



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 31, 2022 – 10:38 AM EDT

PDB ID : 7MHN  
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 277 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 : 2.19 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](mailto: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	:	<b>FAILED</b>
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

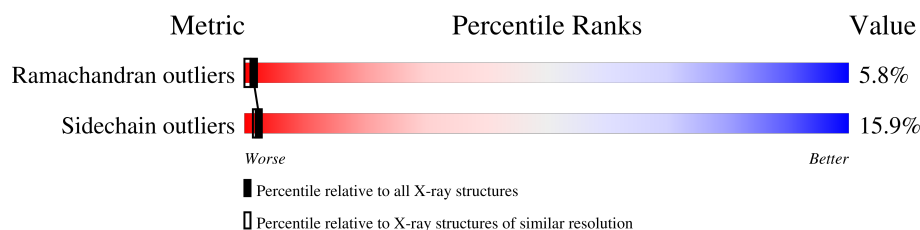
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 2.19 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	5503 (2.20-2.20)
Sidechain outliers	138945	5504 (2.20-2.20)












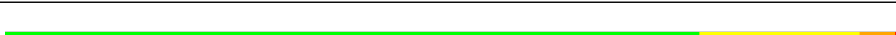

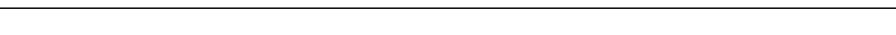
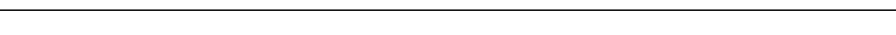
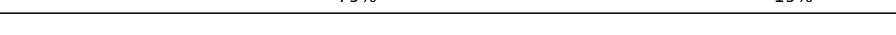

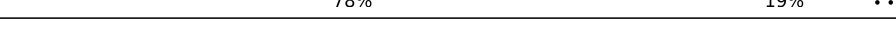







The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria 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	78% 19% .
1	10-A	306	83% 14% ..
1	11-A	306	81% 16% .
1	12-A	306	80% 16% .
1	13-A	306	80% 18% .
1	14-A	306	79% 17% .
1	15-A	306	79% 18% .
1	16-A	306	82% 16% .
1	17-A	306	80% 15% 5%

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	18-A	306	 78%19%.
1	19-A	306	 78%19%..
1	2-A	306	 80%16%..
1	20-A	306	 80%16%..
1	21-A	306	 79%17%.
1	22-A	306	 80%17%..
1	23-A	306	 81%16%..
1	24-A	306	 81%16%.
1	25-A	306	 79%18%.
1	26-A	306	 82%16%.
1	27-A	306	 76%22%.
1	28-A	306	 78%18%..
1	29-A	306	 77%18%.
1	3-A	306	 80%17%.
1	30-A	306	 79%19%.
1	31-A	306	 81%16%.
1	32-A	306	 78%19%..
1	33-A	306	 84%12%..
1	34-A	306	 79%18%..
1	35-A	306	 77%19%.
1	36-A	306	 79%18%.
1	37-A	306	 77%18%..
1	38-A	306	 82%13%..
1	39-A	306	 78%19%.
1	4-A	306	 80%17%..

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	40-A	306	 78% 19% ..
1	41-A	306	 81% 16% .
1	42-A	306	 85% 12% .
1	43-A	306	 82% 15% .
1	44-A	306	 82% 14% .
1	45-A	306	 81% 15% .
1	5-A	306	 77% 21% ..
1	6-A	306	 82% 16% ..
1	7-A	306	 82% 16% .
1	8-A	306	 79% 17% .
1	9-A	306	 80% 17% .

## 2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 213552 atoms, of which 104625 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
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	2-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	3-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	4-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	5-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	6-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	7-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	8-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	9-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	10-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	11-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	12-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	13-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	14-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	15-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	16-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

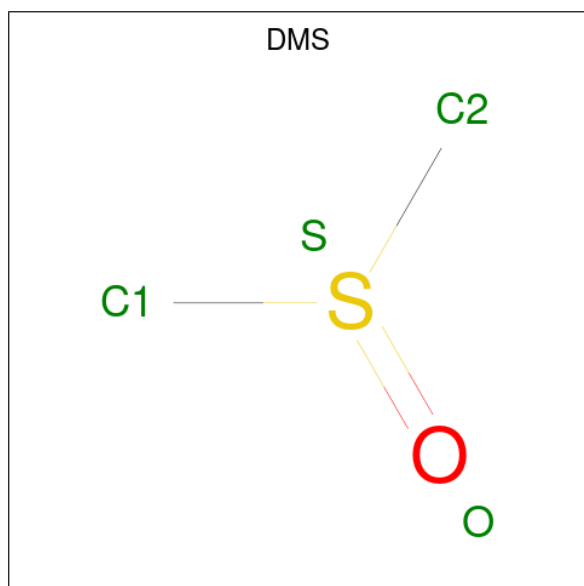
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	18-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	19-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	20-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	21-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	22-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	23-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	24-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	25-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	26-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	27-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	28-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	29-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	30-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	31-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	32-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	33-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	34-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	35-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	36-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	37-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			

*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
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	39-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	40-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	41-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	42-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	43-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	44-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	45-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			

- Molecule 2 is DIMETHYL SULFOXIDE (three-letter code: DMS) (formula: C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>OS).



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		

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
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		
2	24-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	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		
2	45-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	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		
2	21-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	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		
2	42-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	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		

- 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		
3	16-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
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
3	37-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	38-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	39-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	40-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	41-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	42-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	43-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	44-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	45-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	2-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	3-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	4-A	44	Total 44	O 44	0	0
4	5-A	47	Total 47	O 47	0	0
4	6-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	7-A	44	Total 44	O 44	0	0
4	8-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	9-A	46	Total 46	O 46	0	0
4	10-A	50	Total 50	O 50	0	0
4	11-A	50	Total 50	O 50	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
4	12-A	48	Total O 48 48	0	0
4	13-A	48	Total O 48 48	0	0
4	14-A	42	Total O 42 42	0	0
4	15-A	41	Total O 41 41	0	0
4	16-A	42	Total O 42 42	0	0
4	17-A	42	Total O 42 42	0	0
4	18-A	44	Total O 44 44	0	0
4	19-A	41	Total O 41 41	0	0
4	20-A	48	Total O 48 48	0	0
4	21-A	42	Total O 42 42	0	0
4	22-A	46	Total O 46 46	0	0
4	23-A	55	Total O 55 55	0	0
4	24-A	49	Total O 49 49	0	0
4	25-A	54	Total O 54 54	0	0
4	26-A	41	Total O 41 41	0	0
4	27-A	39	Total O 39 39	0	0
4	28-A	40	Total O 40 40	0	0
4	29-A	47	Total O 47 47	0	0
4	30-A	46	Total O 46 46	0	0
4	31-A	47	Total O 47 47	0	0
4	32-A	45	Total O 45 45	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	33-A	48	Total 48	O 48	0	0
4	34-A	43	Total 43	O 43	0	0
4	35-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	36-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	37-A	41	Total 41	O 41	0	0
4	38-A	47	Total 47	O 47	0	0
4	39-A	49	Total 49	O 49	0	0
4	40-A	48	Total 48	O 48	0	0
4	41-A	42	Total 42	O 42	0	0
4	42-A	48	Total 48	O 48	0	0
4	43-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	44-A	52	Total 52	O 52	0	0
4	45-A	39	Total 39	O 39	0	0

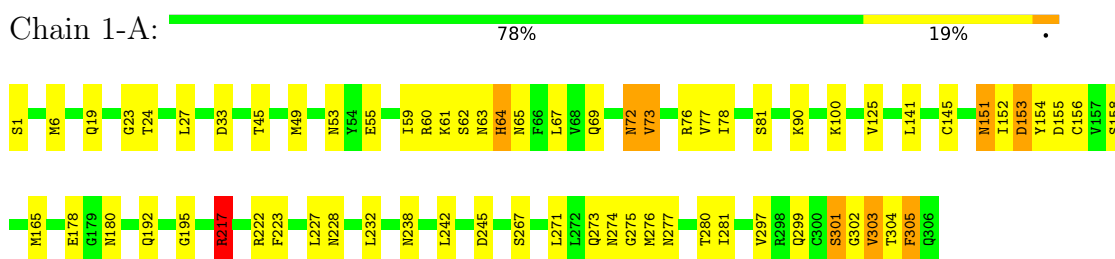


### 3 Residue-property plots

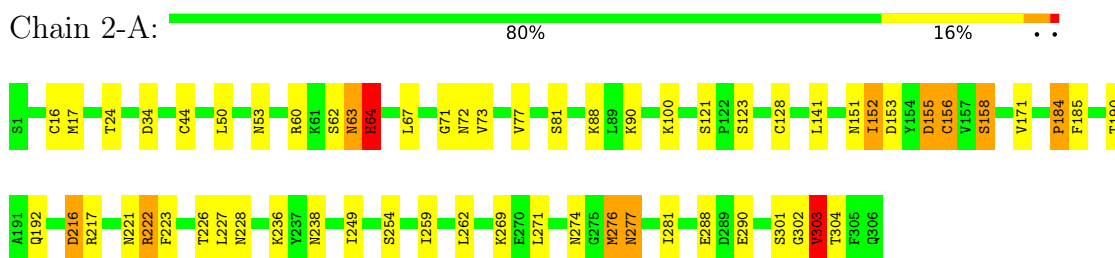
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-coded 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.

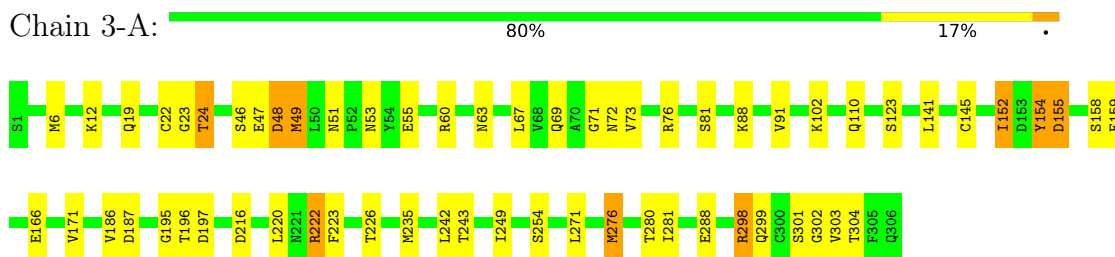
- Molecule 1: 3C-like proteinase



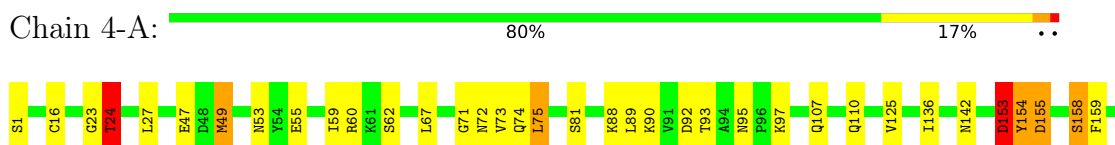
- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



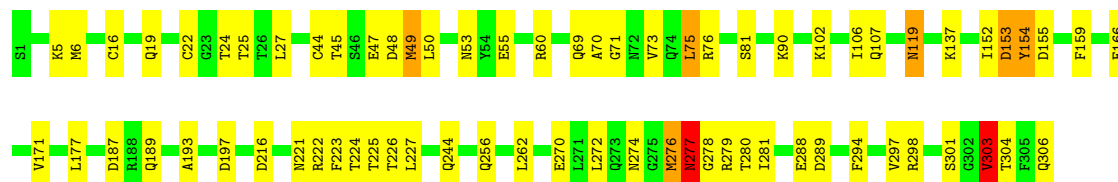
- Molecule 1: 3C-like proteinase





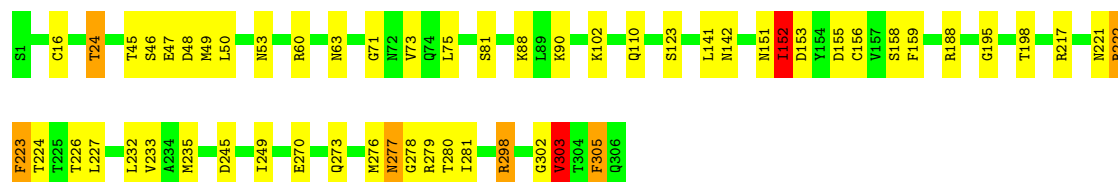
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 5-A: 77% 21% ..



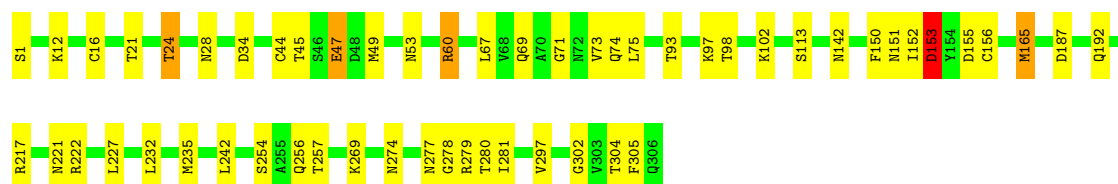
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 6-A: 82% 16% ..



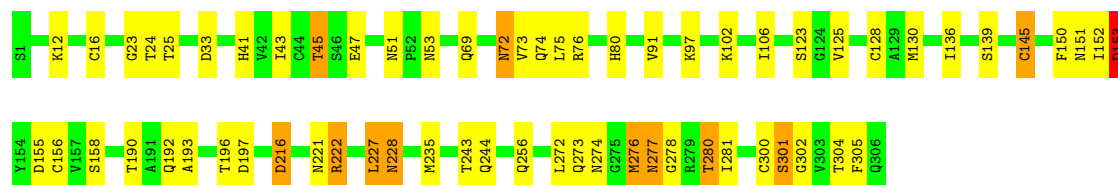
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 7-A: 82% 16% .



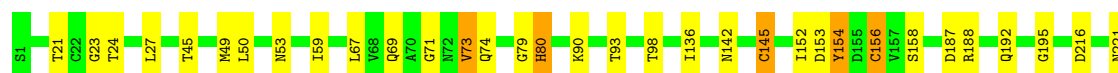
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 8-A: 79% 17% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

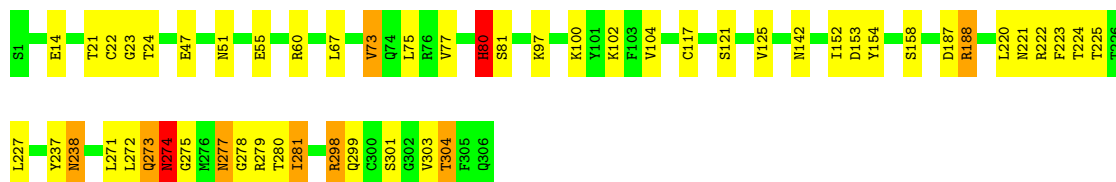
Chain 9-A: 80% 17% .





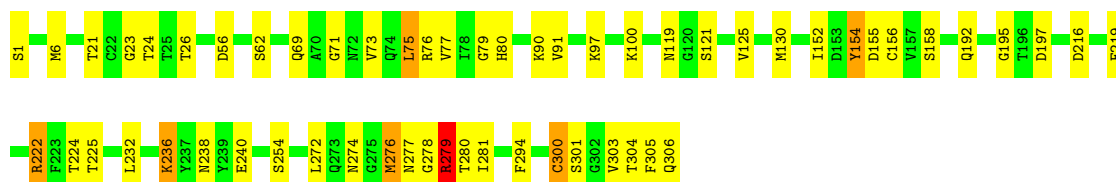
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 10-A: 83% 14% . .



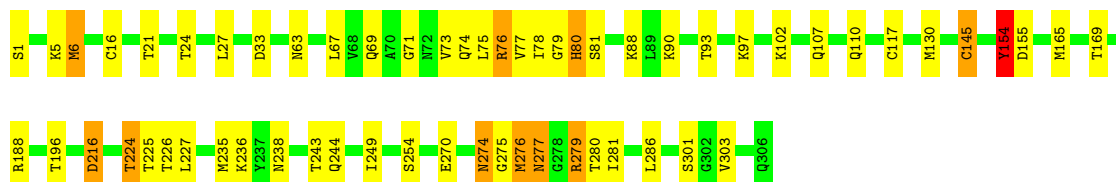
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 11-A: 81% 16% .



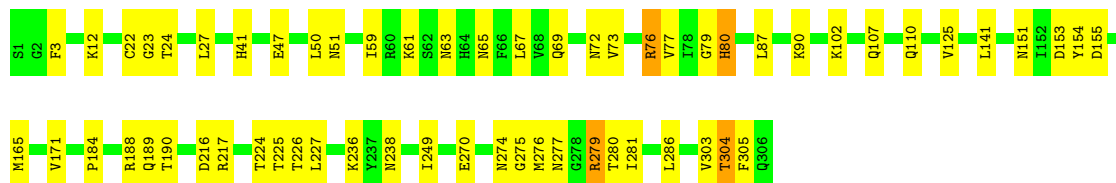
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 12-A: 80% 16% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 13-A: 80% 18% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 14-A: 79% 17% .





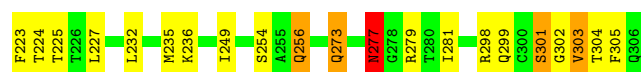
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 15-A: 79% 18% .



