MET
1	4-A	83	GLN
1	4-A	106	ILE
1	4-A	107	GLN
1	4-A	122	PRO
1	4-A	137	LYS
1	4-A	141	LEU
1	4-A	153	ASP
1	4-A	165	MET
1	4-A	216	ASP
1	4-A	217	ARG
1	4-A	229	ASP
1	4-A	235	MET
1	4-A	276	MET
1	4-A	294	PHE
1	4-A	298	ARG
1	4-A	300	CYS
1	4-A	304	THR
1	5-A	1	SER
1	5-A	4	ARG
1	5-A	6	MET
1	5-A	27	LEU
1	5-A	45	THR
1	5-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	58	LEU
1	5-A	60	ARG
1	5-A	72	ASN
1	5-A	82	MET
1	5-A	87	LEU
1	5-A	100	LYS
1	5-A	104	VAL
1	5-A	117	CYS
1	5-A	139	SER
1	5-A	141	LEU
1	5-A	142	ASN
1	5-A	154	TYR
1	5-A	165	MET
1	5-A	166	GLU
1	5-A	189	GLN
1	5-A	190	THR
1	5-A	192	GLN
1	5-A	198	THR
1	5-A	217	ARG
1	5-A	223	PHE
1	5-A	229	ASP
1	5-A	235	MET
1	5-A	236	LYS
1	5-A	238	ASN
1	5-A	274	ASN
1	5-A	276	MET
1	5-A	294	PHE
1	5-A	298	ARG
1	5-A	304	THR
1	5-A	305	PHE
1	6-A	4	ARG
1	6-A	5	LYS
1	6-A	25	THR
1	6-A	27	LEU
1	6-A	46	SER
1	6-A	49	MET
1	6-A	50	LEU
1	6-A	53	ASN
1	6-A	55	GLU
1	6-A	59	ILE
1	6-A	72	ASN
1	6-A	82	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	87	LEU
1	6-A	90	LYS
1	6-A	107	GLN
1	6-A	110	GLN
1	6-A	123	SER
1	6-A	132	PRO
1	6-A	153	ASP
1	6-A	165	MET
1	6-A	166	GLU
1	6-A	167	LEU
1	6-A	169	THR
1	6-A	196	THR
1	6-A	214	ASN
1	6-A	216	ASP
1	6-A	217	ARG
1	6-A	222	ARG
1	6-A	227	LEU
1	6-A	232	LEU
1	6-A	235	MET
1	6-A	245	ASP
1	6-A	259	ILE
1	6-A	270	GLU
1	6-A	276	MET
1	6-A	298	ARG
1	6-A	300	CYS
1	6-A	306	GLN
1	7-A	1	SER
1	7-A	27	LEU
1	7-A	41	HIS
1	7-A	43	ILE
1	7-A	45	THR
1	7-A	46	SER
1	7-A	47	GLU
1	7-A	49	MET
1	7-A	51	ASN
1	7-A	60	ARG
1	7-A	82	MET
1	7-A	90	LYS
1	7-A	99	PRO
1	7-A	100	LYS
1	7-A	110	GLN
1	7-A	123	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	141	LEU
1	7-A	153	ASP
1	7-A	154	TYR
1	7-A	166	GLU
1	7-A	167	LEU
1	7-A	188	ARG
1	7-A	189	GLN
1	7-A	190	THR
1	7-A	198	THR
1	7-A	274	ASN
1	7-A	276	MET
1	7-A	294	PHE
1	7-A	298	ARG
1	7-A	300	CYS
1	7-A	303	VAL
1	7-A	304	THR
1	8-A	5	LYS
1	8-A	6	MET
1	8-A	27	LEU
1	8-A	47	GLU
1	8-A	50	LEU
1	8-A	59	ILE
1	8-A	60	ARG
1	8-A	65	ASN
1	8-A	72	ASN
1	8-A	100	LYS
1	8-A	107	GLN
1	8-A	108	PRO
1	8-A	110	GLN
1	8-A	121	SER
1	8-A	123	SER
1	8-A	141	LEU
1	8-A	142	ASN
1	8-A	153	ASP
1	8-A	156	CYS
1	8-A	165	MET
1	8-A	166	GLU
1	8-A	188	ARG
1	8-A	222	ARG
1	8-A	235	MET
1	8-A	236	LYS
1	8-A	257	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	276	MET
1	8-A	277	ASN
1	8-A	298	ARG
1	8-A	300	CYS
1	9-A	1	SER
1	9-A	5	LYS
1	9-A	27	LEU
1	9-A	46	SER
1	9-A	47	GLU
1	9-A	48	ASP
1	9-A	51	ASN
1	9-A	59	ILE
1	9-A	90	LYS
1	9-A	107	GLN
1	9-A	123	SER
1	9-A	141	LEU
1	9-A	155	ASP
1	9-A	156	CYS
1	9-A	165	MET
1	9-A	167	LEU
1	9-A	169	THR
1	9-A	198	THR
1	9-A	217	ARG
1	9-A	227	LEU
1	9-A	240	GLU
1	9-A	245	ASP
1	9-A	279	ARG
1	9-A	284	SER
1	9-A	286	LEU
1	9-A	294	PHE
1	9-A	298	ARG
1	9-A	300	CYS
1	9-A	303	VAL
1	9-A	305	PHE
1	10-A	1	SER
1	10-A	5	LYS
1	10-A	22	CYS
1	10-A	27	LEU
1	10-A	45	THR
1	10-A	47	GLU
1	10-A	50	LEU
1	10-A	59	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	73	VAL
1	10-A	74	GLN
1	10-A	121	SER
1	10-A	123	SER
1	10-A	141	LEU
1	10-A	154	TYR
1	10-A	166	GLU
1	10-A	167	LEU
1	10-A	168	PRO
1	10-A	169	THR
1	10-A	188	ARG
1	10-A	189	GLN
1	10-A	190	THR
1	10-A	216	ASP
1	10-A	217	ARG
1	10-A	222	ARG
1	10-A	223	PHE
1	10-A	228	ASN
1	10-A	236	LYS
1	10-A	238	ASN
1	10-A	245	ASP
1	10-A	249	ILE
1	10-A	256	GLN
1	10-A	276	MET
1	10-A	300	CYS
1	10-A	303	VAL
1	10-A	304	THR
1	10-A	305	PHE
1	10-A	306	GLN
1	11-A	4	ARG
1	11-A	5	LYS
1	11-A	6	MET
1	11-A	12	LYS
1	11-A	24	THR
1	11-A	25	THR
1	11-A	27	LEU
1	11-A	41	HIS
1	11-A	45	THR
1	11-A	47	GLU
1	11-A	49	MET
1	11-A	50	LEU
1	11-A	59	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	60	ARG
1	11-A	62	SER
1	11-A	72	ASN
1	11-A	74	GLN
1	11-A	102	LYS
1	11-A	127	GLN
1	11-A	137	LYS
1	11-A	141	LEU
1	11-A	154	TYR
1	11-A	166	GLU
1	11-A	167	LEU
1	11-A	168	PRO
1	11-A	178	GLU
1	11-A	188	ARG
1	11-A	190	THR
1	11-A	198	THR
1	11-A	217	ARG
1	11-A	236	LYS
1	11-A	259	ILE
1	11-A	276	MET
1	11-A	284	SER
1	11-A	299	GLN
1	11-A	305	PHE
1	12-A	1	SER
1	12-A	5	LYS
1	12-A	12	LYS
1	12-A	27	LEU
1	12-A	46	SER
1	12-A	47	GLU
1	12-A	50	LEU
1	12-A	53	ASN
1	12-A	58	LEU
1	12-A	59	ILE
1	12-A	72	ASN
1	12-A	81	SER
1	12-A	100	LYS
1	12-A	102	LYS
1	12-A	106	ILE
1	12-A	128	CYS
1	12-A	137	LYS
1	12-A	142	ASN
1	12-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	155	ASP
1	12-A	156	CYS
1	12-A	188	ARG
1	12-A	196	THR
1	12-A	217	ARG
1	12-A	228	ASN
1	12-A	235	MET
1	12-A	240	GLU
1	12-A	256	GLN
1	12-A	276	MET
1	12-A	279	ARG
1	12-A	284	SER
1	12-A	286	LEU
1	12-A	290	GLU
1	12-A	294	PHE
1	12-A	298	ARG
1	13-A	4	ARG
1	13-A	24	THR
1	13-A	41	HIS
1	13-A	44	CYS
1	13-A	46	SER
1	13-A	47	GLU
1	13-A	48	ASP
1	13-A	49	MET
1	13-A	50	LEU
1	13-A	53	ASN
1	13-A	60	ARG