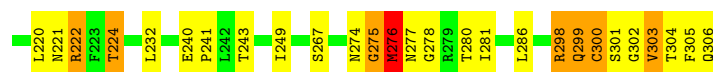
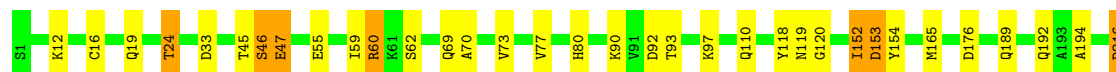
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 16-A: 82% 16% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 17-A: 80% 15% 5%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 18-A: 78% 19% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

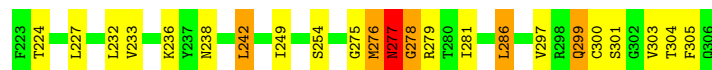
Chain 19-A: 78% 19% ..





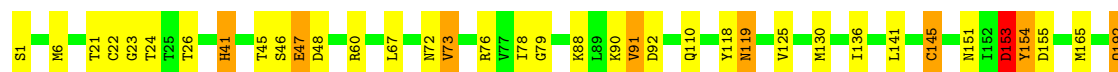
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 20-A: 80% 16% ..



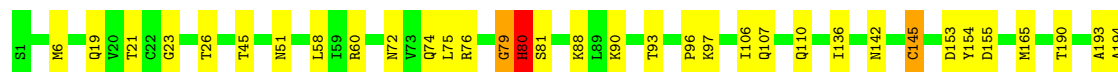
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 21-A: 79% 17% .



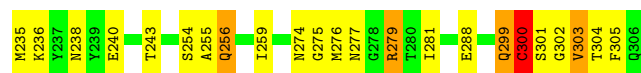
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 22-A: 80% 17% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

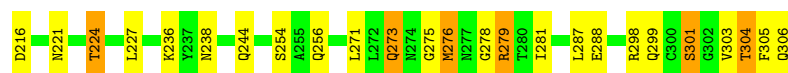
Chain 23-A: 81% 16% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

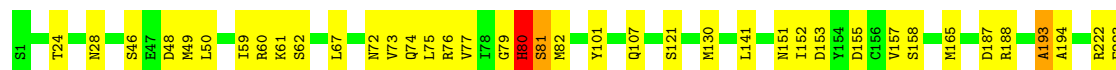
Chain 24-A: 81% 16% .





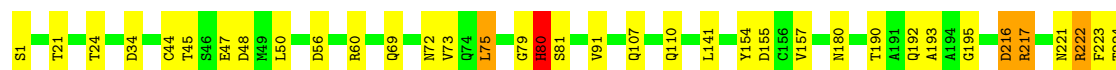
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 25-A: 79% 18% .



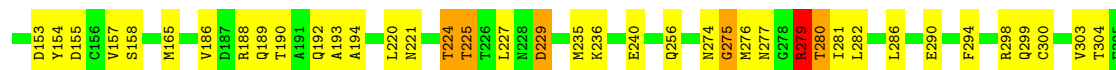
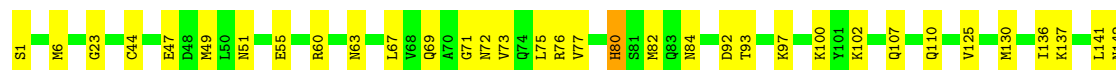
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 26-A: 82% 16% .



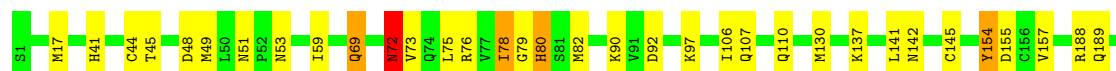
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 27-A: 76% 22% .



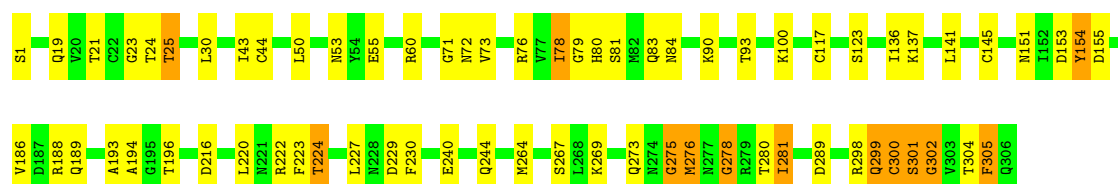
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 28-A: 78% 18% . .



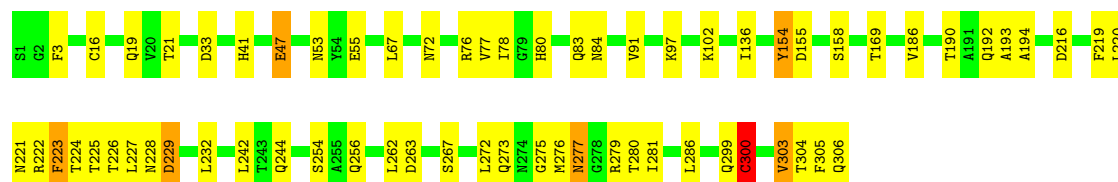
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 29-A: 77% 18% .



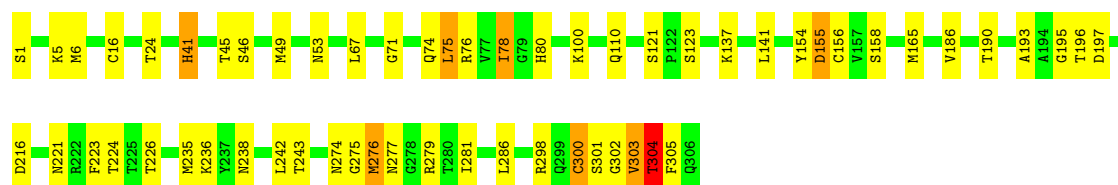
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 30-A: 79% 19% .



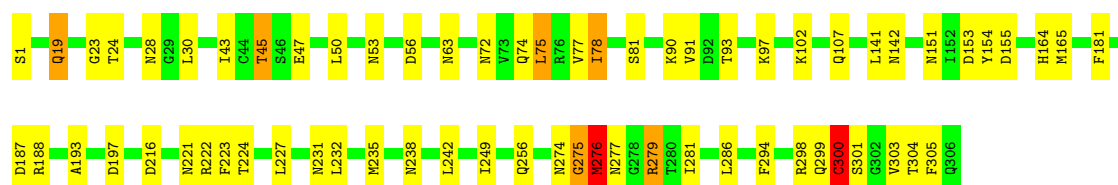
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 31-A: 81% 16% .



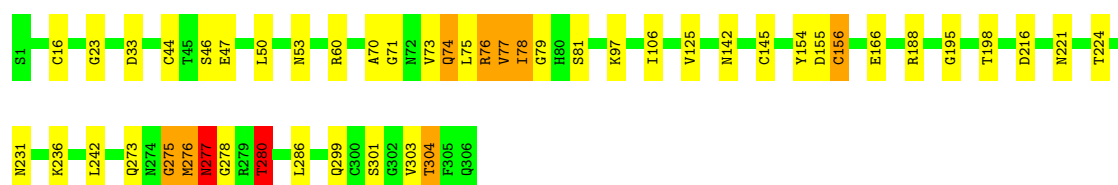
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 32-A: 78% 19% ..



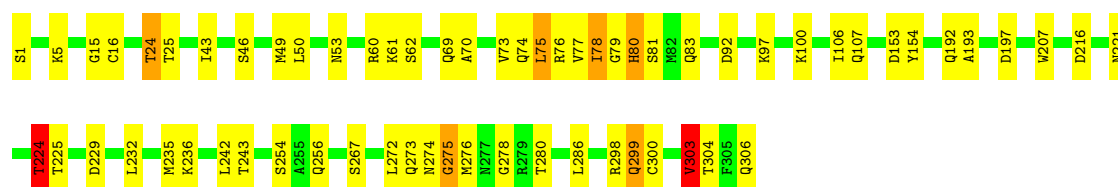
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 33-A: 84% 12% ..



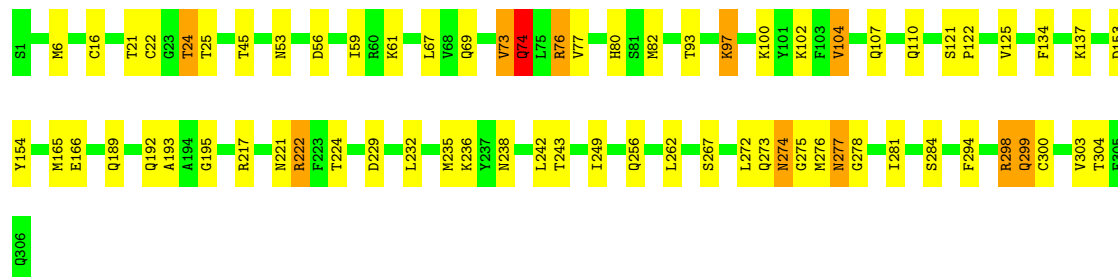
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 34-A: 79% 18% ..



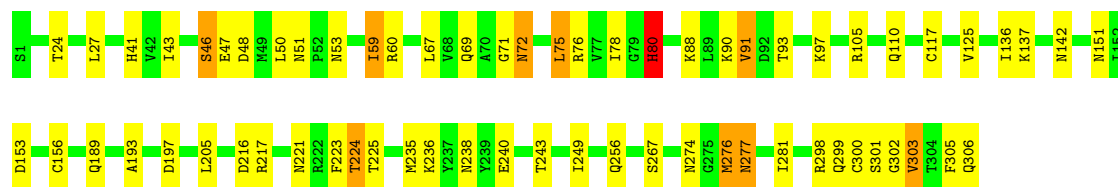
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 35-A: 77% 19%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 36-A: 79% 18%



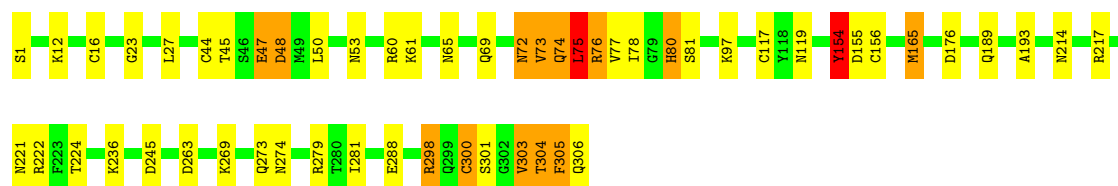
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 37-A: 77% 18%



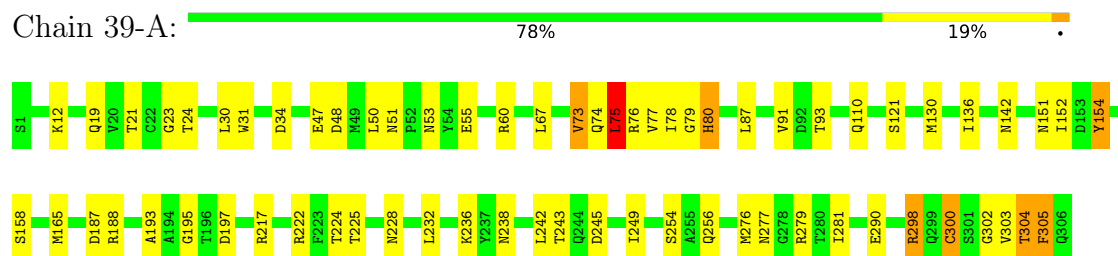
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 38-A: 82% 13%

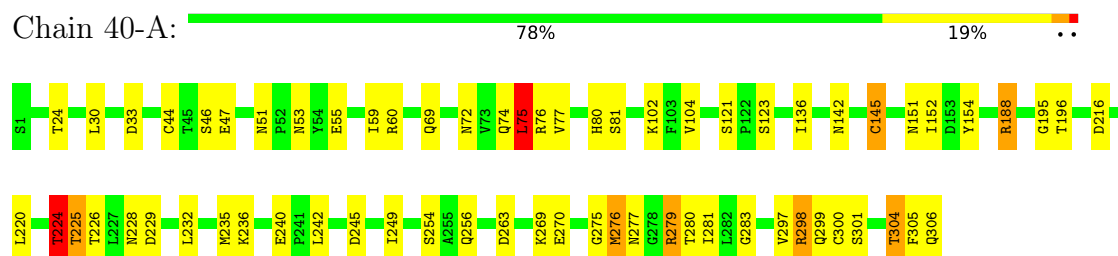




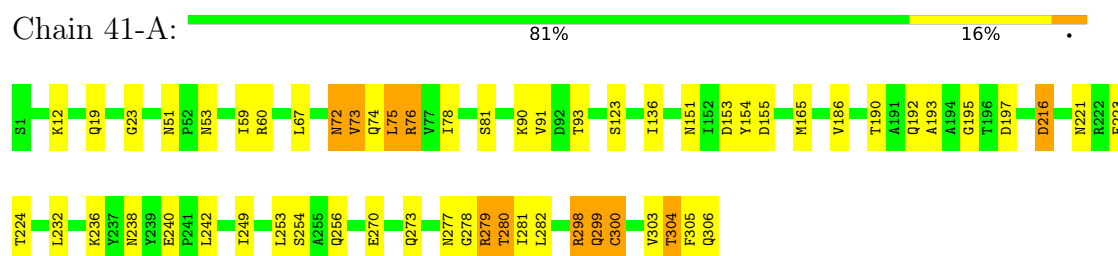
- Molecule 1: 3C-like proteinase



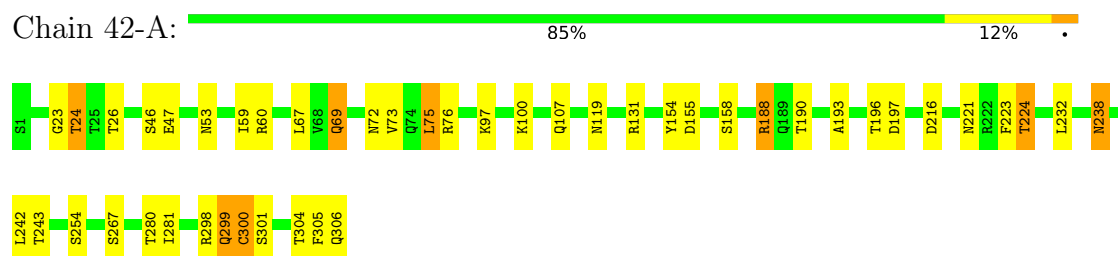
- Molecule 1: 3C-like proteinase



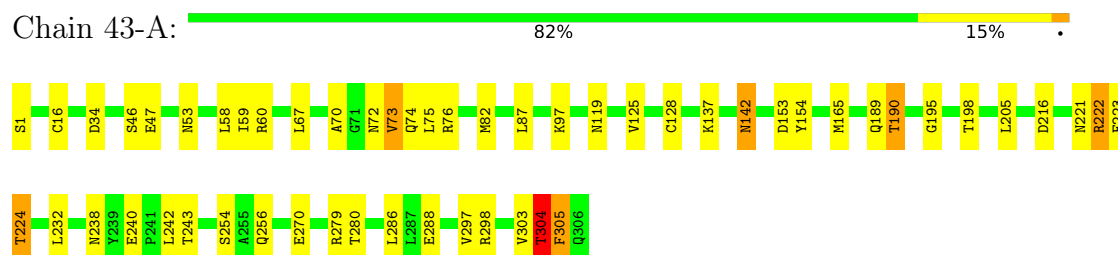
- Molecule 1: 3C-like proteinase




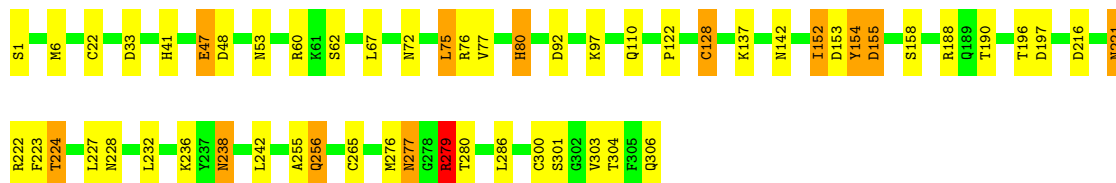
- Molecule 1: 3C-like proteinase




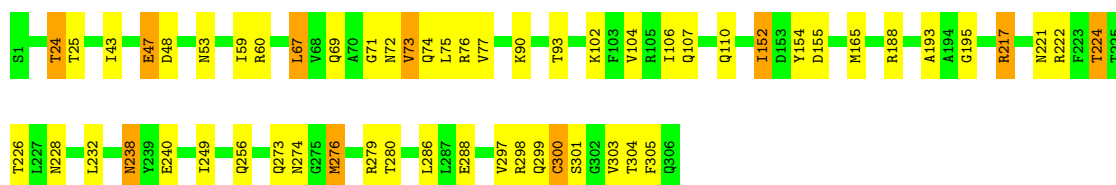
- Molecule 1: 3C-like proteinase



## • Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 44-A:  82% 14% .

## • Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 45-A:  81% 15% .

## 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, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	115.02Å 54.36Å 44.97Å 90.00° 101.50° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	48.96 – 2.19	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.3 (48.96-2.19)	Depositor
$R_{merge}$	0.29	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.03 (at 2.20Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, $R_{free}$	0.153 , 0.215	Depositor
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	27.0	Xtriage
Anisotropy	0.312	Xtriage
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.49$ , $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	213552	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	34.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 9.17% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

<sup>2</sup>Theoretical 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	0.77	3/2420 (0.1%)	0.87	3/3289 (0.1%)
1	2-A	0.77	5/2420 (0.2%)	0.81	0/3289
1	3-A	0.75	1/2420 (0.0%)	0.90	7/3289 (0.2%)
1	4-A	0.74	1/2420 (0.0%)	0.89	5/3289 (0.2%)
1	5-A	0.77	3/2420 (0.1%)	0.90	6/3289 (0.2%)
1	6-A	0.81	1/2420 (0.0%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	7-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.86	3/3289 (0.1%)
1	8-A	0.80	3/2420 (0.1%)	0.86	2/3289 (0.1%)
1	9-A	0.72	0/2420	0.84	2/3289 (0.1%)
1	10-A	0.73	3/2420 (0.1%)	0.84	1/3289 (0.0%)
1	11-A	0.81	2/2420 (0.1%)	0.89	2/3289 (0.1%)
1	12-A	0.74	3/2420 (0.1%)	0.87	4/3289 (0.1%)
1	13-A	0.72	0/2420	0.83	1/3289 (0.0%)
1	14-A	0.74	3/2420 (0.1%)	0.88	4/3289 (0.1%)
1	15-A	0.78	3/2420 (0.1%)	0.84	3/3289 (0.1%)
1	16-A	0.73	2/2420 (0.1%)	0.86	0/3289
1	17-A	0.77	4/2420 (0.2%)	0.85	3/3289 (0.1%)
1	18-A	0.76	3/2420 (0.1%)	0.86	2/3289 (0.1%)
1	19-A	0.77	3/2420 (0.1%)	0.89	1/3289 (0.0%)
1	20-A	0.77	3/2420 (0.1%)	0.87	5/3289 (0.2%)
1	21-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.87	3/3289 (0.1%)
1	22-A	0.78	1/2420 (0.0%)	0.84	3/3289 (0.1%)
1	23-A	0.80	4/2420 (0.2%)	0.87	4/3289 (0.1%)
1	24-A	0.75	2/2420 (0.1%)	0.85	0/3289
1	25-A	0.81	3/2420 (0.1%)	0.86	5/3289 (0.2%)
1	26-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.90	3/3289 (0.1%)
1	27-A	0.76	1/2420 (0.0%)	0.85	2/3289 (0.1%)
1	28-A	0.77	2/2420 (0.1%)	0.86	4/3289 (0.1%)
1	29-A	0.85	3/2420 (0.1%)	0.89	2/3289 (0.1%)
1	30-A	0.77	2/2420 (0.1%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	31-A	0.77	1/2420 (0.0%)	0.87	0/3289
1	32-A	0.75	2/2420 (0.1%)	0.84	4/3289 (0.1%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	33-A	0.77	5/2420 (0.2%)	0.86	0/3289
1	34-A	0.82	4/2420 (0.2%)	0.85	2/3289 (0.1%)
1	35-A	0.80	3/2420 (0.1%)	0.86	2/3289 (0.1%)
1	36-A	0.76	1/2420 (0.0%)	0.86	0/3289
1	37-A	0.79	2/2420 (0.1%)	0.85	0/3289
1	38-A	0.79	4/2420 (0.2%)	0.88	4/3289 (0.1%)
1	39-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.89	7/3289 (0.2%)
1	40-A	0.73	2/2420 (0.1%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	41-A	0.72	0/2420	0.82	2/3289 (0.1%)
1	42-A	0.71	0/2420	0.79	1/3289 (0.0%)
1	43-A	0.74	1/2420 (0.0%)	0.83	0/3289
1	44-A	0.79	2/2420 (0.1%)	0.83	1/3289 (0.0%)
1	45-A	0.74	0/2420	0.84	2/3289 (0.1%)
All	All	0.77	101/108900 (0.1%)	0.86	108/148005 (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	7
1	2-A	0	9
1	3-A	0	6
1	4-A	0	10
1	5-A	0	5
1	6-A	0	9
1	7-A	0	8
1	8-A	0	11
1	9-A	0	8
1	10-A	0	11
1	11-A	0	8
1	12-A	0	8
1	13-A	0	5
1	14-A	0	7
1	15-A	0	9
1	16-A	0	6
1	17-A	0	13
1	18-A	0	10
1	19-A	0	10
1	20-A	0	10
1	21-A	0	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	22-A	0	6
1	23-A	0	8
1	24-A	0	4
1	25-A	0	10
1	26-A	0	12
1	27-A	0	10
1	28-A	0	14
1	29-A	0	10
1	30-A	0	9
1	31-A	0	11
1	32-A	0	9
1	33-A	0	9
1	34-A	0	8
1	35-A	0	13
1	36-A	0	11
1	37-A	0	9
1	38-A	0	4
1	39-A	0	4
1	40-A	0	12
1	41-A	0	10
1	42-A	0	5
1	43-A	0	4
1	44-A	0	11
1	45-A	0	10
All	All	0	391

All (101) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	29-A	145	CYS	CB-SG	13.56	2.05	1.82
1	44-A	128	CYS	CB-SG	-13.36	1.59	1.82
1	8-A	145	CYS	CB-SG	12.69	2.03	1.82
1	37-A	156	CYS	CB-SG	12.57	2.03	1.82
1	8-A	156	CYS	CB-SG	-10.76	1.64	1.82
1	18-A	145	CYS	CB-SG	-8.63	1.67	1.82
1	15-A	16	CYS	CB-SG	-8.36	1.68	1.82
1	35-A	104	VAL	CB-CG1	-8.34	1.35	1.52
1	11-A	300	CYS	CB-SG	-8.29	1.68	1.82
1	29-A	44	CYS	CB-SG	-8.23	1.68	1.82
1	25-A	300	CYS	CB-SG	8.17	1.96	1.82
1	7-A	156	CYS	CB-SG	7.94	1.95	1.82
1	38-A	300	CYS	CB-SG	7.92	1.95	1.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	3-A	145	CYS	CB-SG	7.56	1.95	1.82
1	7-A	47	GLU	CB-CG	7.47	1.66	1.52
1	39-A	300	CYS	CB-SG	7.45	1.95	1.82
1	25-A	288	GLU	CG-CD	7.39	1.63	1.51
1	2-A	16	CYS	CB-SG	-7.30	1.69	1.82
1	17-A	165	MET	CB-CG	7.28	1.74	1.51
1	23-A	156	CYS	CB-SG	-7.22	1.70	1.82
1	25-A	288	GLU	CB-CG	7.21	1.65	1.52
1	17-A	300	CYS	CB-SG	7.15	1.94	1.82
1	5-A	166	GLU	CG-CD	7.13	1.62	1.51
1	6-A	156	CYS	CB-SG	7.09	1.94	1.82
1	21-A	145	CYS	CB-SG	7.08	1.94	1.82
1	27-A	290	GLU	CB-CG	7.06	1.65	1.52
1	7-A	16	CYS	CB-SG	-6.95	1.70	1.82
1	22-A	145	CYS	CB-SG	-6.88	1.70	1.82
1	32-A	300	CYS	CB-SG	6.86	1.94	1.82
1	20-A	145	CYS	CB-SG	6.79	1.93	1.82
1	38-A	117	CYS	CB-SG	-6.58	1.71	1.82
1	34-A	16	CYS	CB-SG	-6.55	1.71	1.82
1	12-A	16	CYS	CB-SG	-6.49	1.71	1.82
1	15-A	166	GLU	CB-CG	6.47	1.64	1.52
1	7-A	47	GLU	CG-CD	6.41	1.61	1.51
1	35-A	16	CYS	CB-SG	-6.38	1.71	1.82
1	20-A	300	CYS	CB-SG	6.33	1.93	1.82
1	5-A	16	CYS	CB-SG	-6.27	1.71	1.82
1	19-A	300	CYS	CB-SG	6.26	1.92	1.82
1	4-A	16	CYS	CB-SG	-6.24	1.71	1.82
1	29-A	117	CYS	CB-SG	-6.22	1.71	1.82
1	36-A	117	CYS	CB-SG	-6.21	1.71	1.82
1	34-A	300	CYS	CB-SG	6.20	1.92	1.82
1	28-A	145	CYS	CB-SG	-6.18	1.71	1.82
1	23-A	118	TYR	CD2-CE2	-6.15	1.30	1.39
1	33-A	44	CYS	CB-SG	-6.10	1.71	1.82
1	33-A	156	CYS	CB-SG	-6.09	1.72	1.82
1	14-A	265	CYS	CB-SG	-6.06	1.72	1.82
1	18-A	156	CYS	CB-SG	-5.99	1.72	1.81
1	35-A	165	MET	CB-CG	5.96	1.70	1.51
1	2-A	171	VAL	CB-CG2	-5.95	1.40	1.52
1	17-A	16	CYS	CB-SG	-5.89	1.72	1.81
1	14-A	16	CYS	CB-SG	-5.87	1.72	1.81
1	18-A	16	CYS	CB-SG	-5.86	1.72	1.81
1	33-A	145	CYS	CB-SG	-5.85	1.72	1.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	40-A	145	CYS	CB-SG	5.79	1.92	1.82
1	8-A	16	CYS	CB-SG	-5.79	1.72	1.81
1	43-A	16	CYS	CB-SG	-5.78	1.72	1.81
1	12-A	117	CYS	CB-SG	-5.70	1.72	1.81
1	26-A	44	CYS	CB-SG	-5.61	1.72	1.81
1	14-A	145	CYS	CB-SG	5.61	1.91	1.82
1	39-A	290	GLU	CB-CG	5.57	1.62	1.52
1	19-A	16	CYS	CB-SG	-5.57	1.72	1.81
1	24-A	166	GLU	CG-CD	5.55	1.60	1.51
1	23-A	300	CYS	CB-SG	5.52	1.91	1.82
1	21-A	153	ASP	CA-CB	-5.51	1.41	1.53
1	44-A	265	CYS	CB-SG	-5.51	1.72	1.81
1	16-A	156	CYS	CB-SG	5.47	1.91	1.82
1	1-A	145	CYS	CB-SG	5.46	1.91	1.82
1	19-A	265	CYS	CB-SG	-5.46	1.73	1.81
1	31-A	16	CYS	CB-SG	-5.44	1.73	1.81
1	30-A	47	GLU	CB-CG	5.42	1.62	1.52
1	33-A	16	CYS	CB-SG	-5.38	1.73	1.81
1	5-A	166	GLU	CB-CG	5.36	1.62	1.52
1	34-A	207	TRP	CB-CG	-5.34	1.40	1.50
1	23-A	288	GLU	CB-CG	5.33	1.62	1.52
1	34-A	299	GLN	CB-CG	5.33	1.67	1.52
1	38-A	16	CYS	CB-SG	-5.32	1.73	1.81
1	12-A	145	CYS	CB-SG	-5.27	1.73	1.81
1	10-A	117	CYS	CB-SG	-5.26	1.73	1.81
1	20-A	107	GLN	CG-CD	5.22	1.63	1.51
1	38-A	44	CYS	CB-SG	-5.21	1.73	1.81
1	28-A	44	CYS	CB-SG	-5.21	1.73	1.81
1	1-A	178	GLU	CB-CG	5.20	1.62	1.52
1	11-A	130	MET	CG-SD	-5.20	1.67	1.81
1	33-A	166	GLU	CG-CD	5.19	1.59	1.51
1	2-A	44	CYS	CB-SG	-5.16	1.73	1.81
1	10-A	47	GLU	CG-CD	5.14	1.59	1.51
1	24-A	55	GLU	CB-CG	5.14	1.61	1.52
1	30-A	16	CYS	CB-SG	-5.14	1.73	1.81
1	40-A	44	CYS	CB-SG	-5.13	1.73	1.81
1	26-A	107	GLN	CG-CD	5.12	1.62	1.51
1	2-A	128	CYS	CB-SG	-5.11	1.73	1.81
1	32-A	19	GLN	CG-CD	5.09	1.62	1.51
1	10-A	153	ASP	CA-CB	-5.09	1.42	1.53
1	1-A	165	MET	CB-CG	5.03	1.67	1.51
1	37-A	207	TRP	CB-CG	-5.02	1.41	1.50

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	16-A	145	CYS	CB-SG	5.01	1.90	1.82
1	15-A	300	CYS	CB-SG	5.01	1.90	1.82
1	17-A	47	GLU	CB-CG	5.01	1.61	1.52
1	2-A	290	GLU	CB-CG	5.00	1.61	1.52

All (108) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	4-A	155	ASP	CB-CG-OD2	-9.87	109.42	118.30
1	26-A	305	PHE	CB-CG-CD1	8.76	126.93	120.80
1	18-A	67	LEU	CA-CB-CG	7.82	133.28	115.30
1	14-A	300	CYS	CA-CB-SG	-7.47	100.55	114.00
1	3-A	155	ASP	CB-CG-OD2	-7.42	111.63	118.30
1	30-A	300	CYS	CA-CB-SG	7.31	127.17	114.00
1	39-A	305	PHE	CB-CG-CD2	7.29	125.90	120.80
1	40-A	300	CYS	CA-CB-SG	7.20	126.95	114.00
1	45-A	67	LEU	CA-CB-CG	7.18	131.81	115.30
1	45-A	300	CYS	CA-CB-SG	-6.92	101.54	114.00
1	20-A	17	MET	CG-SD-CE	6.89	111.23	100.20
1	25-A	305	PHE	CB-CG-CD1	6.81	125.57	120.80
1	4-A	153	ASP	CB-CG-OD1	-6.80	112.18	118.30
1	12-A	6	MET	CA-CB-CG	6.78	124.83	113.30
1	38-A	165	MET	CA-CB-CG	6.77	124.81	113.30
1	9-A	145	CYS	CA-CB-SG	6.69	126.05	114.00
1	4-A	155	ASP	CB-CG-OD1	6.61	124.25	118.30
1	28-A	229	ASP	CB-CG-OD1	6.52	124.17	118.30
1	8-A	145	CYS	CA-CB-SG	6.36	125.45	114.00
1	23-A	17	MET	CG-SD-CE	6.30	110.28	100.20
1	38-A	154	TYR	CB-CG-CD1	6.28	124.77	121.00
1	12-A	286	LEU	CA-CB-CG	6.21	129.57	115.30
1	5-A	75	LEU	CA-CB-CG	6.18	129.51	115.30
1	22-A	262	LEU	CA-CB-CG	-6.14	101.18	115.30
1	5-A	153	ASP	CB-CG-OD1	-6.09	112.82	118.30
1	26-A	305	PHE	CB-CG-CD2	-6.08	116.54	120.80
1	39-A	197	ASP	CB-CG-OD1	6.06	123.75	118.30
1	17-A	153	ASP	CB-CG-OD2	6.06	123.75	118.30
1	5-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.98	123.68	118.30
1	20-A	165	MET	CA-CB-CG	5.97	123.44	113.30
1	12-A	6	MET	CG-SD-CE	-5.93	90.70	100.20
1	34-A	303	VAL	CG1-CB-CG2	-5.93	101.40	110.90
1	35-A	22	CYS	CA-CB-SG	5.91	124.63	114.00
1	1-A	217	ARG	NE-CZ-NH1	5.87	123.23	120.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	23-A	155	ASP	CB-CG-OD1	5.83	123.55	118.30
1	19-A	165	MET	CG-SD-CE	5.80	109.48	100.20
1	9-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.78	123.50	118.30
1	3-A	145	CYS	CA-CB-SG	5.77	124.39	114.00
1	18-A	165	MET	CB-CG-SD	5.74	129.61	112.40
1	39-A	130	MET	CG-SD-CE	-5.71	91.06	100.20
1	22-A	300	CYS	CA-CB-SG	5.71	124.28	114.00
1	4-A	49	MET	CG-SD-CE	5.71	109.33	100.20
1	21-A	286	LEU	CB-CG-CD2	-5.70	101.32	111.00
1	29-A	229	ASP	CB-CG-OD1	5.68	123.41	118.30
1	20-A	286	LEU	CB-CG-CD2	5.66	120.62	111.00
1	20-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.65	128.30	115.30
1	39-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-5.65	113.22	118.30
1	3-A	24	THR	CA-CB-CG2	-5.63	104.52	112.40
1	28-A	17	MET	CG-SD-CE	5.62	109.19	100.20
1	5-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-5.61	113.25	118.30
1	17-A	176	ASP	CB-CG-OD1	5.61	123.35	118.30
1	23-A	217	ARG	NE-CZ-NH1	5.60	123.10	120.30
1	4-A	67	LEU	CA-CB-CG	5.59	128.17	115.30
1	23-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.56	123.31	118.30
1	12-A	130	MET	CG-SD-CE	5.50	109.01	100.20
1	3-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.50	123.25	118.30
1	42-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.44	123.20	118.30
1	17-A	276	MET	CA-CB-CG	5.43	122.54	113.30
1	3-A	6	MET	CA-CB-CG	5.43	122.53	113.30
1	38-A	176	ASP	CB-CG-OD2	5.42	123.18	118.30
1	15-A	300	CYS	CA-CB-SG	5.41	123.74	114.00
1	5-A	276	MET	CG-SD-CE	5.39	108.82	100.20
1	10-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.39	123.15	118.30
1	7-A	49	MET	CA-CB-CG	5.38	122.44	113.30
1	39-A	67	LEU	CA-CB-CG	5.37	127.64	115.30
1	14-A	197	ASP	CB-CG-OD2	-5.35	113.49	118.30
1	34-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.34	123.11	118.30
1	38-A	156	CYS	CA-CB-SG	5.34	123.61	114.00
1	8-A	153	ASP	CB-CG-OD2	-5.30	113.53	118.30
1	27-A	82	MET	CG-SD-CE	5.29	108.66	100.20
1	1-A	165	MET	CB-CG-SD	5.27	128.21	112.40
1	5-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.27	123.04	118.30
1	14-A	67	LEU	CA-CB-CG	5.26	127.40	115.30
1	25-A	300	CYS	CA-CB-SG	5.26	123.46	114.00
1	21-A	165	MET	CB-CG-SD	-5.25	96.64	112.40
1	20-A	145	CYS	CA-CB-SG	5.24	123.43	114.00

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	41-A	153	ASP	CB-CG-OD2	5.23	123.00	118.30
1	3-A	154	TYR	CA-CB-CG	5.22	123.32	113.40
1	32-A	276	MET	CA-CB-CG	5.21	122.16	113.30
1	29-A	289	ASP	CB-CG-OD2	-5.20	113.62	118.30
1	7-A	153	ASP	N-CA-CB	-5.20	101.25	110.60
1	26-A	34	ASP	CB-CG-OD1	5.19	122.97	118.30
1	1-A	153	ASP	CB-CG-OD2	5.18	122.96	118.30
1	25-A	305	PHE	CB-CG-CD2	-5.17	117.18	120.80
1	25-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.17	122.95	118.30
1	22-A	217	ARG	NE-CZ-NH1	5.17	122.88	120.30
1	7-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.95	118.30
1	35-A	235	MET	CB-CG-SD	5.16	127.86	112.40
1	39-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.94	118.30
1	11-A	56	ASP	CB-CG-OD1	5.14	122.93	118.30
1	44-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.14	122.93	118.30
1	13-A	165	MET	CA-CB-CG	5.14	122.04	113.30
1	41-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.14	122.92	118.30
1	32-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.12	122.91	118.30
1	15-A	130	MET	CG-SD-CE	-5.12	92.00	100.20
1	32-A	197	ASP	CB-CG-OD2	5.10	122.89	118.30
1	27-A	82	MET	CA-CB-CG	5.10	121.97	113.30
1	14-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.09	122.88	118.30
1	28-A	276	MET	CG-SD-CE	5.09	108.34	100.20
1	28-A	154	TYR	CB-CA-C	5.08	120.57	110.40
1	32-A	300	CYS	CA-CB-SG	-5.07	104.88	114.00
1	39-A	34	ASP	CB-CG-OD2	5.07	122.86	118.30
1	11-A	130	MET	CA-CB-CG	-5.06	104.70	113.30
1	25-A	153	ASP	CB-CG-OD1	5.05	122.85	118.30
1	3-A	276	MET	CG-SD-CE	5.05	108.27	100.20
1	6-A	16	CYS	CA-CB-SG	5.04	123.08	114.00
1	15-A	156	CYS	CA-CB-SG	-5.04	104.93	114.00
1	21-A	197	ASP	CB-CG-OD1	5.03	122.83	118.30

There are no chirality outliers.