1	13-A	62	SER
1	13-A	72	ASN
1	13-A	83	GLN
1	13-A	100	LYS
1	13-A	104	VAL
1	13-A	121	SER
1	13-A	122	PRO
1	13-A	123	SER
1	13-A	128	CYS
1	13-A	141	LEU
1	13-A	142	ASN
1	13-A	153	ASP
1	13-A	154	TYR
1	13-A	155	ASP
1	13-A	167	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	169	THR
1	13-A	188	ARG
1	13-A	192	GLN
1	13-A	217	ARG
1	13-A	228	ASN
1	13-A	229	ASP
1	13-A	236	LYS
1	13-A	245	ASP
1	13-A	276	MET
1	13-A	279	ARG
1	13-A	284	SER
1	13-A	286	LEU
1	13-A	298	ARG
1	13-A	301	SER
1	13-A	304	THR
1	14-A	1	SER
1	14-A	4	ARG
1	14-A	5	LYS
1	14-A	27	LEU
1	14-A	45	THR
1	14-A	46	SER
1	14-A	47	GLU
1	14-A	48	ASP
1	14-A	49	MET
1	14-A	50	LEU
1	14-A	53	ASN
1	14-A	72	ASN
1	14-A	73	VAL
1	14-A	83	GLN
1	14-A	100	LYS
1	14-A	102	LYS
1	14-A	123	SER
1	14-A	128	CYS
1	14-A	137	LYS
1	14-A	141	LEU
1	14-A	142	ASN
1	14-A	166	GLU
1	14-A	167	LEU
1	14-A	189	GLN
1	14-A	190	THR
1	14-A	216	ASP
1	14-A	222	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	228	ASN
1	14-A	229	ASP
1	14-A	240	GLU
1	14-A	249	ILE
1	14-A	276	MET
1	14-A	279	ARG
1	14-A	294	PHE
1	14-A	298	ARG
1	15-A	1	SER
1	15-A	5	LYS
1	15-A	24	THR
1	15-A	27	LEU
1	15-A	41	HIS
1	15-A	45	THR
1	15-A	47	GLU
1	15-A	51	ASN
1	15-A	53	ASN
1	15-A	58	LEU
1	15-A	100	LYS
1	15-A	102	LYS
1	15-A	117	CYS
1	15-A	121	SER
1	15-A	128	CYS
1	15-A	142	ASN
1	15-A	152	ILE
1	15-A	155	ASP
1	15-A	165	MET
1	15-A	169	THR
1	15-A	192	GLN
1	15-A	197	ASP
1	15-A	198	THR
1	15-A	214	ASN
1	15-A	216	ASP
1	15-A	217	ARG
1	15-A	222	ARG
1	15-A	228	ASN
1	15-A	229	ASP
1	15-A	236	LYS
1	15-A	276	MET
1	15-A	290	GLU
1	15-A	301	SER
1	15-A	305	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	1	SER
1	16-A	5	LYS
1	16-A	27	LEU
1	16-A	46	SER
1	16-A	49	MET
1	16-A	53	ASN
1	16-A	58	LEU
1	16-A	73	VAL
1	16-A	97	LYS
1	16-A	100	LYS
1	16-A	102	LYS
1	16-A	110	GLN
1	16-A	137	LYS
1	16-A	167	LEU
1	16-A	192	GLN
1	16-A	198	THR
1	16-A	214	ASN
1	16-A	217	ARG
1	16-A	229	ASP
1	16-A	276	MET
1	16-A	284	SER
1	16-A	286	LEU
1	16-A	290	GLU
1	16-A	294	PHE
1	16-A	298	ARG
1	16-A	300	CYS
1	16-A	305	PHE
1	17-A	6	MET
1	17-A	24	THR
1	17-A	27	LEU
1	17-A	41	HIS
1	17-A	49	MET
1	17-A	53	ASN
1	17-A	58	LEU
1	17-A	59	ILE
1	17-A	60	ARG
1	17-A	72	ASN
1	17-A	73	VAL
1	17-A	74	GLN
1	17-A	97	LYS
1	17-A	100	LYS
1	17-A	102	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	107	GLN
1	17-A	110	GLN
1	17-A	123	SER
1	17-A	125	VAL
1	17-A	128	CYS
1	17-A	139	SER
1	17-A	141	LEU
1	17-A	145	CYS
1	17-A	155	ASP
1	17-A	177	LEU
1	17-A	178	GLU
1	17-A	188	ARG
1	17-A	198	THR
1	17-A	216	ASP
1	17-A	229	ASP
1	17-A	232	LEU
1	17-A	236	LYS
1	17-A	240	GLU
1	17-A	276	MET
1	17-A	277	ASN
1	17-A	279	ARG
1	17-A	280	THR
1	17-A	286	LEU
1	17-A	298	ARG
1	17-A	299	GLN
1	17-A	306	GLN
1	18-A	24	THR
1	18-A	46	SER
1	18-A	48	ASP
1	18-A	49	MET
1	18-A	53	ASN
1	18-A	60	ARG
1	18-A	74	GLN
1	18-A	83	GLN
1	18-A	100	LYS
1	18-A	102	LYS
1	18-A	106	ILE
1	18-A	107	GLN
1	18-A	110	GLN
1	18-A	119	ASN
1	18-A	121	SER
1	18-A	122	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	123	SER
1	18-A	141	LEU
1	18-A	152	ILE
1	18-A	154	TYR
1	18-A	156	CYS
1	18-A	165	MET
1	18-A	169	THR
1	18-A	190	THR
1	18-A	214	ASN
1	18-A	217	ARG
1	18-A	222	ARG
1	18-A	227	LEU
1	18-A	229	ASP
1	18-A	276	MET
1	18-A	279	ARG
1	18-A	286	LEU
1	18-A	287	LEU
1	18-A	298	ARG
1	18-A	301	SER
1	18-A	303	VAL
1	18-A	306	GLN
1	19-A	1	SER
1	19-A	5	LYS
1	19-A	25	THR
1	19-A	27	LEU
1	19-A	33	ASP
1	19-A	46	SER
1	19-A	50	LEU
1	19-A	51	ASN
1	19-A	53	ASN
1	19-A	60	ARG
1	19-A	66	PHE
1	19-A	69	GLN
1	19-A	74	GLN
1	19-A	97	LYS
1	19-A	100	LYS
1	19-A	102	LYS
1	19-A	110	GLN
1	19-A	123	SER
1	19-A	125	VAL
1	19-A	127	GLN
1	19-A	155	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	166	GLU
1	19-A	167	LEU
1	19-A	168	PRO
1	19-A	189	GLN
1	19-A	190	THR
1	19-A	192	GLN
1	19-A	198	THR
1	19-A	214	ASN
1	19-A	216	ASP
1	19-A	217	ARG
1	19-A	222	ARG
1	19-A	276	MET
1	19-A	284	SER
1	19-A	286	LEU
1	19-A	287	LEU
1	19-A	299	GLN
1	19-A	300	CYS
1	20-A	5	LYS
1	20-A	6	MET
1	20-A	24	THR
1	20-A	27	LEU
1	20-A	41	HIS
1	20-A	45	THR
1	20-A	46	SER
1	20-A	49	MET
1	20-A	53	ASN
1	20-A	57	LEU
1	20-A	59	ILE
1	20-A	63	ASN
1	20-A	69	GLN
1	20-A	72	ASN
1	20-A	82	MET
1	20-A	83	GLN
1	20-A	97	LYS
1	20-A	100	LYS
1	20-A	107	GLN
1	20-A	110	GLN
1	20-A	117	CYS
1	20-A	125	VAL
1	20-A	137	LYS
1	20-A	154	TYR
1	20-A	165	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	186	VAL
1	20-A	189	GLN
1	20-A	192	GLN
1	20-A	197	ASP
1	20-A	214	ASN
1	20-A	217	ARG
1	20-A	222	ARG
1	20-A	236	LYS
1	20-A	240	GLU
1	20-A	249	ILE
1	20-A	256	GLN
1	20-A	274	ASN
1	20-A	276	MET
1	20-A	277	ASN
1	20-A	284	SER
1	20-A	287	LEU
1	20-A	299	GLN
1	20-A	300	CYS
1	20-A	306	GLN
1	21-A	1	SER
1	21-A	4	ARG