All (391) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	151	ASN	Peptide
1	1-A	195	GLY	Peptide
1	1-A	217	ARG	Sidechain
1	1-A	275	GLY	Peptide
1	1-A	303	VAL	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	72	ASN	Peptide
1	1-A	73	VAL	Peptide
1	10-A	188	ARG	Sidechain
1	10-A	220	LEU	Peptide
1	10-A	222	ARG	Peptide
1	10-A	237	TYR	Peptide
1	10-A	238	ASN	Peptide
1	10-A	272	LEU	Peptide
1	10-A	273	GLN	Peptide
1	10-A	274	ASN	Peptide
1	10-A	298	ARG	Sidechain
1	10-A	60	ARG	Sidechain
1	10-A	80	HIS	Peptide
1	11-A	21	THR	Peptide
1	11-A	216	ASP	Peptide
1	11-A	222	ARG	Peptide
1	11-A	274	ASN	Peptide
1	11-A	276	MET	Peptide
1	11-A	279	ARG	Peptide
1	11-A	75	LEU	Peptide
1	11-A	77	VAL	Peptide
1	12-A	154	TYR	Peptide
1	12-A	216	ASP	Peptide
1	12-A	277	ASN	Peptide
1	12-A	5	LYS	Peptide
1	12-A	75	LEU	Peptide
1	12-A	76	ARG	Sidechain
1	12-A	77	VAL	Peptide
1	12-A	80	HIS	Peptide
1	13-A	184	PRO	Peptide
1	13-A	22	CYS	Peptide
1	13-A	61	LYS	Peptide
1	13-A	69	GLN	Peptide
1	13-A	80	HIS	Peptide
1	14-A	152	ILE	Peptide
1	14-A	181	PHE	Peptide
1	14-A	70	ALA	Peptide
1	14-A	71	GLY	Peptide
1	14-A	78	ILE	Peptide
1	14-A	79	GLY	Peptide
1	14-A	80	HIS	Peptide
1	15-A	153	ASP	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	15-A	220	LEU	Peptide
1	15-A	256	GLN	Peptide
1	15-A	279	ARG	Peptide
1	15-A	302	GLY	Peptide
1	15-A	75	LEU	Peptide
1	15-A	78	ILE	Peptide
1	15-A	79	GLY	Peptide
1	15-A	80	HIS	Peptide
1	16-A	221	ASN	Peptide
1	16-A	273	GLN	Peptide
1	16-A	277	ASN	Peptide
1	16-A	299	GLN	Peptide
1	16-A	303	VAL	Peptide
1	16-A	80	HIS	Peptide
1	17-A	118	TYR	Peptide
1	17-A	192	GLN	Peptide
1	17-A	216	ASP	Peptide
1	17-A	220	LEU	Peptide
1	17-A	24	THR	Peptide
1	17-A	275	GLY	Peptide
1	17-A	298	ARG	Sidechain
1	17-A	299	GLN	Peptide
1	17-A	300	CYS	Peptide
1	17-A	302	GLY	Peptide
1	17-A	303	VAL	Peptide
1	17-A	46	SER	Peptide
1	17-A	60	ARG	Sidechain
1	18-A	101	TYR	Peptide
1	18-A	220	LEU	Peptide
1	18-A	222	ARG	Peptide
1	18-A	275	GLY	Peptide
1	18-A	276	MET	Peptide
1	18-A	277	ASN	Peptide
1	18-A	278	GLY	Peptide
1	18-A	279	ARG	Peptide
1	18-A	299	GLN	Peptide
1	18-A	71	GLY	Peptide
1	19-A	217	ARG	Sidechain
1	19-A	276	MET	Peptide
1	19-A	277	ASN	Peptide
1	19-A	303	VAL	Peptide
1	19-A	70	ALA	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	19-A	71	GLY	Peptide
1	19-A	78	ILE	Peptide
1	19-A	79	GLY	Peptide
1	19-A	80	HIS	Peptide
1	19-A	91	VAL	Peptide
1	2-A	155	ASP	Peptide
1	2-A	158	SER	Peptide
1	2-A	184	PRO	Peptide
1	2-A	216	ASP	Peptide
1	2-A	221	ASN	Peptide
1	2-A	301	SER	Peptide
1	2-A	302	GLY	Peptide
1	2-A	303	VAL	Peptide
1	2-A	64	HIS	Peptide
1	20-A	165	MET	Peptide
1	20-A	192	GLN	Peptide
1	20-A	193	ALA	Peptide
1	20-A	277	ASN	Peptide
1	20-A	278	GLY	Peptide
1	20-A	304	THR	Peptide
1	20-A	71	GLY	Peptide
1	20-A	78	ILE	Peptide
1	20-A	79	GLY	Peptide
1	20-A	80	HIS	Peptide
1	21-A	118	TYR	Peptide
1	21-A	153	ASP	Peptide
1	21-A	192	GLN	Peptide
1	21-A	232	LEU	Peptide
1	21-A	278	GLY	Peptide
1	21-A	298	ARG	Peptide
1	21-A	73	VAL	Peptide
1	21-A	79	GLY	Peptide
1	22-A	217	ARG	Peptide
1	22-A	221	ASN	Peptide
1	22-A	277	ASN	Peptide
1	22-A	299	GLN	Peptide
1	22-A	79	GLY	Peptide
1	22-A	80	HIS	Peptide
1	23-A	216	ASP	Peptide
1	23-A	224	THR	Peptide
1	23-A	277	ASN	Peptide
1	23-A	279	ARG	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>	<b>Group</b>
1	23-A	299	GLN	Peptide
1	23-A	300	CYS	Peptide
1	23-A	80	HIS	Peptide
1	23-A	81	SER	Peptide
1	24-A	101	TYR	Peptide
1	24-A	153	ASP	Peptide
1	24-A	298	ARG	Sidechain
1	24-A	81	SER	Peptide
1	25-A	152	ILE	Peptide
1	25-A	193	ALA	Peptide
1	25-A	273	GLN	Peptide
1	25-A	277	ASN	Peptide
1	25-A	300	CYS	Peptide
1	25-A	303	VAL	Peptide
1	25-A	61	LYS	Peptide
1	25-A	76	ARG	Peptide
1	25-A	80	HIS	Peptide
1	25-A	81	SER	Peptide
1	26-A	192	GLN	Peptide
1	26-A	193	ALA	Peptide
1	26-A	216	ASP	Peptide
1	26-A	217	ARG	Sidechain
1	26-A	229	ASP	Peptide
1	26-A	276	MET	Peptide
1	26-A	298	ARG	Sidechain
1	26-A	299	GLN	Peptide
1	26-A	302	GLY	Peptide
1	26-A	75	LEU	Peptide
1	26-A	80	HIS	Peptide
1	26-A	81	SER	Peptide
1	27-A	155	ASP	Peptide
1	27-A	192	GLN	Peptide
1	27-A	193	ALA	Peptide
1	27-A	220	LEU	Peptide
1	27-A	229	ASP	Peptide
1	27-A	275	GLY	Peptide
1	27-A	279	ARG	Peptide
1	27-A	280	THR	Peptide
1	27-A	44	CYS	Peptide
1	27-A	80	HIS	Peptide
1	28-A	154	TYR	Peptide
1	28-A	155	ASP	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	28-A	222	ARG	Peptide
1	28-A	275	GLY	Peptide
1	28-A	280	THR	Peptide
1	28-A	298	ARG	Peptide
1	28-A	299	GLN	Peptide
1	28-A	300	CYS	Peptide
1	28-A	303	VAL	Peptide
1	28-A	304	THR	Peptide
1	28-A	69	GLN	Peptide
1	28-A	72	ASN	Peptide
1	28-A	78	ILE	Peptide
1	28-A	79	GLY	Peptide
1	29-A	154	TYR	Peptide
1	29-A	220	LEU	Peptide
1	29-A	275	GLY	Peptide
1	29-A	278	GLY	Peptide
1	29-A	280	THR	Peptide
1	29-A	281	ILE	Peptide
1	29-A	299	GLN	Peptide
1	29-A	300	CYS	Peptide
1	29-A	302	GLY	Peptide
1	29-A	305	PHE	Peptide
1	3-A	155	ASP	Peptide
1	3-A	187	ASP	Peptide
1	3-A	22	CYS	Peptide
1	3-A	220	LEU	Peptide
1	3-A	222	ARG	Peptide
1	3-A	298	ARG	Sidechain
1	30-A	193	ALA	Peptide
1	30-A	220	LEU	Peptide
1	30-A	221	ASN	Peptide
1	30-A	225	THR	Peptide
1	30-A	229	ASP	Peptide
1	30-A	277	ASN	Peptide
1	30-A	300	CYS	Peptide
1	30-A	304	THR	Peptide
1	30-A	83	GLN	Peptide
1	31-A	274	ASN	Peptide
1	31-A	276	MET	Peptide
1	31-A	279	ARG	Peptide
1	31-A	298	ARG	Peptide
1	31-A	300	CYS	Peptide

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	31-A	302	GLY	Peptide
1	31-A	303	VAL	Peptide
1	31-A	304	THR	Peptide
1	31-A	305	PHE	Peptide
1	31-A	5	LYS	Peptide
1	31-A	75	LEU	Peptide
1	32-A	164	HIS	Peptide
1	32-A	181	PHE	Peptide
1	32-A	275	GLY	Peptide
1	32-A	276	MET	Peptide
1	32-A	279	ARG	Peptide
1	32-A	300	CYS	Peptide
1	32-A	305	PHE	Peptide
1	32-A	47	GLU	Peptide
1	32-A	75	LEU	Peptide
1	33-A	231	ASN	Peptide
1	33-A	275	GLY	Peptide
1	33-A	277	ASN	Peptide
1	33-A	280	THR	Peptide
1	33-A	299	GLN	Peptide
1	33-A	73	VAL	Peptide
1	33-A	76	ARG	Peptide,Sidechain
1	33-A	79	GLY	Peptide
1	34-A	224	THR	Peptide
1	34-A	272	LEU	Peptide
1	34-A	275	GLY	Peptide
1	34-A	299	GLN	Peptide
1	34-A	303	VAL	Peptide
1	34-A	60	ARG	Sidechain
1	34-A	70	ALA	Peptide
1	34-A	79	GLY	Peptide
1	35-A	153	ASP	Peptide
1	35-A	189	GLN	Peptide
1	35-A	195	GLY	Peptide
1	35-A	21	THR	Peptide
1	35-A	272	LEU	Peptide
1	35-A	274	ASN	Peptide
1	35-A	275	GLY	Peptide
1	35-A	299	GLN	Peptide
1	35-A	300	CYS	Peptide
1	35-A	59	ILE	Peptide
1	35-A	74	GLN	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	35-A	76	ARG	Sidechain
1	35-A	80	HIS	Peptide
1	36-A	216	ASP	Peptide
1	36-A	276	MET	Peptide
1	36-A	298	ARG	Sidechain
1	36-A	299	GLN	Peptide
1	36-A	302	GLY	Peptide
1	36-A	303	VAL	Peptide
1	36-A	46	SER	Peptide
1	36-A	59	ILE	Peptide
1	36-A	60	ARG	Peptide
1	36-A	72	ASN	Peptide
1	36-A	80	HIS	Peptide
1	37-A	164	HIS	Peptide
1	37-A	195	GLY	Peptide
1	37-A	220	LEU	Peptide
1	37-A	237	TYR	Peptide
1	37-A	238	ASN	Peptide
1	37-A	272	LEU	Peptide
1	37-A	298	ARG	Peptide
1	37-A	302	GLY	Peptide
1	37-A	303	VAL	Peptide
1	38-A	221	ASN	Peptide
1	38-A	47	GLU	Peptide
1	38-A	74	GLN	Peptide
1	38-A	75	LEU	Peptide
1	39-A	195	GLY	Peptide
1	39-A	217	ARG	Sidechain
1	39-A	302	GLY	Peptide
1	39-A	75	LEU	Peptide
1	4-A	142	ASN	Peptide
1	4-A	158	SER	Peptide
1	4-A	195	GLY	Peptide
1	4-A	217	ARG	Sidechain
1	4-A	24	THR	Peptide
1	4-A	276	MET	Peptide
1	4-A	301	SER	Peptide
1	4-A	302	GLY	Peptide
1	4-A	305	PHE	Peptide
1	4-A	75	LEU	Peptide
1	40-A	152	ILE	Peptide
1	40-A	188	ARG	Sidechain

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	40-A	195	GLY	Peptide
1	40-A	220	LEU	Peptide
1	40-A	224	THR	Peptide
1	40-A	226	THR	Peptide
1	40-A	229	ASP	Peptide
1	40-A	279	ARG	Sidechain
1	40-A	280	THR	Peptide
1	40-A	283	GLY	Peptide
1	40-A	74	GLN	Peptide
1	40-A	75	LEU	Peptide
1	41-A	195	GLY	Peptide
1	41-A	216	ASP	Peptide
1	41-A	223	PHE	Peptide
1	41-A	279	ARG	Peptide
1	41-A	299	GLN	Peptide
1	41-A	300	CYS	Peptide
1	41-A	73	VAL	Peptide
1	41-A	74	GLN	Peptide
1	41-A	75	LEU	Peptide
1	41-A	76	ARG	Peptide
1	42-A	155	ASP	Peptide
1	42-A	188	ARG	Sidechain
1	42-A	216	ASP	Peptide
1	42-A	298	ARG	Peptide
1	42-A	69	GLN	Peptide
1	43-A	1	SER	Peptide
1	43-A	304	THR	Peptide
1	43-A	76	ARG	Peptide,Sidechain
1	44-A	1	SER	Peptide
1	44-A	152	ILE	Peptide
1	44-A	154	TYR	Peptide
1	44-A	155	ASP	Peptide
1	44-A	221	ASN	Peptide
1	44-A	223	PHE	Peptide
1	44-A	238	ASN	Peptide
1	44-A	279	ARG	Sidechain
1	44-A	301	SER	Peptide
1	44-A	47	GLU	Peptide
1	44-A	75	LEU	Peptide
1	45-A	152	ILE	Peptide
1	45-A	195	GLY	Peptide
1	45-A	217	ARG	Sidechain

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	45-A	276	MET	Peptide
1	45-A	303	VAL	Peptide
1	45-A	304	THR	Peptide
1	45-A	48	ASP	Peptide
1	45-A	71	GLY	Peptide
1	45-A	74	GLN	Peptide
1	45-A	75	LEU	Peptide
1	5-A	152	ILE	Peptide
1	5-A	216	ASP	Peptide
1	5-A	25	THR	Peptide
1	5-A	277	ASN	Peptide
1	5-A	303	VAL	Peptide
1	6-A	151	ASN	Peptide
1	6-A	152	ILE	Peptide
1	6-A	195	GLY	Peptide
1	6-A	222	ARG	Peptide
1	6-A	24	THR	Peptide
1	6-A	279	ARG	Peptide
1	6-A	298	ARG	Sidechain
1	6-A	302	GLY	Peptide
1	6-A	303	VAL	Peptide
1	7-A	150	PHE	Peptide
1	7-A	153	ASP	Peptide
1	7-A	165	MET	Peptide
1	7-A	24	THR	Peptide
1	7-A	279	ARG	Peptide
1	7-A	302	GLY	Peptide
1	7-A	304	THR	Peptide
1	7-A	60	ARG	Sidechain
1	8-A	150	PHE	Peptide
1	8-A	153	ASP	Peptide
1	8-A	216	ASP	Peptide
1	8-A	221	ASN	Peptide
1	8-A	222	ARG	Peptide
1	8-A	278	GLY	Peptide
1	8-A	280	THR	Peptide
1	8-A	301	SER	Peptide
1	8-A	302	GLY	Peptide
1	8-A	305	PHE	Peptide
1	8-A	45	THR	Peptide
1	9-A	156	CYS	Peptide
1	9-A	192	GLN	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	9-A	195	GLY	Peptide
1	9-A	222	ARG	Peptide
1	9-A	272	LEU	Peptide
1	9-A	275	GLY	Peptide
1	9-A	305	PHE	Peptide
1	9-A	50	LEU	Peptide