1	21-A	6	MET
1	21-A	22	CYS
1	21-A	24	THR
1	21-A	25	THR
1	21-A	27	LEU
1	21-A	34	ASP
1	21-A	41	HIS
1	21-A	46	SER
1	21-A	47	GLU
1	21-A	48	ASP
1	21-A	51	ASN
1	21-A	53	ASN
1	21-A	55	GLU
1	21-A	58	LEU
1	21-A	60	ARG
1	21-A	82	MET
1	21-A	92	ASP
1	21-A	100	LYS
1	21-A	102	LYS
1	21-A	104	VAL
1	21-A	123	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	125	VAL
1	21-A	154	TYR
1	21-A	155	ASP
1	21-A	156	CYS
1	21-A	165	MET
1	21-A	189	GLN
1	21-A	197	ASP
1	21-A	217	ARG
1	21-A	222	ARG
1	21-A	235	MET
1	21-A	236	LYS
1	21-A	244	GLN
1	21-A	270	GLU
1	21-A	276	MET
1	21-A	279	ARG
1	21-A	287	LEU
1	21-A	301	SER
1	21-A	303	VAL
1	21-A	306	GLN
1	22-A	1	SER
1	22-A	6	MET
1	22-A	19	GLN
1	22-A	22	CYS
1	22-A	24	THR
1	22-A	27	LEU
1	22-A	45	THR
1	22-A	47	GLU
1	22-A	50	LEU
1	22-A	51	ASN
1	22-A	53	ASN
1	22-A	57	LEU
1	22-A	60	ARG
1	22-A	74	GLN
1	22-A	82	MET
1	22-A	102	LYS
1	22-A	110	GLN
1	22-A	128	CYS
1	22-A	137	LYS
1	22-A	151	ASN
1	22-A	152	ILE
1	22-A	156	CYS
1	22-A	158	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	192	GLN
1	22-A	197	ASP
1	22-A	198	THR
1	22-A	216	ASP
1	22-A	236	LYS
1	22-A	256	GLN
1	22-A	270	GLU
1	22-A	276	MET
1	22-A	277	ASN
1	22-A	279	ARG
1	22-A	286	LEU
1	22-A	287	LEU
1	22-A	288	GLU
1	22-A	298	ARG
1	22-A	299	GLN
1	22-A	303	VAL
1	22-A	304	THR
1	23-A	6	MET
1	23-A	19	GLN
1	23-A	27	LEU
1	23-A	41	HIS
1	23-A	46	SER
1	23-A	47	GLU
1	23-A	48	ASP
1	23-A	51	ASN
1	23-A	53	ASN
1	23-A	59	ILE
1	23-A	60	ARG
1	23-A	67	LEU
1	23-A	72	ASN
1	23-A	73	VAL
1	23-A	74	GLN
1	23-A	90	LYS
1	23-A	97	LYS
1	23-A	102	LYS
1	23-A	107	GLN
1	23-A	152	ILE
1	23-A	153	ASP
1	23-A	155	ASP
1	23-A	158	SER
1	23-A	165	MET
1	23-A	188	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	197	ASP
1	23-A	217	ARG
1	23-A	222	ARG
1	23-A	223	PHE
1	23-A	235	MET
1	23-A	270	GLU
1	23-A	286	LEU
1	23-A	298	ARG
1	23-A	299	GLN
1	23-A	300	CYS
1	23-A	305	PHE
1	24-A	4	ARG
1	24-A	19	GLN
1	24-A	27	LEU
1	24-A	47	GLU
1	24-A	48	ASP
1	24-A	49	MET
1	24-A	53	ASN
1	24-A	55	GLU
1	24-A	57	LEU
1	24-A	60	ARG
1	24-A	67	LEU
1	24-A	82	MET
1	24-A	97	LYS
1	24-A	100	LYS
1	24-A	102	LYS
1	24-A	107	GLN
1	24-A	117	CYS
1	24-A	137	LYS
1	24-A	152	ILE
1	24-A	154	TYR
1	24-A	155	ASP
1	24-A	156	CYS
1	24-A	165	MET
1	24-A	167	LEU
1	24-A	190	THR
1	24-A	192	GLN
1	24-A	197	ASP
1	24-A	216	ASP
1	24-A	217	ARG
1	24-A	235	MET
1	24-A	236	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	259	ILE
1	24-A	280	THR
1	24-A	287	LEU
1	24-A	298	ARG
1	24-A	300	CYS
1	24-A	303	VAL
1	24-A	304	THR
1	24-A	305	PHE
1	24-A	306	GLN
1	25-A	1	SER
1	25-A	4	ARG
1	25-A	19	GLN
1	25-A	27	LEU
1	25-A	41	HIS
1	25-A	44	CYS
1	25-A	45	THR
1	25-A	47	GLU
1	25-A	51	ASN
1	25-A	53	ASN
1	25-A	55	GLU
1	25-A	57	LEU
1	25-A	59	ILE
1	25-A	81	SER
1	25-A	82	MET
1	25-A	83	GLN
1	25-A	110	GLN
1	25-A	125	VAL
1	25-A	145	CYS
1	25-A	156	CYS
1	25-A	165	MET
1	25-A	167	LEU
1	25-A	217	ARG
1	25-A	225	THR
1	25-A	227	LEU
1	25-A	235	MET
1	25-A	240	GLU
1	25-A	256	GLN
1	25-A	270	GLU
1	25-A	276	MET
1	25-A	280	THR
1	25-A	287	LEU
1	25-A	294	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	299	GLN
1	25-A	301	SER
1	25-A	303	VAL
1	25-A	304	THR
1	25-A	305	PHE
1	25-A	306	GLN
1	26-A	19	GLN
1	26-A	27	LEU
1	26-A	44	CYS
1	26-A	45	THR
1	26-A	47	GLU
1	26-A	49	MET
1	26-A	51	ASN
1	26-A	53	ASN
1	26-A	58	LEU
1	26-A	61	LYS
1	26-A	72	ASN
1	26-A	83	GLN
1	26-A	104	VAL
1	26-A	121	SER
1	26-A	122	PRO
1	26-A	128	CYS
1	26-A	140	PHE
1	26-A	141	LEU
1	26-A	155	ASP
1	26-A	156	CYS
1	26-A	166	GLU
1	26-A	192	GLN
1	26-A	198	THR
1	26-A	227	LEU
1	26-A	236	LYS
1	26-A	240	GLU
1	26-A	249	ILE
1	26-A	256	GLN
1	26-A	259	ILE
1	26-A	267	SER
1	26-A	270	GLU
1	26-A	276	MET
1	26-A	279	ARG
1	26-A	286	LEU
1	26-A	287	LEU
1	26-A	299	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	301	SER
1	26-A	303	VAL
1	26-A	306	GLN
1	27-A	4	ARG
1	27-A	21	THR
1	27-A	24	THR
1	27-A	27	LEU
1	27-A	33	ASP
1	27-A	41	HIS
1	27-A	46	SER
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET
1	27-A	50	LEU
1	27-A	53	ASN
1	27-A	57	LEU
1	27-A	58	LEU
1	27-A	60	ARG
1	27-A	67	LEU
1	27-A	81	SER
1	27-A	90	LYS
1	27-A	97	LYS
1	27-A	107	GLN
1	27-A	110	GLN
1	27-A	121	SER
1	27-A	123	SER
1	27-A	125	VAL
1	27-A	128	CYS
1	27-A	152	ILE
1	27-A	153	ASP
1	27-A	154	TYR
1	27-A	155	ASP
1	27-A	165	MET
1	27-A	166	GLU
1	27-A	167	LEU
1	27-A	169	THR
1	27-A	189	GLN
1	27-A	190	THR
1	27-A	192	GLN
1	27-A	214	ASN
1	27-A	225	THR
1	27-A	227	LEU
1	27-A	235	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	236	LYS
1	27-A	244	GLN
1	27-A	245	ASP
1	27-A	248	ASP
1	27-A	254	SER
1	27-A	276	MET
1	27-A	279	ARG
1	27-A	287	LEU
1	27-A	294	PHE
1	27-A	299	GLN
1	27-A	300	CYS
1	27-A	301	SER
1	27-A	304	THR
1	27-A	305	PHE
1	27-A	306	GLN
1	28-A	1	SER
1	28-A	12	LYS
1	28-A	24	THR
1	28-A	27	LEU
1	28-A	34	ASP
1	28-A	46	SER
1	28-A	47	GLU
1	28-A	48	ASP
1	28-A	49	MET
1	28-A	50	LEU
1	28-A	51	ASN
1	28-A	53	ASN
1	28-A	57	LEU
1	28-A	60	ARG
1	28-A	67	LEU
1	28-A	75	LEU
1	28-A	82	MET
1	28-A	87	LEU
1	28-A	90	LYS
1	28-A	92	ASP
1	28-A	125	VAL
1	28-A	141	LEU
1	28-A	152	ILE
1	28-A	154	TYR
1	28-A	155	ASP
1	28-A	158	SER
1	28-A	166	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	168	PRO
1	28-A	177	LEU
1	28-A	188	ARG
1	28-A	190	THR
1	28-A	198	THR
1	28-A	214	ASN
1	28-A	241	PRO
1	28-A	249	ILE
1	28-A	259	ILE
1	28-A	274	ASN
1	28-A	276	MET
1	28-A	279	ARG
1	28-A	287	LEU
1	28-A	294	PHE
1	28-A	300	CYS
1	28-A	304	THR
1	29-A	4	ARG
1	29-A	5	LYS
1	29-A	6	MET
1	29-A	25	THR
1	29-A	27	LEU
1	29-A	41	HIS
1	29-A	46	SER
1	29-A	47	GLU
1	29-A	49	MET
1	29-A	50	LEU
1	29-A	55	GLU
1	29-A	87	LEU
1	29-A	100	LYS
1	29-A	107	GLN
1	29-A	123	SER
1	29-A	152	ILE
1	29-A	165	MET
1	29-A	178	GLU
1	29-A	188	ARG
1	29-A	190	THR
1	29-A	192	GLN
1	29-A	197	ASP
1	29-A	214	ASN
1	29-A	236	LYS
1	29-A	240	GLU
1	29-A	256	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	276	MET
1	29-A	279	ARG
1	29-A	287	LEU
1	29-A	298	ARG
1	29-A	304	THR
1	29-A	305	PHE
1	30-A	26	THR
1	30-A	27	LEU
1	30-A	49	MET
1	30-A	50	LEU
1	30-A	53	ASN
1	30-A	57	LEU
1	30-A	67	LEU
1	30-A	87	LEU
1	30-A	108	PRO
1	30-A	119	ASN
1	30-A	153	ASP
1	30-A	154	TYR
1	30-A	165	MET
1	30-A	169	THR
1	30-A	188	ARG
1	30-A	189	GLN
1	30-A	214	ASN
1	30-A	240	GLU
1	30-A	267	SER
1	30-A	276	MET
1	30-A	279	ARG
1	30-A	287	LEU
1	30-A	298	ARG
1	30-A	299	GLN
1	30-A	301	SER
1	30-A	303	VAL
1	31-A	5	LYS
1	31-A	25	THR
1	31-A	27	LEU
1	31-A	45	THR
1	31-A	51	ASN
1	31-A	53	ASN
1	31-A	60	ARG
1	31-A	67	LEU
1	31-A	83	GLN
1	31-A	87	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	92	ASP
1	31-A	100	LYS
1	31-A	108	PRO
1	31-A	110	GLN
1	31-A	123	SER
1	31-A	132	PRO
1	31-A	142	ASN
1	31-A	154	TYR
1	31-A	156	CYS
1	31-A	188	ARG
1	31-A	190	THR
1	31-A	192	GLN
1	31-A	198	THR
1	31-A	217	ARG
1	31-A	222	ARG
1	31-A	235	MET
1	31-A	240	GLU
1	31-A	254	SER
1	31-A	256	GLN
1	31-A	259	ILE
1	31-A	274	ASN
1	31-A	276	MET
1	31-A	298	ARG
1	31-A	299	GLN
1	31-A	301	SER
1	31-A	306	GLN
1	32-A	4	ARG
1	32-A	6	MET
1	32-A	12	LYS
1	32-A	27	LEU
1	32-A	45	THR
1	32-A	51	ASN
1	32-A	53	ASN
1	32-A	57	LEU
1	32-A	60	ARG
1	32-A	62	SER
1	32-A	65	ASN
1	32-A	107	GLN
1	32-A	111	THR
1	32-A	119	ASN
1	32-A	137	LYS
1	32-A	141	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	145	CYS
1	32-A	152	ILE
1	32-A	154	TYR
1	32-A	155	ASP
1	32-A	156	CYS
1	32-A	167	LEU
1	32-A	178	GLU
1	32-A	190	THR
1	32-A	197	ASP
1	32-A	216	ASP
1	32-A	217	ARG
1	32-A	235	MET
1	32-A	236	LYS
1	32-A	240	GLU
1	32-A	249	ILE
1	32-A	256	GLN
1	32-A	276	MET
1	32-A	277	ASN
1	32-A	279	ARG
1	32-A	286	LEU
1	32-A	298	ARG
1	32-A	299	GLN
1	32-A	301	SER
1	32-A	305	PHE
1	33-A	3	PHE
1	33-A	4	ARG
1	33-A	5	LYS
1	33-A	6	MET
1	33-A	19	GLN
1	33-A	24	THR
1	33-A	27	LEU
1	33-A	45	THR
1	33-A	49	MET
1	33-A	50	LEU
1	33-A	53	ASN
1	33-A	57	LEU
1	33-A	67	LEU
1	33-A	73	VAL
1	33-A	119	ASN
1	33-A	123	SER
1	33-A	125	VAL
1	33-A	136	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	142	ASN
1	33-A	145	CYS
1	33-A	152	ILE
1	33-A	153	ASP
1	33-A	154	TYR
1	33-A	155	ASP
1	33-A	167	LEU
1	33-A	178	GLU
1	33-A	217	ARG
1	33-A	235	MET
1	33-A	249	ILE
1	33-A	256	GLN
1	33-A	276	MET
1	33-A	286	LEU
1	33-A	287	LEU
1	33-A	290	GLU
1	33-A	294	PHE
1	33-A	298	ARG
1	33-A	299	GLN
1	33-A	301	SER
1	34-A	5	LYS
1	34-A	12	LYS
1	34-A	27	LEU
1	34-A	45	THR
1	34-A	46	SER
1	34-A	49	MET
1	34-A	53	ASN
1	34-A	55	GLU
1	34-A	60	ARG
1	34-A	67	LEU
1	34-A	102	LYS
1	34-A	119	ASN
1	34-A	121	SER
1	34-A	123	SER
1	34-A	137	LYS
1	34-A	141	LEU
1	34-A	142	ASN
1	34-A	152	ILE
1	34-A	155	ASP
1	34-A	178	GLU
1	34-A	190	THR
1	34-A	197	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	235	MET
1	34-A	276	MET
1	34-A	277	ASN
1	34-A	279	ARG
1	34-A	287	LEU
1	34-A	294	PHE
1	34-A	299	GLN
1	34-A	301	SER
1	35-A	5	LYS
1	35-A	12	LYS
1	35-A	19	GLN
1	35-A	25	THR
1	35-A	26	THR
1	35-A	27	LEU
1	35-A	41	HIS
1	35-A	45	THR
1	35-A	48	ASP
1	35-A	49	MET
1	35-A	50	LEU
1	35-A	51	ASN
1	35-A	53	ASN
1	35-A	56	ASP
1	35-A	57	LEU
1	35-A	67	LEU
1	35-A	72	ASN
1	35-A	73	VAL
1	35-A	81	SER
1	35-A	100	LYS
1	35-A	107	GLN
1	35-A	123	SER
1	35-A	137	LYS
1	35-A	139	SER
1	35-A	142	ASN
1	35-A	158	SER
1	35-A	165	MET
1	35-A	186	VAL
1	35-A	189	GLN
1	35-A	192	GLN
1	35-A	223	PHE
1	35-A	270	GLU
1	35-A	274	ASN
1	35-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	277	ASN
1	35-A	294	PHE
1	35-A	298	ARG
1	35-A	299	GLN
1	35-A	303	VAL
1	35-A	304	THR
1	35-A	305	PHE
1	35-A	306	GLN
1	36-A	1	SER