## 5.2 Too-close contacts [i](#)

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	2313	2313	0	0
1	2-A	2367	2313	2313	0	0
1	3-A	2367	2313	2313	0	0
1	4-A	2367	2313	2313	0	0
1	5-A	2367	2313	2313	0	0
1	6-A	2367	2313	2313	0	0
1	7-A	2367	2313	2313	0	0
1	8-A	2367	2313	2313	0	0
1	9-A	2367	2313	2313	0	0
1	10-A	2367	2313	2313	0	0
1	11-A	2367	2313	2313	0	0
1	12-A	2367	2313	2313	0	0
1	13-A	2367	2313	2313	0	0
1	14-A	2367	2313	2313	0	0
1	15-A	2367	2313	2313	0	0
1	16-A	2367	2313	2313	0	0
1	17-A	2367	2313	2313	0	0
1	18-A	2367	2313	2313	0	0
1	19-A	2367	2313	2313	0	0
1	20-A	2367	2313	2313	0	0
1	21-A	2367	2313	2313	0	0
1	22-A	2367	2313	2313	0	0
1	23-A	2367	2313	2313	0	0
1	24-A	2367	2313	2313	0	0
1	25-A	2367	2313	2313	0	0
1	26-A	2367	2313	2313	0	0
1	27-A	2367	2313	2313	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	28-A	2367	2313	2313	0	0
1	29-A	2367	2313	2313	0	0
1	30-A	2367	2313	2313	0	0
1	31-A	2367	2313	2313	0	0
1	32-A	2367	2313	2313	0	0
1	33-A	2367	2313	2313	0	0
1	34-A	2367	2313	2313	0	0
1	35-A	2367	2313	2313	0	0
1	36-A	2367	2313	2311	0	0
1	37-A	2367	2313	2313	0	0
1	38-A	2367	2313	2313	0	0
1	39-A	2367	2313	2313	0	0
1	40-A	2367	2313	2313	0	0
1	41-A	2367	2313	2313	0	0
1	42-A	2367	2313	2313	0	0
1	43-A	2367	2313	2313	0	0
1	44-A	2367	2313	2313	0	0
1	45-A	2367	2313	2313	0	0
2	1-A	8	12	12	0	0
2	2-A	8	12	12	0	0
2	3-A	8	12	12	0	0
2	4-A	8	12	12	0	0
2	5-A	8	12	12	0	0
2	6-A	8	12	12	0	0
2	7-A	8	12	12	0	0
2	8-A	8	12	12	0	0
2	9-A	8	12	12	0	0
2	10-A	8	12	12	0	0
2	11-A	8	12	12	0	0
2	12-A	8	12	12	0	0
2	13-A	8	12	12	0	0
2	14-A	8	12	12	0	0
2	15-A	8	12	12	0	0
2	16-A	8	12	12	0	0
2	17-A	8	12	12	0	0
2	18-A	8	12	12	0	0
2	19-A	8	12	12	0	0
2	20-A	8	12	12	0	0
2	21-A	8	12	12	0	0
2	22-A	8	12	12	0	0
2	23-A	8	12	12	0	0
2	24-A	8	12	12	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	25-A	8	12	12	0	0
2	26-A	8	12	12	0	0
2	27-A	8	12	12	0	0
2	28-A	8	12	12	0	0
2	29-A	8	12	12	0	0
2	30-A	8	12	12	0	0
2	31-A	8	12	12	0	0
2	32-A	8	12	12	0	0
2	33-A	8	12	12	0	0
2	34-A	8	12	12	0	0
2	35-A	8	12	12	0	0
2	36-A	8	12	12	0	0
2	37-A	8	12	12	0	0
2	38-A	8	12	12	0	0
2	39-A	8	12	12	0	0
2	40-A	8	12	12	0	0
2	41-A	8	12	12	0	0
2	42-A	8	12	12	0	0
2	43-A	8	12	12	0	0
2	44-A	8	12	12	0	0
2	45-A	8	12	12	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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
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
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
4	1-A	45	0	0	0	0
4	2-A	38	0	0	0	0
4	3-A	37	0	0	0	0
4	4-A	44	0	0	0	0
4	5-A	47	0	0	0	0
4	6-A	45	0	0	0	0
4	7-A	44	0	0	0	0
4	8-A	37	0	0	0	0
4	9-A	46	0	0	0	0
4	10-A	50	0	0	0	0
4	11-A	50	0	0	0	0
4	12-A	48	0	0	0	0
4	13-A	48	0	0	0	0
4	14-A	42	0	0	0	0
4	15-A	41	0	0	0	0
4	16-A	42	0	0	0	0
4	17-A	42	0	0	0	0
4	18-A	44	0	0	0	0

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	19-A	41	0	0	0	0
4	20-A	48	0	0	0	0
4	21-A	42	0	0	0	0
4	22-A	46	0	0	0	0
4	23-A	55	0	0	0	0
4	24-A	49	0	0	0	0
4	25-A	54	0	0	0	0
4	26-A	41	0	0	0	0
4	27-A	39	0	0	0	0
4	28-A	40	0	0	0	0
4	29-A	47	0	0	0	0
4	30-A	46	0	0	0	0
4	31-A	47	0	0	0	0
4	32-A	45	0	0	0	0
4	33-A	48	0	0	0	0
4	34-A	43	0	0	0	0
4	35-A	38	0	0	0	0
4	36-A	37	0	0	0	0
4	37-A	41	0	0	0	0
4	38-A	47	0	0	0	0
4	39-A	49	0	0	0	0
4	40-A	48	0	0	0	0
4	41-A	42	0	0	0	0
4	42-A	48	0	0	0	0
4	43-A	45	0	0	0	0
4	44-A	52	0	0	0	0
4	45-A	39	0	0	0	0
All	All	108927	104625	104623	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 [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

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%)	259 (85%)	22 (7%)	23 (8%)	1	0
1	2-A	304/306 (99%)	258 (85%)	29 (10%)	17 (6%)	2	0
1	3-A	304/306 (99%)	263 (86%)	24 (8%)	17 (6%)	2	0
1	4-A	304/306 (99%)	266 (88%)	20 (7%)	18 (6%)	1	0
1	5-A	304/306 (99%)	255 (84%)	29 (10%)	20 (7%)	1	0
1	6-A	304/306 (99%)	258 (85%)	29 (10%)	17 (6%)	2	0
1	7-A	304/306 (99%)	261 (86%)	32 (10%)	11 (4%)	3	1
1	8-A	304/306 (99%)	256 (84%)	26 (9%)	22 (7%)	1	0
1	9-A	304/306 (99%)	254 (84%)	31 (10%)	19 (6%)	1	0
1	10-A	304/306 (99%)	257 (84%)	28 (9%)	19 (6%)	1	0
1	11-A	304/306 (99%)	260 (86%)	29 (10%)	15 (5%)	2	1
1	12-A	304/306 (99%)	262 (86%)	26 (9%)	16 (5%)	2	0
1	13-A	304/306 (99%)	259 (85%)	28 (9%)	17 (6%)	2	0
1	14-A	304/306 (99%)	256 (84%)	32 (10%)	16 (5%)	2	0
1	15-A	304/306 (99%)	257 (84%)	24 (8%)	23 (8%)	1	0
1	16-A	304/306 (99%)	261 (86%)	25 (8%)	18 (6%)	1	0
1	17-A	304/306 (99%)	253 (83%)	30 (10%)	21 (7%)	1	0
1	18-A	304/306 (99%)	252 (83%)	30 (10%)	22 (7%)	1	0
1	19-A	304/306 (99%)	259 (85%)	27 (9%)	18 (6%)	1	0
1	20-A	304/306 (99%)	260 (86%)	25 (8%)	19 (6%)	1	0
1	21-A	304/306 (99%)	244 (80%)	43 (14%)	17 (6%)	2	0
1	22-A	304/306 (99%)	258 (85%)	26 (9%)	20 (7%)	1	0
1	23-A	304/306 (99%)	252 (83%)	33 (11%)	19 (6%)	1	0
1	24-A	304/306 (99%)	254 (84%)	32 (10%)	18 (6%)	1	0
1	25-A	304/306 (99%)	256 (84%)	32 (10%)	16 (5%)	2	0
1	26-A	304/306 (99%)	261 (86%)	31 (10%)	12 (4%)	3	1
1	27-A	304/306 (99%)	254 (84%)	32 (10%)	18 (6%)	1	0
1	28-A	304/306 (99%)	247 (81%)	38 (12%)	19 (6%)	1	0
1	29-A	304/306 (99%)	259 (85%)	23 (8%)	22 (7%)	1	0
1	30-A	304/306 (99%)	259 (85%)	30 (10%)	15 (5%)	2	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	31-A	304/306 (99%)	261 (86%)	29 (10%)	14 (5%)	2	1
1	32-A	304/306 (99%)	254 (84%)	32 (10%)	18 (6%)	1	0
1	33-A	304/306 (99%)	260 (86%)	24 (8%)	20 (7%)	1	0
1	34-A	304/306 (99%)	250 (82%)	33 (11%)	21 (7%)	1	0
1	35-A	304/306 (99%)	260 (86%)	26 (9%)	18 (6%)	1	0
1	36-A	304/306 (99%)	260 (86%)	30 (10%)	14 (5%)	2	1
1	37-A	304/306 (99%)	252 (83%)	30 (10%)	22 (7%)	1	0
1	38-A	304/306 (99%)	254 (84%)	29 (10%)	21 (7%)	1	0
1	39-A	304/306 (99%)	249 (82%)	39 (13%)	16 (5%)	2	0
1	40-A	304/306 (99%)	256 (84%)	34 (11%)	14 (5%)	2	1
1	41-A	304/306 (99%)	263 (86%)	24 (8%)	17 (6%)	2	0
1	42-A	304/306 (99%)	272 (90%)	20 (7%)	12 (4%)	3	1
1	43-A	304/306 (99%)	258 (85%)	32 (10%)	14 (5%)	2	1
1	44-A	304/306 (99%)	255 (84%)	32 (10%)	17 (6%)	2	0
1	45-A	304/306 (99%)	263 (86%)	25 (8%)	16 (5%)	2	0
All	All	13680/13770 (99%)	11577 (85%)	1305 (10%)	798 (6%)	1	0

All (798) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	24	THR
1	1-A	63	ASN
1	1-A	72	ASN
1	1-A	73	VAL
1	1-A	152	ILE
1	1-A	153	ASP
1	1-A	154	TYR
1	1-A	155	ASP
1	1-A	276	MET
1	1-A	301	SER
1	2-A	64	HIS
1	2-A	73	VAL
1	2-A	152	ILE
1	2-A	155	ASP
1	2-A	156	CYS
1	2-A	185	PHE
1	2-A	222	ARG

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	276	MET
1	3-A	48	ASP
1	3-A	71	GLY
1	3-A	152	ILE
1	3-A	154	TYR
1	3-A	158	SER
1	3-A	159	PHE
1	3-A	223	PHE
1	3-A	301	SER
1	3-A	302	GLY
1	4-A	23	GLY
1	4-A	24	THR
1	4-A	47	GLU
1	4-A	71	GLY
1	4-A	154	TYR
1	4-A	171	VAL
1	4-A	223	PHE
1	4-A	224	THR
1	4-A	301	SER
1	5-A	24	THR
1	5-A	70	ALA
1	5-A	73	VAL
1	5-A	155	ASP
1	5-A	223	PHE
1	5-A	224	THR
1	5-A	277	ASN
1	5-A	301	SER
1	6-A	24	THR
1	6-A	73	VAL
1	6-A	153	ASP
1	6-A	155	ASP
1	6-A	158	SER
1	6-A	159	PHE
1	6-A	223	PHE
1	6-A	276	MET
1	6-A	280	THR
1	6-A	303	VAL
1	7-A	45	THR
1	7-A	73	VAL
1	7-A	153	ASP
1	7-A	155	ASP
1	7-A	305	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	24	THR
1	8-A	72	ASN
1	8-A	152	ILE
1	8-A	153	ASP
1	8-A	273	GLN
1	8-A	301	SER
1	9-A	23	GLY
1	9-A	73	VAL
1	9-A	80	HIS
1	9-A	152	ILE
1	9-A	153	ASP
1	9-A	154	TYR
1	9-A	273	GLN
1	9-A	274	ASN
1	9-A	280	THR
1	9-A	281	ILE
1	9-A	299	GLN
1	9-A	303	VAL
1	9-A	304	THR
1	10-A	152	ILE
1	10-A	223	PHE
1	10-A	238	ASN
1	10-A	273	GLN
1	10-A	274	ASN
1	10-A	277	ASN
1	10-A	280	THR
1	10-A	281	ILE
1	10-A	303	VAL
1	11-A	23	GLY
1	11-A	73	VAL
1	11-A	152	ILE
1	11-A	154	TYR
1	11-A	155	ASP
1	11-A	195	GLY
1	11-A	219	PHE
1	11-A	224	THR
1	11-A	279	ARG
1	11-A	280	THR
1	12-A	73	VAL
1	12-A	80	HIS
1	12-A	155	ASP
1	12-A	224	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	275	GLY
1	12-A	279	ARG
1	12-A	280	THR
1	13-A	24	THR
1	13-A	73	VAL
1	13-A	76	ARG
1	13-A	79	GLY
1	13-A	80	HIS
1	13-A	154	TYR
1	13-A	224	THR
1	13-A	275	GLY
1	13-A	280	THR
1	13-A	303	VAL
1	14-A	24	THR
1	14-A	73	VAL
1	14-A	154	TYR
1	14-A	224	THR
1	14-A	279	ARG
1	14-A	280	THR
1	14-A	301	SER
1	14-A	304	THR
1	14-A	305	PHE
1	15-A	46	SER
1	15-A	63	ASN
1	15-A	74	GLN
1	15-A	154	TYR
1	15-A	193	ALA
1	15-A	194	ALA
1	15-A	224	THR
1	15-A	256	GLN
1	15-A	273	GLN
1	15-A	277	ASN
1	15-A	299	GLN
1	15-A	303	VAL
1	15-A	304	THR
1	15-A	305	PHE
1	16-A	46	SER
1	16-A	193	ALA
1	16-A	222	ARG
1	16-A	224	THR
1	16-A	277	ASN
1	16-A	279	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	301	SER
1	16-A	304	THR
1	17-A	46	SER
1	17-A	73	VAL
1	17-A	80	HIS
1	17-A	119	ASN
1	17-A	120	GLY
1	17-A	153	ASP
1	17-A	222	ARG
1	17-A	276	MET
1	17-A	301	SER
1	18-A	46	SER
1	18-A	73	VAL
1	18-A	76	ARG
1	18-A	90	LYS
1	18-A	91	VAL
1	18-A	154	TYR
1	18-A	193	ALA
1	18-A	223	PHE
1	18-A	273	GLN
1	18-A	274	ASN
1	18-A	279	ARG
1	18-A	304	THR
1	19-A	46	SER
1	19-A	72	ASN
1	19-A	91	VAL
1	19-A	224	THR
1	19-A	299	GLN
1	19-A	305	PHE
1	20-A	62	SER
1	20-A	72	ASN
1	20-A	80	HIS
1	20-A	154	TYR
1	20-A	193	ALA
1	20-A	224	THR
1	20-A	275	GLY
1	20-A	276	MET
1	20-A	299	GLN
1	21-A	47	GLU
1	21-A	73	VAL
1	21-A	91	VAL
1	21-A	154	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	193	ALA
1	21-A	194	ALA
1	21-A	224	THR
1	21-A	279	ARG
1	21-A	301	SER
1	22-A	154	TYR
1	22-A	193	ALA
1	22-A	222	ARG
1	22-A	224	THR
1	22-A	275	GLY
1	22-A	279	ARG
1	22-A	300	CYS
1	22-A	303	VAL
1	23-A	25	THR
1	23-A	71	GLY
1	23-A	106	ILE
1	23-A	154	TYR
1	23-A	222	ARG
1	23-A	255	ALA
1	23-A	256	GLN
1	23-A	275	GLY
1	23-A	300	CYS
1	24-A	73	VAL
1	24-A	79	GLY
1	24-A	154	TYR
1	24-A	156	CYS
1	24-A	224	THR
1	24-A	256	GLN
1	24-A	275	GLY
1	24-A	276	MET
1	25-A	79	GLY
1	25-A	80	HIS
1	25-A	81	SER
1	25-A	194	ALA
1	25-A	224	THR
1	25-A	276	MET
1	25-A	298	ARG
1	25-A	304	THR
1	26-A	72	ASN
1	26-A	80	HIS
1	26-A	222	ARG
1	26-A	273	GLN