1	36-A	4	ARG
1	36-A	12	LYS
1	36-A	22	CYS
1	36-A	27	LEU
1	36-A	46	SER
1	36-A	47	GLU
1	36-A	49	MET
1	36-A	53	ASN
1	36-A	59	ILE
1	36-A	60	ARG
1	36-A	69	GLN
1	36-A	73	VAL
1	36-A	75	LEU
1	36-A	119	ASN
1	36-A	137	LYS
1	36-A	140	PHE
1	36-A	141	LEU
1	36-A	152	ILE
1	36-A	155	ASP
1	36-A	165	MET
1	36-A	167	LEU
1	36-A	171	VAL
1	36-A	188	ARG
1	36-A	189	GLN
1	36-A	216	ASP
1	36-A	222	ARG
1	36-A	232	LEU
1	36-A	244	GLN
1	36-A	245	ASP
1	36-A	259	ILE
1	36-A	276	MET
1	36-A	277	ASN
1	36-A	287	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	294	PHE
1	36-A	300	CYS
1	36-A	301	SER
1	36-A	303	VAL
1	36-A	304	THR
1	37-A	4	ARG
1	37-A	12	LYS
1	37-A	27	LEU
1	37-A	45	THR
1	37-A	46	SER
1	37-A	47	GLU
1	37-A	48	ASP
1	37-A	49	MET
1	37-A	51	ASN
1	37-A	53	ASN
1	37-A	60	ARG
1	37-A	67	LEU
1	37-A	72	ASN
1	37-A	74	GLN
1	37-A	75	LEU
1	37-A	102	LYS
1	37-A	128	CYS
1	37-A	141	LEU
1	37-A	152	ILE
1	37-A	154	TYR
1	37-A	167	LEU
1	37-A	171	VAL
1	37-A	188	ARG
1	37-A	189	GLN
1	37-A	190	THR
1	37-A	196	THR
1	37-A	256	GLN
1	37-A	276	MET
1	37-A	277	ASN
1	37-A	279	ARG
1	37-A	280	THR
1	37-A	286	LEU
1	37-A	287	LEU
1	37-A	301	SER
1	37-A	304	THR
1	37-A	305	PHE
1	38-A	5	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	6	MET
1	38-A	12	LYS
1	38-A	27	LEU
1	38-A	47	GLU
1	38-A	49	MET
1	38-A	50	LEU
1	38-A	53	ASN
1	38-A	69	GLN
1	38-A	75	LEU
1	38-A	97	LYS
1	38-A	102	LYS
1	38-A	104	VAL
1	38-A	107	GLN
1	38-A	122	PRO
1	38-A	142	ASN
1	38-A	152	ILE
1	38-A	155	ASP
1	38-A	165	MET
1	38-A	189	GLN
1	38-A	190	THR
1	38-A	196	THR
1	38-A	216	ASP
1	38-A	229	ASP
1	38-A	235	MET
1	38-A	256	GLN
1	38-A	274	ASN
1	38-A	276	MET
1	38-A	279	ARG
1	38-A	286	LEU
1	38-A	294	PHE
1	38-A	298	ARG
1	38-A	301	SER
1	38-A	303	VAL
1	38-A	306	GLN
1	39-A	1	SER
1	39-A	5	LYS
1	39-A	12	LYS
1	39-A	27	LEU
1	39-A	41	HIS
1	39-A	48	ASP
1	39-A	49	MET
1	39-A	53	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	55	GLU
1	39-A	56	ASP
1	39-A	57	LEU
1	39-A	58	LEU
1	39-A	59	ILE
1	39-A	60	ARG
1	39-A	73	VAL
1	39-A	74	GLN
1	39-A	75	LEU
1	39-A	82	MET
1	39-A	102	LYS
1	39-A	123	SER
1	39-A	141	LEU
1	39-A	156	CYS
1	39-A	158	SER
1	39-A	165	MET
1	39-A	178	GLU
1	39-A	188	ARG
1	39-A	189	GLN
1	39-A	240	GLU
1	39-A	256	GLN
1	39-A	279	ARG
1	39-A	286	LEU
1	39-A	298	ARG
1	39-A	303	VAL
1	39-A	305	PHE
1	40-A	5	LYS
1	40-A	6	MET
1	40-A	12	LYS
1	40-A	24	THR
1	40-A	25	THR
1	40-A	27	LEU
1	40-A	41	HIS
1	40-A	45	THR
1	40-A	49	MET
1	40-A	53	ASN
1	40-A	56	ASP
1	40-A	57	LEU
1	40-A	60	ARG
1	40-A	82	MET
1	40-A	87	LEU
1	40-A	90	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	100	LYS
1	40-A	107	GLN
1	40-A	119	ASN
1	40-A	141	LEU
1	40-A	151	ASN
1	40-A	154	TYR
1	40-A	155	ASP
1	40-A	167	LEU
1	40-A	189	GLN
1	40-A	197	ASP
1	40-A	232	LEU
1	40-A	240	GLU
1	40-A	245	ASP
1	40-A	256	GLN
1	40-A	267	SER
1	40-A	276	MET
1	40-A	277	ASN
1	40-A	298	ARG
1	40-A	299	GLN
1	40-A	303	VAL
1	41-A	4	ARG
1	41-A	5	LYS
1	41-A	12	LYS
1	41-A	24	THR
1	41-A	25	THR
1	41-A	27	LEU
1	41-A	41	HIS
1	41-A	45	THR
1	41-A	47	GLU
1	41-A	49	MET
1	41-A	50	LEU
1	41-A	53	ASN
1	41-A	57	LEU
1	41-A	60	ARG
1	41-A	82	MET
1	41-A	97	LYS
1	41-A	107	GLN
1	41-A	111	THR
1	41-A	117	CYS
1	41-A	122	PRO
1	41-A	123	SER
1	41-A	137	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	142	ASN
1	41-A	154	TYR
1	41-A	155	ASP
1	41-A	156	CYS
1	41-A	158	SER
1	41-A	165	MET
1	41-A	167	LEU
1	41-A	190	THR
1	41-A	192	GLN
1	41-A	198	THR
1	41-A	222	ARG
1	41-A	240	GLU
1	41-A	270	GLU
1	41-A	276	MET
1	41-A	279	ARG
1	41-A	290	GLU
1	41-A	300	CYS
1	41-A	303	VAL
1	42-A	1	SER
1	42-A	24	THR
1	42-A	27	LEU
1	42-A	41	HIS
1	42-A	49	MET
1	42-A	53	ASN
1	42-A	60	ARG
1	42-A	81	SER
1	42-A	100	LYS
1	42-A	108	PRO
1	42-A	110	GLN
1	42-A	121	SER
1	42-A	122	PRO
1	42-A	123	SER
1	42-A	128	CYS
1	42-A	139	SER
1	42-A	154	TYR
1	42-A	156	CYS
1	42-A	188	ARG
1	42-A	217	ARG
1	42-A	222	ARG
1	42-A	232	LEU
1	42-A	249	ILE
1	42-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	277	ASN
1	42-A	298	ARG
1	42-A	299	GLN
1	42-A	300	CYS
1	42-A	304	THR
1	43-A	4	ARG
1	43-A	6	MET
1	43-A	12	LYS
1	43-A	27	LEU
1	43-A	41	HIS
1	43-A	47	GLU
1	43-A	48	ASP
1	43-A	51	ASN
1	43-A	53	ASN
1	43-A	57	LEU
1	43-A	60	ARG
1	43-A	100	LYS
1	43-A	107	GLN
1	43-A	119	ASN
1	43-A	137	LYS
1	43-A	153	ASP
1	43-A	158	SER
1	43-A	167	LEU
1	43-A	169	THR
1	43-A	188	ARG
1	43-A	190	THR
1	43-A	198	THR
1	43-A	232	LEU
1	43-A	244	GLN
1	43-A	276	MET
1	43-A	279	ARG
1	43-A	294	PHE
1	43-A	298	ARG
1	43-A	299	GLN
1	43-A	303	VAL
1	43-A	305	PHE
1	44-A	1	SER
1	44-A	4	ARG
1	44-A	12	LYS
1	44-A	27	LEU
1	44-A	33	ASP
1	44-A	46	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	44-A	48	ASP
1	44-A	53	ASN
1	44-A	57	LEU
1	44-A	59	ILE
1	44-A	60	ARG