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	274	ASN
1	26-A	279	ARG
1	26-A	298	ARG
1	27-A	71	GLY
1	27-A	73	VAL
1	27-A	80	HIS
1	27-A	84	ASN
1	27-A	153	ASP
1	27-A	154	TYR
1	27-A	157	VAL
1	27-A	194	ALA
1	27-A	224	THR
1	27-A	276	MET
1	27-A	279	ARG
1	27-A	282	LEU
1	27-A	304	THR
1	28-A	72	ASN
1	28-A	73	VAL
1	28-A	80	HIS
1	28-A	157	VAL
1	28-A	193	ALA
1	28-A	276	MET
1	28-A	279	ARG
1	29-A	23	GLY
1	29-A	24	THR
1	29-A	25	THR
1	29-A	73	VAL
1	29-A	154	TYR
1	29-A	155	ASP
1	29-A	193	ALA
1	29-A	194	ALA
1	29-A	223	PHE
1	29-A	278	GLY
1	29-A	301	SER
1	29-A	305	PHE
1	30-A	84	ASN
1	30-A	155	ASP
1	30-A	194	ALA
1	30-A	223	PHE
1	30-A	224	THR
1	30-A	275	GLY
1	30-A	299	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	45	THR
1	31-A	71	GLY
1	31-A	155	ASP
1	31-A	223	PHE
1	31-A	224	THR
1	31-A	276	MET
1	31-A	281	ILE
1	31-A	304	THR
1	32-A	78	ILE
1	32-A	222	ARG
1	32-A	223	PHE
1	32-A	299	GLN
1	32-A	303	VAL
1	32-A	304	THR
1	33-A	70	ALA
1	33-A	74	GLN
1	33-A	78	ILE
1	33-A	81	SER
1	33-A	195	GLY
1	33-A	224	THR
1	33-A	275	GLY
1	33-A	276	MET
1	33-A	277	ASN
1	33-A	278	GLY
1	33-A	303	VAL
1	33-A	304	THR
1	34-A	62	SER
1	34-A	74	GLN
1	34-A	75	LEU
1	34-A	81	SER
1	34-A	224	THR
1	34-A	273	GLN
1	34-A	278	GLY
1	34-A	280	THR
1	35-A	24	THR
1	35-A	73	VAL
1	35-A	273	GLN
1	35-A	274	ASN
1	35-A	277	ASN
1	35-A	278	GLY
1	35-A	304	THR
1	36-A	75	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	193	ALA
1	36-A	224	THR
1	36-A	276	MET
1	36-A	303	VAL
1	37-A	72	ASN
1	37-A	73	VAL
1	37-A	74	GLN
1	37-A	75	LEU
1	37-A	76	ARG
1	37-A	222	ARG
1	37-A	238	ASN
1	37-A	273	GLN
1	37-A	275	GLY
1	37-A	277	ASN
1	37-A	299	GLN
1	38-A	73	VAL
1	38-A	75	LEU
1	38-A	76	ARG
1	38-A	81	SER
1	38-A	224	THR
1	38-A	274	ASN
1	38-A	298	ARG
1	38-A	300	CYS
1	38-A	303	VAL
1	38-A	304	THR
1	38-A	305	PHE
1	39-A	73	VAL
1	39-A	74	GLN
1	39-A	75	LEU
1	39-A	80	HIS
1	39-A	224	THR
1	39-A	276	MET
1	39-A	298	ARG
1	39-A	303	VAL
1	40-A	75	LEU
1	40-A	224	THR
1	41-A	72	ASN
1	41-A	154	TYR
1	41-A	224	THR
1	41-A	280	THR
1	41-A	298	ARG
1	41-A	299	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	304	THR
1	42-A	23	GLY
1	42-A	24	THR
1	42-A	75	LEU
1	42-A	154	TYR
1	42-A	224	THR
1	42-A	299	GLN
1	42-A	300	CYS
1	43-A	47	GLU
1	43-A	75	LEU
1	43-A	154	TYR
1	43-A	224	THR
1	44-A	47	GLU
1	44-A	60	ARG
1	44-A	72	ASN
1	44-A	75	LEU
1	44-A	154	TYR
1	44-A	222	ARG
1	44-A	224	THR
1	44-A	255	ALA
1	44-A	256	GLN
1	45-A	47	GLU
1	45-A	59	ILE
1	45-A	60	ARG
1	45-A	73	VAL
1	45-A	93	THR
1	45-A	106	ILE
1	45-A	154	TYR
1	45-A	224	THR
1	45-A	301	SER
1	1-A	62	SER
1	1-A	65	ASN
1	1-A	81	SER
1	1-A	299	GLN
1	2-A	72	ASN
1	3-A	46	SER
1	3-A	49	MET
1	3-A	63	ASN
1	3-A	73	VAL
1	4-A	73	VAL
1	4-A	81	SER
1	4-A	159	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	170	GLY
1	4-A	276	MET
1	5-A	49	MET
1	5-A	71	GLY
1	5-A	119	ASN
1	5-A	153	ASP
1	5-A	154	TYR
1	5-A	278	GLY
1	5-A	303	VAL
1	6-A	63	ASN
1	6-A	71	GLY
1	6-A	277	ASN
1	6-A	278	GLY
1	7-A	71	GLY
1	8-A	41	HIS
1	8-A	80	HIS
1	8-A	274	ASN
1	8-A	277	ASN
1	9-A	45	THR
1	9-A	71	GLY
1	9-A	278	GLY
1	10-A	23	GLY
1	10-A	73	VAL
1	10-A	80	HIS
1	10-A	301	SER
1	12-A	24	THR
1	12-A	33	ASP
1	12-A	71	GLY
1	12-A	79	GLY
1	13-A	12	LYS
1	13-A	23	GLY
1	14-A	23	GLY
1	14-A	227	LEU
1	15-A	191	ALA
1	15-A	276	MET
1	16-A	73	VAL
1	16-A	76	ARG
1	16-A	79	GLY
1	17-A	70	ALA
1	17-A	194	ALA
1	17-A	224	THR
1	17-A	277	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	304	THR
1	18-A	48	ASP
1	18-A	194	ALA
1	18-A	299	GLN
1	19-A	23	GLY
1	19-A	48	ASP
1	19-A	154	TYR
1	19-A	193	ALA
1	19-A	195	GLY
1	19-A	273	GLN
1	19-A	278	GLY
1	20-A	48	ASP
1	20-A	90	LYS
1	20-A	91	VAL
1	20-A	194	ALA
1	20-A	278	GLY
1	21-A	119	ASN
1	22-A	97	LYS
1	22-A	194	ALA
1	22-A	255	ALA
1	22-A	299	GLN
1	22-A	305	PHE
1	23-A	156	CYS
1	23-A	224	THR
1	23-A	279	ARG
1	23-A	303	VAL
1	23-A	305	PHE
1	24-A	193	ALA
1	24-A	194	ALA
1	24-A	271	LEU
1	24-A	301	SER
1	24-A	304	THR
1	25-A	46	SER
1	25-A	48	ASP
1	25-A	62	SER
1	25-A	157	VAL
1	25-A	238	ASN
1	26-A	79	GLY
1	26-A	224	THR
1	27-A	225	THR
1	27-A	275	GLY
1	28-A	275	GLY

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	71	GLY
1	29-A	224	THR
1	29-A	275	GLY
1	29-A	276	MET
1	29-A	302	GLY
1	30-A	154	TYR
1	30-A	273	GLN
1	30-A	305	PHE
1	31-A	78	ILE
1	31-A	275	GLY
1	32-A	23	GLY
1	32-A	63	ASN
1	32-A	154	TYR
1	32-A	281	ILE
1	33-A	301	SER
1	34-A	25	THR
1	34-A	80	HIS
1	34-A	275	GLY
1	34-A	298	ARG
1	34-A	304	THR
1	35-A	25	THR
1	35-A	154	TYR
1	35-A	193	ALA
1	35-A	222	ARG
1	35-A	224	THR
1	35-A	276	MET
1	36-A	47	GLU
1	36-A	71	GLY
1	36-A	277	ASN
1	36-A	305	PHE
1	37-A	23	GLY
1	37-A	193	ALA
1	37-A	276	MET
1	37-A	303	VAL
1	37-A	304	THR
1	38-A	48	ASP
1	38-A	72	ASN
1	39-A	152	ILE
1	39-A	304	THR
1	40-A	46	SER
1	40-A	80	HIS
1	40-A	154	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	225	THR
1	40-A	276	MET
1	40-A	304	THR
1	40-A	305	PHE
1	41-A	75	LEU
1	41-A	277	ASN
1	41-A	278	GLY
1	41-A	300	CYS
1	42-A	304	THR
1	43-A	70	ALA
1	43-A	190	THR
1	43-A	195	GLY
1	44-A	48	ASP
1	44-A	155	ASP
1	44-A	238	ASN
1	44-A	279	ARG
1	45-A	24	THR
1	45-A	155	ASP
1	45-A	238	ASN
1	1-A	61	LYS
1	2-A	24	THR
1	2-A	63	ASN
1	2-A	71	GLY
1	2-A	223	PHE
1	2-A	277	ASN
1	3-A	299	GLN
1	5-A	5	LYS
1	5-A	44	CYS
1	5-A	193	ALA
1	6-A	305	PHE
1	7-A	280	THR
1	8-A	45	THR
1	8-A	155	ASP
1	8-A	276	MET
1	9-A	298	ARG
1	10-A	81	SER
1	10-A	304	THR
1	11-A	236	LYS
1	12-A	276	MET
1	13-A	279	ARG
1	14-A	74	GLN
1	15-A	73	VAL

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	93	THR
1	15-A	238	ASN
1	15-A	300	CYS
1	15-A	301	SER
1	16-A	273	GLN
1	16-A	302	GLY
1	17-A	33	ASP
1	17-A	221	ASN
1	17-A	280	THR
1	18-A	49	MET
1	19-A	228	ASN
1	20-A	61	LYS
1	21-A	41	HIS
1	21-A	48	ASP
1	21-A	302	GLY
1	22-A	80	HIS
1	22-A	276	MET
1	23-A	45	THR
1	23-A	80	HIS
1	23-A	194	ALA
1	24-A	71	GLY
1	24-A	279	ARG
1	26-A	73	VAL
1	27-A	102	LYS
1	28-A	48	ASP
1	28-A	106	ILE
1	28-A	223	PHE
1	28-A	227	LEU
1	29-A	79	GLY
1	29-A	80	HIS
1	30-A	219	PHE
1	31-A	193	ALA
1	32-A	231	ASN
1	32-A	275	GLY
1	32-A	276	MET
1	33-A	33	ASP
1	34-A	154	TYR
1	34-A	303	VAL
1	35-A	74	GLN
1	35-A	76	ARG
1	35-A	97	LYS
1	35-A	298	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	301	SER
1	37-A	154	TYR
1	37-A	279	ARG
1	38-A	74	GLN
1	39-A	55	GLU
1	39-A	79	GLY
1	39-A	193	ALA
1	40-A	33	ASP
1	41-A	81	SER
1	41-A	273	GLN
1	41-A	282	LEU
1	42-A	73	VAL
1	43-A	142	ASN
1	43-A	222	ARG
1	43-A	304	THR
1	44-A	80	HIS
1	44-A	277	ASN
1	44-A	300	CYS
1	44-A	304	THR
1	1-A	33	ASP
1	1-A	64	HIS
1	1-A	78	ILE
1	2-A	153	ASP
1	4-A	153	ASP
1	4-A	158	SER
1	5-A	45	THR
1	5-A	159	PHE
1	6-A	45	THR
1	7-A	44	CYS
1	7-A	269	LYS
1	8-A	23	GLY
1	8-A	73	VAL
1	8-A	227	LEU
1	9-A	222	ARG
1	10-A	55	GLU
1	12-A	63	ASN
1	12-A	154	TYR
1	12-A	301	SER
1	13-A	63	ASN
1	13-A	225	THR
1	14-A	76	ARG
1	14-A	303	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	76	ARG
1	16-A	194	ALA
1	16-A	256	GLN
1	18-A	71	GLY
1	19-A	194	ALA
1	19-A	279	ARG
1	20-A	277	ASN
1	21-A	305	PHE
1	22-A	81	SER
1	23-A	302	GLY
1	25-A	193	ALA
1	25-A	223	PHE
1	27-A	23	GLY
1	28-A	228	ASN
1	28-A	304	THR
1	29-A	78	ILE
1	29-A	300	CYS
1	30-A	300	CYS
1	31-A	195	GLY
1	31-A	238	ASN
1	32-A	45	THR
1	32-A	193	ALA
1	32-A	224	THR
1	33-A	23	GLY
1	33-A	46	SER
1	34-A	78	ILE
1	34-A	276	MET
1	36-A	80	HIS
1	37-A	217	ARG
1	37-A	298	ARG
1	38-A	45	THR
1	38-A	154	TYR
1	38-A	193	ALA
1	39-A	154	TYR
1	39-A	238	ASN
1	40-A	277	ASN
1	41-A	23	GLY
1	42-A	238	ASN
1	45-A	300	CYS
1	1-A	23	GLY
1	1-A	227	LEU
1	1-A	305	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	298	ARG
1	8-A	228	ASN
1	8-A	272	LEU
1	8-A	280	THR
1	8-A	300	CYS
1	10-A	221	ASN
1	12-A	274	ASN
1	13-A	274	ASN
1	13-A	304	THR
1	15-A	33	ASP
1	16-A	78	ILE
1	16-A	99	PRO
1	18-A	72	ASN
1	18-A	221	ASN
1	18-A	283	GLY
1	19-A	277	ASN
1	20-A	73	VAL
1	21-A	24	THR
1	21-A	78	ILE
1	22-A	23	GLY
1	23-A	221	ASN
1	24-A	221	ASN
1	24-A	273	GLN
1	24-A	278	GLY
1	25-A	73	VAL
1	26-A	157	VAL
1	28-A	194	ALA
1	28-A	224	THR
1	28-A	232	LEU
1	29-A	83	GLN
1	30-A	272	LEU
1	30-A	276	MET
1	30-A	303	VAL
1	31-A	41	HIS
1	33-A	154	TYR
1	34-A	24	THR
1	34-A	193	ALA
1	35-A	303	VAL
1	37-A	274	ASN
1	37-A	305	PHE
1	38-A	80	HIS
1	38-A	217	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	23	GLY
1	40-A	269	LYS
1	40-A	298	ARG
1	41-A	193	ALA
1	42-A	193	ALA
1	43-A	305	PHE
1	45-A	193	ALA
1	2-A	184	PRO
1	3-A	195	GLY
1	4-A	155	ASP
1	7-A	278	GLY
1	8-A	193	ALA
1	11-A	24	THR
1	14-A	298	ARG
1	19-A	73	VAL
1	20-A	279	ARG
1	22-A	221	ASN
1	27-A	63	ASN
1	32-A	91	VAL
1	32-A	301	SER
1	33-A	280	THR
1	36-A	274	ASN
1	38-A	78	ILE
1	41-A	91	VAL
1	43-A	153	ASP
1	45-A	222	ARG
1	45-A	228	ASN
1	2-A	303	VAL
1	7-A	98	THR
1	10-A	275	GLY
1	10-A	278	GLY
1	11-A	79	GLY
1	17-A	278	GLY
1	21-A	23	GLY
1	26-A	195	GLY
1	28-A	278	GLY
1	1-A	303	VAL
1	11-A	71	GLY
1	11-A	278	GLY
1	17-A	152	ILE
1	17-A	241	PRO
1	17-A	275	GLY

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	303	VAL
1	20-A	195	GLY
1	33-A	77	VAL
1	34-A	15	GLY
1	42-A	131	ARG
1	43-A	303	VAL
1	3-A	23	GLY
1	14-A	302	GLY
1	16-A	303	VAL
1	18-A	184	PRO
1	28-A	59	ILE
1	36-A	59	ILE
1	36-A	91	VAL
1	38-A	23	GLY
1	40-A	275	GLY
1	1-A	302	GLY
1	4-A	95	ASN
1	8-A	43	ILE
1	9-A	79	GLY
1	22-A	96	PRO
1	33-A	71	GLY
1	43-A	73	VAL
1	6-A	152	ILE
1	22-A	79	GLY
1	34-A	73	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%)	220 (84%)	43 (16%)	2	2
1	2-A	263/263 (100%)	219 (83%)	44 (17%)	2	1
1	3-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	2
1	4-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	2
1	5-A	263/263 (100%)	214 (81%)	49 (19%)	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	6-A	263/263 (100%)	225 (86%)	38 (14%)	3	2
1	7-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	3
1	8-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	2
1	9-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	2
1	10-A	263/263 (100%)	232 (88%)	31 (12%)	5	4
1	11-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
1	12-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	2
1	13-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	2
1	14-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	2
1	15-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	2
1	16-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	2
1	17-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	3
1	18-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	2
1	19-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	2
1	20-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
1	21-A	263/263 (100%)	217 (82%)	46 (18%)	2	1
1	22-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	23-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	2
1	24-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	25-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	2
1	26-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	2
1	27-A	263/263 (100%)	212 (81%)	51 (19%)	1	1
1	28-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	29-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	30-A	263/263 (100%)	217 (82%)	46 (18%)	2	1
1	31-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	2
1	32-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	33-A	263/263 (100%)	236 (90%)	27 (10%)	7	6
1	34-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
1	35-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	1
1	36-A	263/263 (100%)	213 (81%)	50 (19%)	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	37-A	263/263 (100%)	212 (81%)	51 (19%)	1	1
1	38-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
1	39-A	263/263 (100%)	215 (82%)	48 (18%)	1	1
1	40-A	263/263 (100%)	215 (82%)	48 (18%)	1	1
1	41-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	2
1	42-A	263/263 (100%)	227 (86%)	36 (14%)	3	3
1	43-A	263/263 (100%)	219 (83%)	44 (17%)	2	1
1	44-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
1	45-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	2
All	All	11835/11835 (100%)	9956 (84%)	1879 (16%)	2	2

All (1879) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	1	SER
1	1-A	6	MET
1	1-A	19	GLN
1	1-A	27	LEU
1	1-A	45	THR
1	1-A	49	MET
1	1-A	53	ASN
1	1-A	55	GLU
1	1-A	59	ILE
1	1-A	60	ARG
1	1-A	64	HIS
1	1-A	67	LEU
1	1-A	69	GLN
1	1-A	76	ARG
1	1-A	77	VAL
1	1-A	90	LYS
1	1-A	100	LYS
1	1-A	125	VAL
1	1-A	141	LEU
1	1-A	151	ASN
1	1-A	156	CYS
1	1-A	158	SER
1	1-A	180	ASN
1	1-A	192	GLN
1	1-A	217	ARG

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	222	ARG
1	1-A	223	PHE
1	1-A	228	ASN
1	1-A	232	LEU
1	1-A	238	ASN
1	1-A	242	LEU
1	1-A	245	ASP
1	1-A	267	SER
1	1-A	271	LEU
1	1-A	273	GLN
1	1-A	274	ASN
1	1-A	277	ASN
1	1-A	280	THR
1	1-A	281	ILE
1	1-A	297	VAL
1	1-A	301	SER
1	1-A	304	THR
1	1-A	305	PHE
1	2-A	17	MET
1	2-A	34	ASP
1	2-A	50	LEU
1	2-A	53	ASN
1	2-A	60	ARG
1	2-A	62	SER
1	2-A	63	ASN
1	2-A	64	HIS
1	2-A	67	LEU
1	2-A	77	VAL
1	2-A	81	SER
1	2-A	88	LYS
1	2-A	90	LYS
1	2-A	100	LYS
1	2-A	121	SER
1	2-A	123	SER
1	2-A	141	LEU
1	2-A	151	ASN
1	2-A	152	ILE
1	2-A	156	CYS
1	2-A	158	SER
1	2-A	190	THR
1	2-A	192	GLN
1	2-A	216	ASP

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	217	ARG
1	2-A	222	ARG
1	2-A	226	THR
1	2-A	227	LEU
1	2-A	228	ASN
1	2-A	236	LYS
1	2-A	238	ASN
1	2-A	249	ILE
1	2-A	254	SER
1	2-A	259	ILE
1	2-A	262	LEU
1	2-A	269	LYS
1	2-A	271	LEU
1	2-A	274	ASN
1	2-A	276	MET
1	2-A	277	ASN
1	2-A	281	ILE
1	2-A	288	GLU
1	2-A	303	VAL
1	2-A	304	THR
1	3-A	12	LYS
1	3-A	19	GLN
1	3-A	24	THR
1	3-A	47	GLU
1	3-A	48	ASP
1	3-A	49	MET
1	3-A	51	ASN
1	3-A	53	ASN
1	3-A	55	GLU
1	3-A	60	ARG
1	3-A	67	LEU
1	3-A	69	GLN
1	3-A	72	ASN
1	3-A	76	ARG
1	3-A	81	SER
1	3-A	88	LYS
1	3-A	91	VAL
1	3-A	102	LYS
1	3-A	110	GLN
1	3-A	123	SER
1	3-A	141	LEU
1	3-A	152	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	166	GLU
1	3-A	171	VAL
1	3-A	186	VAL
1	3-A	196	THR
1	3-A	216	ASP
1	3-A	222	ARG
1	3-A	226	THR
1	3-A	235	MET
1	3-A	242	LEU
1	3-A	243	THR
1	3-A	249	ILE
1	3-A	254	SER
1	3-A	271	LEU
1	3-A	276	MET
1	3-A	280	THR
1	3-A	281	ILE
1	3-A	288	GLU
1	3-A	303	VAL
1	3-A	304	THR
1	4-A	1	SER
1	4-A	24	THR
1	4-A	27	LEU
1	4-A	49	MET
1	4-A	53	ASN
1	4-A	55	GLU
1	4-A	59	ILE
1	4-A	60	ARG
1	4-A	62	SER
1	4-A	72	ASN
1	4-A	74	GLN
1	4-A	75	LEU
1	4-A	88	LYS
1	4-A	89	LEU
1	4-A	90	LYS
1	4-A	92	ASP
1	4-A	93	THR
1	4-A	97	LYS
1	4-A	107	GLN
1	4-A	110	GLN
1	4-A	125	VAL
1	4-A	136	ILE
1	4-A	153	ASP

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	154	TYR
1	4-A	171	VAL
1	4-A	188	ARG
1	4-A	227	LEU
1	4-A	229	ASP
1	4-A	244	GLN
1	4-A	245	ASP
1	4-A	254	SER
1	4-A	270	GLU
1	4-A	271	LEU
1	4-A	276	MET
1	4-A	277	ASN
1	4-A	280	THR
1	4-A	281	ILE
1	4-A	288	GLU
1	4-A	298	ARG
1	4-A	303	VAL
1	4-A	304	THR
1	4-A	306	GLN
1	5-A	6	MET
1	5-A	19	GLN
1	5-A	22	CYS
1	5-A	27	LEU
1	5-A	47	GLU
1	5-A	48	ASP
1	5-A	49	MET
1	5-A	50	LEU
1	5-A	53	ASN
1	5-A	55	GLU
1	5-A	60	ARG
1	5-A	69	GLN
1	5-A	75	LEU
1	5-A	76	ARG
1	5-A	81	SER
1	5-A	90	LYS
1	5-A	102	LYS
1	5-A	106	ILE
1	5-A	107	GLN
1	5-A	119	ASN
1	5-A	137	LYS
1	5-A	154	TYR
1	5-A	171	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	177	LEU
1	5-A	189	GLN
1	5-A	221	ASN
1	5-A	222	ARG
1	5-A	225	THR
1	5-A	226	THR
1	5-A	227	LEU
1	5-A	244	GLN
1	5-A	256	GLN
1	5-A	262	LEU
1	5-A	270	GLU
1	5-A	272	LEU
1	5-A	274	ASN
1	5-A	276	MET
1	5-A	277	ASN
1	5-A	279	ARG
1	5-A	280	THR
1	5-A	281	ILE
1	5-A	288	GLU
1	5-A	289	ASP
1	5-A	294	PHE
1	5-A	297	VAL
1	5-A	298	ARG
1	5-A	303	VAL
1	5-A	304	THR
1	5-A	306	GLN
1	6-A	46	SER
1	6-A	47	GLU
1	6-A	48	ASP
1	6-A	49	MET
1	6-A	50	LEU
1	6-A	53	ASN
1	6-A	60	ARG
1	6-A	75	LEU
1	6-A	81	SER
1	6-A	88	LYS
1	6-A	90	LYS
1	6-A	102	LYS
1	6-A	110	GLN
1	6-A	123	SER
1	6-A	141	LEU
1	6-A	142	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	152	ILE
1	6-A	188	ARG
1	6-A	198	THR
1	6-A	217	ARG
1	6-A	221	ASN
1	6-A	222	ARG
1	6-A	223	PHE
1	6-A	224	THR
1	6-A	226	THR
1	6-A	227	LEU
1	6-A	232	LEU
1	6-A	233	VAL
1	6-A	235	MET
1	6-A	245	ASP
1	6-A	249	ILE
1	6-A	270	GLU
1	6-A	273	GLN
1	6-A	277	ASN
1	6-A	281	ILE
1	6-A	298	ARG
1	6-A	303	VAL
1	6-A	305	PHE
1	7-A	1	SER
1	7-A	12	LYS
1	7-A	21	THR
1	7-A	24	THR
1	7-A	28	ASN
1	7-A	34	ASP
1	7-A	47	GLU
1	7-A	53	ASN
1	7-A	60	ARG
1	7-A	67	LEU
1	7-A	69	GLN
1	7-A	74	GLN
1	7-A	75	LEU
1	7-A	93	THR
1	7-A	97	LYS
1	7-A	102	LYS
1	7-A	113	SER
1	7-A	142	ASN
1	7-A	151	ASN
1	7-A	152	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	165	MET
1	7-A	192	GLN
1	7-A	217	ARG
1	7-A	221	ASN
1	7-A	222	ARG
1	7-A	227	LEU
1	7-A	232	LEU
1	7-A	235	MET
1	7-A	242	LEU
1	7-A	254	SER
1	7-A	256	GLN
1	7-A	257	THR
1	7-A	274	ASN
1	7-A	277	ASN
1	7-A	281	ILE
1	7-A	297	VAL
1	8-A	12	LYS
1	8-A	25	THR
1	8-A	33	ASP
1	8-A	47	GLU
1	8-A	51	ASN
1	8-A	53	ASN
1	8-A	69	GLN
1	8-A	72	ASN
1	8-A	74	GLN
1	8-A	75	LEU
1	8-A	76	ARG
1	8-A	91	VAL
1	8-A	97	LYS
1	8-A	102	LYS
1	8-A	106	ILE
1	8-A	123	SER
1	8-A	125	VAL
1	8-A	128	CYS
1	8-A	130	MET
1	8-A	136	ILE
1	8-A	139	SER
1	8-A	145	CYS
1	8-A	151	ASN
1	8-A	153	ASP
1	8-A	158	SER
1	8-A	190	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	192	GLN
1	8-A	196	THR
1	8-A	197	ASP
1	8-A	216	ASP
1	8-A	222	ARG
1	8-A	227	LEU
1	8-A	228	ASN
1	8-A	235	MET
1	8-A	243	THR
1	8-A	244	GLN
1	8-A	256	GLN
1	8-A	276	MET
1	8-A	277	ASN
1	8-A	281	ILE
1	8-A	304	THR
1	9-A	21	THR
1	9-A	24	THR
1	9-A	27	LEU
1	9-A	49	MET
1	9-A	53	ASN
1	9-A	59	ILE
1	9-A	67	LEU
1	9-A	69	GLN
1	9-A	73	VAL
1	9-A	74	GLN
1	9-A	80	HIS
1	9-A	90	LYS
1	9-A	93	THR
1	9-A	98	THR
1	9-A	136	ILE
1	9-A	142	ASN
1	9-A	145	CYS
1	9-A	154	TYR
1	9-A	156	CYS
1	9-A	158	SER
1	9-A	188	ARG
1	9-A	216	ASP
1	9-A	221	ASN
1	9-A	222	ARG
1	9-A	224	THR
1	9-A	227	LEU
1	9-A	232	LEU

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	233	VAL
1	9-A	235	MET
1	9-A	237	TYR
1	9-A	240	GLU
1	9-A	245	ASP
1	9-A	249	ILE
1	9-A	256	GLN
1	9-A	263	ASP
1	9-A	276	MET
1	9-A	277	ASN
1	9-A	281	ILE
1	9-A	288	GLU
1	9-A	301	SER
1	9-A	303	VAL
1	9-A	304	THR
1	10-A	14	GLU
1	10-A	21	THR
1	10-A	22	CYS
1	10-A	24	THR
1	10-A	51	ASN
1	10-A	67	LEU
1	10-A	73	VAL
1	10-A	75	LEU
1	10-A	77	VAL
1	10-A	80	HIS
1	10-A	97	LYS
1	10-A	100	LYS
1	10-A	102	LYS
1	10-A	104	VAL
1	10-A	121	SER
1	10-A	125	VAL
1	10-A	142	ASN
1	10-A	154	TYR
1	10-A	158	SER
1	10-A	188	ARG
1	10-A	224	THR
1	10-A	225	THR
1	10-A	227	LEU
1	10-A	271	LEU
1	10-A	274	ASN
1	10-A	277	ASN
1	10-A	279	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	281	ILE
1	10-A	298	ARG
1	10-A	299	GLN
1	10-A	304	THR
1	11-A	1	SER
1	11-A	6	MET
1	11-A	26	THR
1	11-A	62	SER
1	11-A	69	GLN
1	11-A	75	LEU
1	11-A	76	ARG
1	11-A	80	HIS
1	11-A	90	LYS
1	11-A	91	VAL
1	11-A	97	LYS
1	11-A	100	LYS
1	11-A	119	ASN
1	11-A	121	SER
1	11-A	125	VAL
1	11-A	154	TYR
1	11-A	156	CYS
1	11-A	158	SER
1	11-A	192	GLN
1	11-A	197	ASP
1	11-A	222	ARG
1	11-A	225	THR
1	11-A	232	LEU
1	11-A	236	LYS
1	11-A	238	ASN
1	11-A	240	GLU
1	11-A	254	SER
1	11-A	272	LEU
1	11-A	276	MET
1	11-A	277	ASN
1	11-A	279	ARG
1	11-A	281	ILE
1	11-A	294	PHE
1	11-A	300	CYS
1	11-A	301	SER
1	11-A	303	VAL
1	11-A	304	THR
1	11-A	305	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	306	GLN
1	12-A	1	SER
1	12-A	6	MET
1	12-A	21	THR
1	12-A	27	LEU
1	12-A	67	LEU
1	12-A	69	GLN
1	12-A	74	GLN
1	12-A	76	ARG
1	12-A	78	ILE
1	12-A	81	SER
1	12-A	88	LYS
1	12-A	90	LYS
1	12-A	93	THR
1	12-A	97	LYS
1	12-A	102	LYS
1	12-A	107	GLN
1	12-A	110	GLN
1	12-A	145	CYS
1	12-A	154	TYR
1	12-A	165	MET
1	12-A	169	THR
1	12-A	188	ARG
1	12-A	196	THR
1	12-A	216	ASP
1	12-A	224	THR
1	12-A	225	THR
1	12-A	226	THR
1	12-A	227	LEU
1	12-A	235	MET
1	12-A	236	LYS
1	12-A	238	ASN
1	12-A	243	THR
1	12-A	244	GLN
1	12-A	249	ILE
1	12-A	254	SER
1	12-A	270	GLU
1	12-A	274	ASN
1	12-A	276	MET
1	12-A	277	ASN
1	12-A	279	ARG
1	12-A	281	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	303	VAL
1	13-A	3	PHE
1	13-A	27	LEU
1	13-A	41	HIS
1	13-A	47	GLU
1	13-A	50	LEU
1	13-A	51	ASN
1	13-A	59	ILE
1	13-A	65	ASN
1	13-A	67	LEU
1	13-A	72	ASN
1	13-A	76	ARG
1	13-A	77	VAL
1	13-A	87	LEU
1	13-A	90	LYS
1	13-A	102	LYS
1	13-A	107	GLN
1	13-A	110	GLN
1	13-A	125	VAL
1	13-A	141	LEU
1	13-A	151	ASN
1	13-A	153	ASP
1	13-A	155	ASP
1	13-A	171	VAL
1	13-A	188	ARG
1	13-A	189	GLN
1	13-A	190	THR
1	13-A	216	ASP
1	13-A	217	ARG
1	13-A	226	THR
1	13-A	227	LEU
1	13-A	236	LYS
1	13-A	238	ASN
1	13-A	249	ILE
1	13-A	270	GLU
1	13-A	276	MET
1	13-A	277	ASN
1	13-A	279	ARG
1	13-A	281	ILE
1	13-A	286	LEU
1	13-A	304	THR
1	13-A	305	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	26	THR
1	14-A	30	LEU
1	14-A	34	ASP
1	14-A	46	SER
1	14-A	47	GLU
1	14-A	55	GLU
1	14-A	62	SER
1	14-A	67	LEU
1	14-A	74	GLN
1	14-A	75	LEU
1	14-A	78	ILE
1	14-A	80	HIS
1	14-A	81	SER
1	14-A	97	LYS
1	14-A	102	LYS
1	14-A	104	VAL
1	14-A	107	GLN
1	14-A	119	ASN
1	14-A	142	ASN
1	14-A	145	CYS
1	14-A	153	ASP
1	14-A	188	ARG
1	14-A	214	ASN
1	14-A	216	ASP
1	14-A	217	ARG
1	14-A	221	ASN
1	14-A	225	THR
1	14-A	227	LEU
1	14-A	235	MET
1	14-A	236	LYS
1	14-A	243	THR
1	14-A	267	SER
1	14-A	270	GLU
1	14-A	271	LEU
1	14-A	272	LEU
1	14-A	274	ASN
1	14-A	276	MET
1	14-A	277	ASN
1	14-A	279	ARG
1	14-A	281	ILE
1	14-A	300	CYS
1	14-A	304	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	305	PHE
1	15-A	24	THR
1	15-A	34	ASP
1	15-A	46	SER
1	15-A	48	ASP
1	15-A	55	GLU
1	15-A	67	LEU
1	15-A	69	GLN
1	15-A	77	VAL
1	15-A	90	LYS
1	15-A	91	VAL
1	15-A	93	THR
1	15-A	97	LYS
1	15-A	100	LYS
1	15-A	102	LYS
1	15-A	106	ILE
1	15-A	107	GLN
1	15-A	125	VAL
1	15-A	136	ILE
1	15-A	154	TYR
1	15-A	155	ASP
1	15-A	156	CYS
1	15-A	165	MET
1	15-A	216	ASP
1	15-A	217	ARG
1	15-A	221	ASN
1	15-A	227	LEU
1	15-A	228	ASN
1	15-A	235	MET
1	15-A	236	LYS
1	15-A	238	ASN
1	15-A	254	SER
1	15-A	256	GLN
1	15-A	270	GLU
1	15-A	277	ASN
1	15-A	281	ILE
1	15-A	299	GLN
1	15-A	306	GLN
1	16-A	12	LYS
1	16-A	14	GLU
1	16-A	24	THR
1	16-A	27	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	47	GLU
1	16-A	51	ASN
1	16-A	55	GLU
1	16-A	75	LEU
1	16-A	80	HIS
1	16-A	81	SER
1	16-A	90	LYS
1	16-A	92	ASP
1	16-A	93	THR
1	16-A	107	GLN
1	16-A	142	ASN
1	16-A	155	ASP
1	16-A	158	SER
1	16-A	165	MET
1	16-A	190	THR
1	16-A	196	THR
1	16-A	198	THR
1	16-A	216	ASP
1	16-A	221	ASN
1	16-A	223	PHE
1	16-A	225	THR
1	16-A	227	LEU
1	16-A	232	LEU
1	16-A	235	MET
1	16-A	236	LYS
1	16-A	249	ILE
1	16-A	254	SER
1	16-A	256	GLN
1	16-A	277	ASN
1	16-A	281	ILE
1	16-A	298	ARG
1	16-A	301	SER
1	16-A	305	PHE
1	17-A	12	LYS
1	17-A	19	GLN
1	17-A	24	THR
1	17-A	45	THR
1	17-A	47	GLU
1	17-A	55	GLU
1	17-A	59	ILE
1	17-A	60	ARG
1	17-A	62	SER