1	44-A	72	ASN
1	44-A	73	VAL
1	44-A	82	MET
1	44-A	104	VAL
1	44-A	119	ASN
1	44-A	121	SER
1	44-A	123	SER
1	44-A	128	CYS
1	44-A	142	ASN
1	44-A	153	ASP
1	44-A	156	CYS
1	44-A	165	MET
1	44-A	192	GLN
1	44-A	222	ARG
1	44-A	244	GLN
1	44-A	277	ASN
1	44-A	279	ARG
1	44-A	298	ARG
1	44-A	303	VAL
1	45-A	5	LYS
1	45-A	12	LYS
1	45-A	27	LEU
1	45-A	33	ASP
1	45-A	48	ASP
1	45-A	49	MET
1	45-A	53	ASN
1	45-A	60	ARG
1	45-A	73	VAL
1	45-A	74	GLN
1	45-A	102	LYS
1	45-A	119	ASN
1	45-A	123	SER
1	45-A	128	CYS
1	45-A	141	LEU
1	45-A	142	ASN
1	45-A	153	ASP
1	45-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	45-A	158	SER
1	45-A	165	MET
1	45-A	189	GLN
1	45-A	190	THR
1	45-A	222	ARG
1	45-A	232	LEU
1	45-A	235	MET
1	45-A	240	GLU
1	45-A	244	GLN
1	45-A	276	MET
1	45-A	277	ASN
1	45-A	289	ASP
1	45-A	294	PHE
1	45-A	298	ARG
1	45-A	301	SER
1	45-A	306	GLN
1	46-A	1	SER
1	46-A	5	LYS
1	46-A	6	MET
1	46-A	27	LEU
1	46-A	48	ASP
1	46-A	50	LEU
1	46-A	53	ASN
1	46-A	62	SER
1	46-A	81	SER
1	46-A	107	GLN
1	46-A	119	ASN
1	46-A	142	ASN
1	46-A	154	TYR
1	46-A	165	MET
1	46-A	167	LEU
1	46-A	169	THR
1	46-A	188	ARG
1	46-A	198	THR
1	46-A	223	PHE
1	46-A	232	LEU
1	46-A	235	MET
1	46-A	236	LYS
1	46-A	244	GLN
1	46-A	300	CYS
1	46-A	303	VAL
1	47-A	1	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	47-A	4	ARG
1	47-A	6	MET
1	47-A	12	LYS
1	47-A	27	LEU
1	47-A	41	HIS
1	47-A	45	THR
1	47-A	47	GLU
1	47-A	49	MET
1	47-A	53	ASN
1	47-A	57	LEU
1	47-A	60	ARG
1	47-A	62	SER
1	47-A	72	ASN
1	47-A	73	VAL
1	47-A	74	GLN
1	47-A	75	LEU
1	47-A	81	SER
1	47-A	106	ILE
1	47-A	119	ASN
1	47-A	123	SER
1	47-A	130	MET
1	47-A	165	MET
1	47-A	167	LEU
1	47-A	188	ARG
1	47-A	190	THR
1	47-A	192	GLN
1	47-A	217	ARG
1	47-A	222	ARG
1	47-A	227	LEU
1	47-A	232	LEU
1	47-A	270	GLU
1	47-A	276	MET
1	47-A	279	ARG
1	47-A	288	GLU
1	47-A	294	PHE
1	47-A	303	VAL
1	47-A	304	THR
1	48-A	5	LYS
1	48-A	25	THR
1	48-A	27	LEU
1	48-A	49	MET
1	48-A	51	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	48-A	53	ASN
1	48-A	60	ARG
1	48-A	69	GLN
1	48-A	73	VAL
1	48-A	74	GLN
1	48-A	108	PRO
1	48-A	125	VAL
1	48-A	130	MET
1	48-A	136	ILE
1	48-A	142	ASN
1	48-A	153	ASP
1	48-A	155	ASP
1	48-A	158	SER
1	48-A	165	MET
1	48-A	166	GLU
1	48-A	188	ARG
1	48-A	197	ASP
1	48-A	198	THR
1	48-A	216	ASP
1	48-A	222	ARG
1	48-A	223	PHE
1	48-A	256	GLN
1	48-A	270	GLU
1	48-A	276	MET
1	48-A	277	ASN
1	48-A	279	ARG
1	48-A	294	PHE
1	48-A	300	CYS
1	48-A	303	VAL
1	48-A	305	PHE
1	48-A	306	GLN
1	49-A	1	SER
1	49-A	27	LEU
1	49-A	47	GLU
1	49-A	50	LEU
1	49-A	51	ASN
1	49-A	53	ASN
1	49-A	55	GLU
1	49-A	61	LYS
1	49-A	73	VAL
1	49-A	90	LYS
1	49-A	92	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	49-A	104	VAL
1	49-A	128	CYS
1	49-A	154	TYR
1	49-A	165	MET
1	49-A	188	ARG
1	49-A	197	ASP
1	49-A	198	THR
1	49-A	217	ARG
1	49-A	220	LEU
1	49-A	221	ASN
1	49-A	222	ARG
1	49-A	223	PHE
1	49-A	232	LEU
1	49-A	235	MET
1	49-A	249	ILE
1	49-A	276	MET
1	49-A	294	PHE
1	49-A	298	ARG
1	49-A	301	SER
1	49-A	303	VAL
1	49-A	304	THR
1	49-A	306	GLN
1	50-A	1	SER
1	50-A	6	MET
1	50-A	19	GLN
1	50-A	27	LEU
1	50-A	41	HIS
1	50-A	44	CYS
1	50-A	46	SER
1	50-A	49	MET
1	50-A	50	LEU
1	50-A	53	ASN
1	50-A	60	ARG
1	50-A	61	LYS
1	50-A	123	SER
1	50-A	125	VAL
1	50-A	132	PRO
1	50-A	141	LEU
1	50-A	142	ASN
1	50-A	156	CYS
1	50-A	167	LEU
1	50-A	221	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	50-A	222	ARG
1	50-A	223	PHE
1	50-A	229	ASP
1	50-A	232	LEU
1	50-A	235	MET
1	50-A	240	GLU
1	50-A	270	GLU
1	50-A	276	MET
1	50-A	277	ASN
1	50-A	279	ARG
1	50-A	286	LEU
1	50-A	298	ARG
1	50-A	304	THR
1	50-A	306	GLN
1	51-A	1	SER
1	51-A	6	MET
1	51-A	27	LEU
1	51-A	47	GLU
1	51-A	48	ASP
1	51-A	50	LEU
1	51-A	53	ASN
1	51-A	57	LEU
1	51-A	60	ARG
1	51-A	61	LYS
1	51-A	119	ASN
1	51-A	137	LYS
1	51-A	153	ASP
1	51-A	154	TYR
1	51-A	156	CYS
1	51-A	192	GLN
1	51-A	222	ARG
1	51-A	223	PHE
1	51-A	229	ASP
1	51-A	235	MET
1	51-A	276	MET
1	51-A	298	ARG
1	51-A	305	PHE
1	52-A	21	THR
1	52-A	22	CYS
1	52-A	27	LEU
1	52-A	46	SER
1	52-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	52-A	49	MET
1	52-A	50	LEU
1	52-A	53	ASN
1	52-A	55	GLU
1	52-A	57	LEU
1	52-A	58	LEU
1	52-A	60	ARG
1	52-A	72	ASN
1	52-A	97	LYS
1	52-A	117	CYS
1	52-A	137	LYS
1	52-A	139	SER
1	52-A	142	ASN
1	52-A	145	CYS
1	52-A	154	TYR
1	52-A	155	ASP
1	52-A	156	CYS
1	52-A	165	MET
1	52-A	178	GLU
1	52-A	197	ASP
1	52-A	216	ASP
1	52-A	217	ARG
1	52-A	227	LEU
1	52-A	229	ASP
1	52-A	245	ASP
1	52-A	279	ARG
1	52-A	286	LEU
1	52-A	290	GLU
1	52-A	298	ARG
1	52-A	301	SER
1	52-A	305	PHE
1	52-A	306	GLN
1	53-A	1	SER
1	53-A	5	LYS
1	53-A	25	THR
1	53-A	27	LEU
1	53-A	45	THR
1	53-A	47	GLU
1	53-A	49	MET
1	53-A	51	ASN
1	53-A	53	ASN
1	53-A	57	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	53-A	73	VAL
1	53-A	97	LYS
1	53-A	102	LYS
1	53-A	107	GLN
1	53-A	111	THR
1	53-A	119	ASN
1	53-A	123	SER
1	53-A	125	VAL
1	53-A	128	CYS
1	53-A	141	LEU
1	53-A	142	ASN
1	53-A	153	ASP
1	53-A	156	CYS
1	53-A	165	MET
1	53-A	190	THR
1	53-A	192	GLN
1	53-A	217	ARG
1	53-A	222	ARG
1	53-A	229	ASP
1	53-A	232	LEU
1	53-A	240	GLU
1	53-A	256	GLN
1	53-A	277	ASN
1	53-A	280	THR
1	53-A	288	GLU
1	53-A	294	PHE
1	53-A	303	VAL
1	53-A	304	THR
1	53-A	305	PHE
1	53-A	306	GLN
1	54-A	24	THR
1	54-A	27	LEU
1	54-A	45	THR
1	54-A	46	SER
1	54-A	47	GLU
1	54-A	48	ASP
1	54-A	50	LEU
1	54-A	53	ASN
1	54-A	69	GLN
1	54-A	97	LYS
1	54-A	108	PRO
1	54-A	110	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	54-A	119	ASN
1	54-A	128	CYS
1	54-A	141	LEU
1	54-A	154	TYR
1	54-A	155	ASP
1	54-A	156	CYS
1	54-A	157	VAL
1	54-A	189	GLN
1	54-A	217	ARG
1	54-A	235	MET
1	54-A	256	GLN
1	54-A	270	GLU
1	54-A	294	PHE
1	54-A	298	ARG
1	54-A	303	VAL

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (440) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	51	ASN
1	1-A	65	ASN
1	1-A	72	ASN
1	1-A	83	GLN
1	1-A	107	GLN
1	1-A	189	GLN
1	1-A	214	ASN
1	1-A	228	ASN
1	1-A	244	GLN
1	1-A	274	ASN
1	2-A	19	GLN
1	2-A	51	ASN
1	2-A	65	ASN
1	2-A	69	GLN
1	2-A	110	GLN
1	2-A	214	ASN
1	2-A	238	ASN
1	3-A	51	ASN
1	3-A	107	GLN
1	3-A	110	GLN
1	3-A	214	ASN
1	3-A	256	GLN
1	3-A	277	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	19	GLN
1	4-A	83	GLN
1	4-A	84	ASN
1	4-A	180	ASN
1	4-A	238	ASN
1	5-A	51	ASN
1	5-A	192	GLN
1	5-A	244	GLN
1	6-A	19	GLN
1	6-A	41	HIS
1	6-A	84	ASN
1	6-A	110	GLN
1	6-A	180	ASN
1	6-A	192	GLN
1	6-A	214	ASN
1	6-A	238	ASN
1	6-A	256	GLN
1	7-A	51	ASN
1	7-A	107	GLN
1	7-A	142	ASN
1	7-A	189	GLN
1	7-A	238	ASN
1	7-A	244	GLN
1	7-A	274	ASN
1	8-A	142	ASN
1	8-A	151	ASN
1	8-A	180	ASN
1	8-A	192	GLN
1	8-A	214	ASN
1	8-A	273	GLN
1	9-A	51	ASN
1	9-A	83	GLN
1	9-A	180	ASN
1	9-A	192	GLN
1	9-A	238	ASN
1	9-A	244	GLN
1	9-A	273	GLN
1	10-A	69	GLN
1	10-A	83	GLN
1	10-A	84	ASN
1	10-A	107	GLN
1	10-A	189	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	214	ASN
1	10-A	238	ASN
1	10-A	244	GLN
1	10-A	256	GLN
1	11-A	19	GLN
1	11-A	41	HIS
1	11-A	74	GLN
1	11-A	83	GLN
1	11-A	127	GLN
1	11-A	214	ASN
1	11-A	244	GLN
1	12-A	53	ASN
1	12-A	83	GLN
1	12-A	127	GLN
1	12-A	214	ASN
1	12-A	256	GLN
1	12-A	273	GLN
1	13-A	53	ASN
1	13-A	72	ASN
1	13-A	83	GLN
1	13-A	84	ASN
1	13-A	189	GLN
1	13-A	228	ASN
1	13-A	273	GLN
1	13-A	299	GLN
1	14-A	41	HIS
1	14-A	51	ASN
1	14-A	53	ASN
1	14-A	192	GLN
1	14-A	273	GLN
1	14-A	299	GLN
1	15-A	19	GLN
1	15-A	41	HIS
1	15-A	53	ASN
1	15-A	107	GLN
1	15-A	119	ASN
1	15-A	180	ASN
1	15-A	192	GLN
1	15-A	214	ASN
1	15-A	273	GLN
1	15-A	299	GLN
1	16-A	53	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	110	GLN
1	16-A	192	GLN
1	16-A	244	GLN
1	16-A	299	GLN
1	17-A	51	ASN
1	17-A	53	ASN
1	17-A	119	ASN
1	17-A	189	GLN
1	17-A	192	GLN
1	17-A	244	GLN
1	17-A	273	GLN
1	18-A	19	GLN
1	18-A	51	ASN
1	18-A	53	ASN
1	18-A	84	ASN
1	18-A	110	GLN
1	18-A	151	ASN
1	18-A	192	GLN
1	18-A	244	GLN
1	18-A	306	GLN
1	19-A	51	ASN
1	19-A	53	ASN
1	19-A	69	GLN
1	19-A	84	ASN
1	19-A	119	ASN
1	19-A	142	ASN
1	19-A	180	ASN
1	19-A	192	GLN
1	19-A	214	ASN
1	19-A	244	GLN
1	19-A	273	GLN
1	20-A	53	ASN
1	20-A	72	ASN
1	20-A	74	GLN
1	20-A	84	ASN
1	20-A	180	ASN
1	20-A	192	GLN
1	20-A	214	ASN
1	20-A	244	GLN
1	20-A	273	GLN
1	20-A	274	ASN
1	21-A	19	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	41	HIS
1	21-A	53	ASN
1	21-A	83	GLN
1	21-A	180	ASN
1	21-A	192	GLN
1	21-A	214	ASN
1	21-A	238	ASN
1	22-A	53	ASN
1	22-A	74	GLN
1	22-A	83	GLN
1	22-A	107	GLN
1	22-A	189	GLN
1	22-A	192	GLN
1	22-A	214	ASN
1	22-A	273	GLN
1	22-A	277	ASN
1	23-A	19	GLN
1	23-A	53	ASN
1	23-A	72	ASN
1	23-A	83	GLN
1	23-A	107	GLN
1	23-A	110	GLN
1	23-A	151	ASN
1	23-A	189	GLN
1	23-A	192	GLN
1	23-A	214	ASN
1	23-A	273	GLN
1	23-A	274	ASN
1	23-A	299	GLN
1	24-A	19	GLN
1	24-A	53	ASN
1	24-A	69	GLN
1	24-A	74	GLN
1	24-A	83	GLN
1	24-A	192	GLN
1	24-A	214	ASN
1	24-A	299	GLN
1	24-A	306	GLN
1	25-A	41	HIS
1	25-A	51	ASN
1	25-A	53	ASN
1	25-A	83	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	84	ASN
1	25-A	110	GLN
1	25-A	192	GLN
1	25-A	256	GLN
1	26-A	19	GLN
1	26-A	53	ASN
1	26-A	192	GLN
1	26-A	256	GLN
1	26-A	299	GLN
1	26-A	306	GLN
1	27-A	19	GLN
1	27-A	53	ASN
1	27-A	72	ASN
1	27-A	83	GLN
1	28-A	51	ASN
1	28-A	65	ASN
1	28-A	83	GLN
1	28-A	84	ASN
1	28-A	151	ASN
1	28-A	180	ASN
1	28-A	189	GLN
1	28-A	192	GLN
1	28-A	274	ASN
1	29-A	65	ASN
1	29-A	74	GLN
1	29-A	83	GLN
1	29-A	192	GLN
1	29-A	214	ASN
1	29-A	238	ASN
1	29-A	244	GLN
1	30-A	53	ASN
1	30-A	65	ASN
1	30-A	69	GLN
1	30-A	83	GLN
1	30-A	192	GLN
1	30-A	244	GLN
1	31-A	19	GLN
1	31-A	53	ASN
1	31-A	65	ASN
1	31-A	84	ASN
1	31-A	110	GLN
1	31-A	119	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	192	GLN
1	31-A	244	GLN
1	31-A	256	GLN
1	31-A	274	ASN
1	31-A	299	GLN
1	32-A	19	GLN
1	32-A	53	ASN
1	32-A	65	ASN
1	32-A	83	GLN
1	32-A	110	GLN
1	32-A	142	ASN
1	32-A	189	GLN
1	32-A	214	ASN
1	32-A	244	GLN
1	32-A	256	GLN
1	32-A	274	ASN
1	32-A	306	GLN
1	33-A	51	ASN
1	33-A	53	ASN
1	33-A	64	HIS
1	33-A	69	GLN
1	33-A	142	ASN
1	33-A	180	ASN
1	33-A	189	GLN
1	33-A	214	ASN
1	33-A	244	GLN
1	34-A	19	GLN
1	34-A	53	ASN
1	34-A	69	GLN
1	34-A	72	ASN
1	34-A	151	ASN
1	34-A	180	ASN
1	34-A	192	GLN
1	34-A	214	ASN
1	34-A	244	GLN
1	34-A	274	ASN
1	35-A	53	ASN
1	35-A	119	ASN
1	35-A	142	ASN
1	35-A	192	GLN
1	35-A	244	GLN
1	36-A	53	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	74	GLN
1	36-A	119	ASN
1	36-A	192	GLN
1	36-A	244	GLN
1	36-A	273	GLN
1	37-A	19	GLN
1	37-A	51	ASN
1	37-A	53	ASN
1	37-A	189	GLN
1	37-A	192	GLN
1	37-A	244	GLN
1	37-A	273	GLN
1	37-A	274	ASN
1	37-A	277	ASN
1	38-A	51	ASN
1	38-A	53	ASN
1	38-A	65	ASN
1	38-A	69	GLN
1	38-A	74	GLN
1	38-A	119	ASN
1	38-A	192	GLN
1	38-A	244	GLN
1	38-A	256	GLN
1	38-A	273	GLN
1	38-A	274	ASN
1	38-A	277	ASN
1	39-A	19	GLN
1	39-A	53	ASN
1	39-A	83	GLN
1	39-A	180	ASN
1	39-A	192	GLN
1	39-A	244	GLN
1	40-A	83	GLN
1	40-A	107	GLN
1	40-A	119	ASN
1	40-A	151	ASN
1	40-A	180	ASN
1	40-A	192	GLN
1	40-A	244	GLN
1	40-A	273	GLN
1	40-A	274	ASN
1	40-A	299	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	53	ASN
1	41-A	83	GLN
1	41-A	107	GLN
1	41-A	142	ASN
1	41-A	180	ASN
1	41-A	192	GLN
1	41-A	244	GLN
1	41-A	273	GLN
1	41-A	277	ASN
1	42-A	53	ASN
1	42-A	72	ASN
1	42-A	110	GLN
1	42-A	180	ASN
1	42-A	192	GLN
1	42-A	244	GLN
1	42-A	277	ASN
1	43-A	51	ASN
1	43-A	53	ASN
1	43-A	69	GLN
1	43-A	107	GLN
1	43-A	110	GLN
1	43-A	119	ASN
1	43-A	142	ASN
1	43-A	274	ASN
1	44-A	19	GLN
1	44-A	53	ASN
1	44-A	142	ASN
1	44-A	192	GLN
1	44-A	274	ASN
1	45-A	53	ASN
1	45-A	83	GLN
1	45-A	110	GLN
1	45-A	142	ASN
1	45-A	151	ASN
1	45-A	189	GLN
1	45-A	192	GLN
1	45-A	244	GLN
1	45-A	273	GLN
1	45-A	299	GLN
1	45-A	306	GLN
1	46-A	19	GLN
1	46-A	53	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	46-A	74	GLN
1	46-A	83	GLN
1	46-A	84	ASN
1	46-A	119	ASN
1	46-A	192	GLN
1	46-A	214	ASN
1	46-A	244	GLN
1	46-A	256	GLN
1	46-A	299	GLN
1	47-A	51	ASN
1	47-A	53	ASN
1	47-A	110	GLN
1	47-A	192	GLN
1	47-A	256	GLN
1	47-A	274	ASN
1	47-A	299	GLN
1	48-A	41	HIS
1	48-A	53	ASN
1	48-A	74	GLN
1	48-A	110	GLN
1	48-A	119	ASN
1	48-A	192	GLN
1	48-A	238	ASN
1	48-A	274	ASN
1	49-A	53	ASN
1	49-A	69	GLN
1	49-A	83	GLN
1	49-A	110	GLN
1	49-A	119	ASN
1	49-A	142	ASN
1	49-A	151	ASN
1	49-A	192	GLN
1	49-A	214	ASN
1	49-A	221	ASN
1	49-A	277	ASN
1	50-A	41	HIS
1	50-A	53	ASN
1	50-A	84	ASN
1	50-A	119	ASN
1	50-A	142	ASN
1	50-A	192	GLN
1	50-A	214	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	51-A	19	GLN
1	51-A	41	HIS
1	51-A	53	ASN
1	51-A	119	ASN
1	51-A	192	GLN
1	51-A	214	ASN
1	51-A	277	ASN
1	52-A	19	GLN
1	52-A	53	ASN
1	52-A	64	HIS
1	52-A	74	GLN
1	52-A	83	GLN
1	52-A	107	GLN
1	52-A	119	ASN
1	52-A	142	ASN
1	52-A	180	ASN
1	52-A	192	GLN
1	52-A	214	ASN
1	52-A	238	ASN
1	52-A	244	GLN
1	53-A	19	GLN
1	53-A	51	ASN
1	53-A	53	ASN
1	53-A	69	GLN
1	53-A	72	ASN
1	53-A	119	ASN
1	53-A	192	GLN
1	53-A	214	ASN
1	53-A	244	GLN
1	54-A	19	GLN
1	54-A	51	ASN
1	54-A	53	ASN
1	54-A	180	ASN
1	54-A	189	GLN
1	54-A	192	GLN
1	54-A	214	ASN
1	54-A	244	GLN
1	54-A	273	GLN
1	54-A	277	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 324 ligands modelled in this entry, 54 are monoatomic - leaving 270 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	18-A	1
1	27-A	1
1	31-A	1
1	38-A	1
1	40-A	1
1	20-A	1
1	39-A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
18	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.20
27	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.19
31	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.19
38	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.17
40	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.17
20	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.16
39	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.16

6 Fit of model and data [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

EDS failed to run properly - this section is therefore empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

EDS failed to run properly - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS failed to run properly - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS failed to run properly - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS failed to run properly - this section is therefore empty.