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	69	GLN
1	17-A	77	VAL
1	17-A	90	LYS
1	17-A	92	ASP
1	17-A	93	THR
1	17-A	97	LYS
1	17-A	110	GLN
1	17-A	152	ILE
1	17-A	154	TYR
1	17-A	189	GLN
1	17-A	216	ASP
1	17-A	222	ARG
1	17-A	224	THR
1	17-A	232	LEU
1	17-A	240	GLU
1	17-A	243	THR
1	17-A	249	ILE
1	17-A	267	SER
1	17-A	274	ASN
1	17-A	276	MET
1	17-A	281	ILE
1	17-A	286	LEU
1	17-A	298	ARG
1	17-A	299	GLN
1	17-A	303	VAL
1	17-A	305	PHE
1	17-A	306	GLN
1	18-A	1	SER
1	18-A	3	PHE
1	18-A	12	LYS
1	18-A	19	GLN
1	18-A	41	HIS
1	18-A	43	ILE
1	18-A	46	SER
1	18-A	60	ARG
1	18-A	72	ASN
1	18-A	74	GLN
1	18-A	75	LEU
1	18-A	76	ARG
1	18-A	77	VAL
1	18-A	87	LEU
1	18-A	92	ASP

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	97	LYS
1	18-A	102	LYS
1	18-A	123	SER
1	18-A	125	VAL
1	18-A	130	MET
1	18-A	137	LYS
1	18-A	144	SER
1	18-A	152	ILE
1	18-A	190	THR
1	18-A	216	ASP
1	18-A	221	ASN
1	18-A	223	PHE
1	18-A	224	THR
1	18-A	226	THR
1	18-A	232	LEU
1	18-A	235	MET
1	18-A	236	LYS
1	18-A	244	GLN
1	18-A	249	ILE
1	18-A	267	SER
1	18-A	274	ASN
1	18-A	277	ASN
1	18-A	281	ILE
1	18-A	286	LEU
1	18-A	288	GLU
1	18-A	298	ARG
1	18-A	299	GLN
1	18-A	303	VAL
1	19-A	1	SER
1	19-A	12	LYS
1	19-A	21	THR
1	19-A	48	ASP
1	19-A	59	ILE
1	19-A	72	ASN
1	19-A	75	LEU
1	19-A	76	ARG
1	19-A	77	VAL
1	19-A	81	SER
1	19-A	87	LEU
1	19-A	90	LYS
1	19-A	91	VAL
1	19-A	93	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	106	ILE
1	19-A	107	GLN
1	19-A	119	ASN
1	19-A	130	MET
1	19-A	141	LEU
1	19-A	142	ASN
1	19-A	154	TYR
1	19-A	155	ASP
1	19-A	165	MET
1	19-A	188	ARG
1	19-A	190	THR
1	19-A	223	PHE
1	19-A	224	THR
1	19-A	226	THR
1	19-A	227	LEU
1	19-A	229	ASP
1	19-A	230	PHE
1	19-A	232	LEU
1	19-A	235	MET
1	19-A	236	LYS
1	19-A	240	GLU
1	19-A	244	GLN
1	19-A	245	ASP
1	19-A	254	SER
1	19-A	272	LEU
1	19-A	277	ASN
1	19-A	281	ILE
1	19-A	286	LEU
1	19-A	301	SER
1	20-A	1	SER
1	20-A	21	THR
1	20-A	41	HIS
1	20-A	45	THR
1	20-A	47	GLU
1	20-A	50	LEU
1	20-A	67	LEU
1	20-A	75	LEU
1	20-A	76	ARG
1	20-A	80	HIS
1	20-A	89	LEU
1	20-A	90	LYS
1	20-A	100	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	104	VAL
1	20-A	107	GLN
1	20-A	119	ASN
1	20-A	141	LEU
1	20-A	155	ASP
1	20-A	165	MET
1	20-A	192	GLN
1	20-A	198	THR
1	20-A	222	ARG
1	20-A	227	LEU
1	20-A	232	LEU
1	20-A	233	VAL
1	20-A	236	LYS
1	20-A	238	ASN
1	20-A	242	LEU
1	20-A	249	ILE
1	20-A	254	SER
1	20-A	276	MET
1	20-A	277	ASN
1	20-A	281	ILE
1	20-A	286	LEU
1	20-A	297	VAL
1	20-A	299	GLN
1	20-A	301	SER
1	20-A	303	VAL
1	20-A	305	PHE
1	21-A	1	SER
1	21-A	6	MET
1	21-A	21	THR
1	21-A	22	CYS
1	21-A	26	THR
1	21-A	41	HIS
1	21-A	45	THR
1	21-A	46	SER
1	21-A	47	GLU
1	21-A	60	ARG
1	21-A	67	LEU
1	21-A	72	ASN
1	21-A	76	ARG
1	21-A	88	LYS
1	21-A	90	LYS
1	21-A	91	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	92	ASP
1	21-A	110	GLN
1	21-A	119	ASN
1	21-A	125	VAL
1	21-A	130	MET
1	21-A	136	ILE
1	21-A	141	LEU
1	21-A	145	CYS
1	21-A	151	ASN
1	21-A	153	ASP
1	21-A	154	TYR
1	21-A	155	ASP
1	21-A	192	GLN
1	21-A	196	THR
1	21-A	227	LEU
1	21-A	229	ASP
1	21-A	236	LYS
1	21-A	238	ASN
1	21-A	242	LEU
1	21-A	256	GLN
1	21-A	274	ASN
1	21-A	276	MET
1	21-A	277	ASN
1	21-A	281	ILE
1	21-A	286	LEU
1	21-A	298	ARG
1	21-A	299	GLN
1	21-A	304	THR
1	21-A	305	PHE
1	21-A	306	GLN
1	22-A	6	MET
1	22-A	19	GLN
1	22-A	21	THR
1	22-A	26	THR
1	22-A	45	THR
1	22-A	51	ASN
1	22-A	58	LEU
1	22-A	60	ARG
1	22-A	72	ASN
1	22-A	74	GLN
1	22-A	75	LEU
1	22-A	76	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	80	HIS
1	22-A	88	LYS
1	22-A	90	LYS
1	22-A	93	THR
1	22-A	106	ILE
1	22-A	107	GLN
1	22-A	110	GLN
1	22-A	136	ILE
1	22-A	142	ASN
1	22-A	145	CYS
1	22-A	153	ASP
1	22-A	155	ASP
1	22-A	165	MET
1	22-A	190	THR
1	22-A	216	ASP
1	22-A	217	ARG
1	22-A	222	ARG
1	22-A	223	PHE
1	22-A	224	THR
1	22-A	225	THR
1	22-A	227	LEU
1	22-A	232	LEU
1	22-A	235	MET
1	22-A	236	LYS
1	22-A	243	THR
1	22-A	256	GLN
1	22-A	277	ASN
1	22-A	279	ARG
1	22-A	281	ILE
1	22-A	288	GLU
1	22-A	298	ARG
1	22-A	304	THR
1	22-A	306	GLN
1	23-A	47	GLU
1	23-A	48	ASP
1	23-A	55	GLU
1	23-A	56	ASP
1	23-A	62	SER
1	23-A	72	ASN
1	23-A	76	ARG
1	23-A	77	VAL
1	23-A	80	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	100	LYS
1	23-A	101	TYR
1	23-A	102	LYS
1	23-A	107	GLN
1	23-A	136	ILE
1	23-A	141	LEU
1	23-A	153	ASP
1	23-A	158	SER
1	23-A	165	MET
1	23-A	188	ARG
1	23-A	216	ASP
1	23-A	217	ARG
1	23-A	235	MET
1	23-A	236	LYS
1	23-A	238	ASN
1	23-A	240	GLU
1	23-A	243	THR
1	23-A	254	SER
1	23-A	256	GLN
1	23-A	259	ILE
1	23-A	274	ASN
1	23-A	276	MET
1	23-A	281	ILE
1	23-A	299	GLN
1	23-A	300	CYS
1	23-A	301	SER
1	23-A	303	VAL
1	23-A	304	THR
1	24-A	19	GLN
1	24-A	22	CYS
1	24-A	24	THR
1	24-A	49	MET
1	24-A	59	ILE
1	24-A	67	LEU
1	24-A	69	GLN
1	24-A	72	ASN
1	24-A	74	GLN
1	24-A	75	LEU
1	24-A	76	ARG
1	24-A	82	MET
1	24-A	90	LYS
1	24-A	93	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	101	TYR
1	24-A	107	GLN
1	24-A	108	PRO
1	24-A	110	GLN
1	24-A	125	VAL
1	24-A	130	MET
1	24-A	141	LEU
1	24-A	153	ASP
1	24-A	156	CYS
1	24-A	166	GLU
1	24-A	178	GLU
1	24-A	192	GLN
1	24-A	216	ASP
1	24-A	224	THR
1	24-A	227	LEU
1	24-A	236	LYS
1	24-A	238	ASN
1	24-A	244	GLN
1	24-A	254	SER
1	24-A	273	GLN
1	24-A	276	MET
1	24-A	279	ARG
1	24-A	281	ILE
1	24-A	287	LEU
1	24-A	288	GLU
1	24-A	299	GLN
1	24-A	301	SER
1	24-A	303	VAL
1	24-A	304	THR
1	24-A	305	PHE
1	24-A	306	GLN
1	25-A	24	THR
1	25-A	28	ASN
1	25-A	49	MET
1	25-A	50	LEU
1	25-A	59	ILE
1	25-A	60	ARG
1	25-A	67	LEU
1	25-A	72	ASN
1	25-A	74	GLN
1	25-A	75	LEU
1	25-A	77	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	80	HIS
1	25-A	82	MET
1	25-A	101	TYR
1	25-A	107	GLN
1	25-A	121	SER
1	25-A	130	MET
1	25-A	141	LEU
1	25-A	151	ASN
1	25-A	155	ASP
1	25-A	158	SER
1	25-A	165	MET
1	25-A	188	ARG
1	25-A	222	ARG
1	25-A	225	THR
1	25-A	227	LEU
1	25-A	228	ASN
1	25-A	229	ASP
1	25-A	232	LEU
1	25-A	235	MET
1	25-A	237	TYR
1	25-A	238	ASN
1	25-A	249	ILE
1	25-A	274	ASN
1	25-A	277	ASN
1	25-A	279	ARG
1	25-A	281	ILE
1	25-A	286	LEU
1	25-A	299	GLN
1	25-A	303	VAL
1	25-A	304	THR
1	25-A	305	PHE
1	25-A	306	GLN
1	26-A	1	SER
1	26-A	21	THR
1	26-A	24	THR
1	26-A	45	THR
1	26-A	47	GLU
1	26-A	48	ASP
1	26-A	50	LEU
1	26-A	56	ASP
1	26-A	60	ARG
1	26-A	69	GLN

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	75	LEU
1	26-A	80	HIS
1	26-A	91	VAL
1	26-A	110	GLN
1	26-A	141	LEU
1	26-A	154	TYR
1	26-A	155	ASP
1	26-A	180	ASN
1	26-A	190	THR
1	26-A	216	ASP
1	26-A	217	ARG
1	26-A	221	ASN
1	26-A	222	ARG
1	26-A	223	PHE
1	26-A	225	THR
1	26-A	228	ASN
1	26-A	235	MET
1	26-A	243	THR
1	26-A	249	ILE
1	26-A	263	ASP
1	26-A	277	ASN
1	26-A	279	ARG
1	26-A	281	ILE
1	26-A	286	LEU
1	26-A	304	THR
1	26-A	305	PHE
1	26-A	306	GLN
1	27-A	1	SER
1	27-A	6	MET
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET
1	27-A	51	ASN
1	27-A	55	GLU
1	27-A	60	ARG
1	27-A	67	LEU
1	27-A	69	GLN
1	27-A	72	ASN
1	27-A	75	LEU
1	27-A	76	ARG
1	27-A	77	VAL
1	27-A	92	ASP
1	27-A	93	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	97	LYS
1	27-A	100	LYS
1	27-A	107	GLN
1	27-A	110	GLN
1	27-A	125	VAL
1	27-A	130	MET
1	27-A	136	ILE
1	27-A	137	LYS
1	27-A	141	LEU
1	27-A	142	ASN
1	27-A	158	SER
1	27-A	165	MET
1	27-A	186	VAL
1	27-A	188	ARG
1	27-A	189	GLN
1	27-A	190	THR
1	27-A	221	ASN
1	27-A	224	THR
1	27-A	225	THR
1	27-A	227	LEU
1	27-A	229	ASP
1	27-A	235	MET
1	27-A	236	LYS
1	27-A	240	GLU
1	27-A	256	GLN
1	27-A	274	ASN
1	27-A	277	ASN
1	27-A	279	ARG
1	27-A	280	THR
1	27-A	281	ILE
1	27-A	286	LEU
1	27-A	294	PHE
1	27-A	298	ARG
1	27-A	299	GLN
1	27-A	300	CYS
1	27-A	303	VAL
1	28-A	41	HIS
1	28-A	45	THR
1	28-A	49	MET
1	28-A	51	ASN
1	28-A	53	ASN
1	28-A	69	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	72	ASN
1	28-A	75	LEU
1	28-A	76	ARG
1	28-A	78	ILE
1	28-A	80	HIS
1	28-A	82	MET
1	28-A	90	LYS
1	28-A	92	ASP
1	28-A	97	LYS
1	28-A	107	GLN
1	28-A	110	GLN
1	28-A	130	MET
1	28-A	137	LYS
1	28-A	141	LEU
1	28-A	142	ASN
1	28-A	188	ARG
1	28-A	189	GLN
1	28-A	197	ASP
1	28-A	216	ASP
1	28-A	217	ARG
1	28-A	222	ARG
1	28-A	224	THR
1	28-A	225	THR
1	28-A	226	THR
1	28-A	227	LEU
1	28-A	232	LEU
1	28-A	235	MET
1	28-A	240	GLU
1	28-A	249	ILE
1	28-A	253	LEU
1	28-A	256	GLN
1	28-A	264	MET
1	28-A	270	GLU
1	28-A	281	ILE
1	28-A	288	GLU
1	28-A	298	ARG
1	28-A	301	SER
1	28-A	303	VAL
1	28-A	304	THR
1	29-A	1	SER
1	29-A	19	GLN
1	29-A	21	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	25	THR
1	29-A	30	LEU
1	29-A	43	ILE
1	29-A	50	LEU
1	29-A	53	ASN
1	29-A	55	GLU
1	29-A	60	ARG
1	29-A	72	ASN
1	29-A	76	ARG
1	29-A	78	ILE
1	29-A	81	SER
1	29-A	84	ASN
1	29-A	90	LYS
1	29-A	93	THR
1	29-A	100	LYS
1	29-A	123	SER
1	29-A	136	ILE
1	29-A	137	LYS
1	29-A	141	LEU
1	29-A	151	ASN
1	29-A	153	ASP
1	29-A	186	VAL
1	29-A	188	ARG
1	29-A	189	GLN
1	29-A	196	THR
1	29-A	216	ASP
1	29-A	222	ARG
1	29-A	224	THR
1	29-A	227	LEU
1	29-A	230	PHE
1	29-A	240	GLU
1	29-A	244	GLN
1	29-A	264	MET
1	29-A	267	SER
1	29-A	269	LYS
1	29-A	273	GLN
1	29-A	276	MET
1	29-A	281	ILE
1	29-A	298	ARG
1	29-A	299	GLN
1	29-A	301	SER
1	29-A	304	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	3	PHE
1	30-A	19	GLN
1	30-A	21	THR
1	30-A	33	ASP
1	30-A	41	HIS
1	30-A	47	GLU
1	30-A	53	ASN
1	30-A	55	GLU
1	30-A	67	LEU
1	30-A	72	ASN
1	30-A	76	ARG
1	30-A	77	VAL
1	30-A	78	ILE
1	30-A	80	HIS
1	30-A	91	VAL
1	30-A	97	LYS
1	30-A	102	LYS
1	30-A	136	ILE
1	30-A	154	TYR
1	30-A	158	SER
1	30-A	169	THR
1	30-A	186	VAL
1	30-A	190	THR
1	30-A	192	GLN
1	30-A	216	ASP
1	30-A	222	ARG
1	30-A	223	PHE
1	30-A	226	THR
1	30-A	227	LEU
1	30-A	228	ASN
1	30-A	229	ASP
1	30-A	232	LEU
1	30-A	242	LEU
1	30-A	244	GLN
1	30-A	254	SER
1	30-A	256	GLN
1	30-A	262	LEU
1	30-A	263	ASP
1	30-A	267	SER
1	30-A	277	ASN
1	30-A	279	ARG
1	30-A	280	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	281	ILE
1	30-A	286	LEU
1	30-A	303	VAL
1	30-A	306	GLN
1	31-A	1	SER
1	31-A	6	MET
1	31-A	24	THR
1	31-A	41	HIS
1	31-A	46	SER
1	31-A	49	MET
1	31-A	53	ASN
1	31-A	67	LEU
1	31-A	74	GLN
1	31-A	75	LEU
1	31-A	76	ARG
1	31-A	78	ILE
1	31-A	80	HIS
1	31-A	100	LYS
1	31-A	110	GLN
1	31-A	121	SER
1	31-A	123	SER
1	31-A	137	LYS
1	31-A	141	LEU
1	31-A	154	TYR
1	31-A	155	ASP
1	31-A	156	CYS
1	31-A	158	SER
1	31-A	165	MET
1	31-A	186	VAL
1	31-A	190	THR
1	31-A	196	THR
1	31-A	197	ASP
1	31-A	216	ASP
1	31-A	221	ASN
1	31-A	226	THR
1	31-A	235	MET
1	31-A	236	LYS
1	31-A	242	LEU
1	31-A	243	THR
1	31-A	277	ASN
1	31-A	286	LEU
1	31-A	300	CYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	301	SER
1	31-A	303	VAL
1	31-A	304	THR
1	32-A	1	SER
1	32-A	19	GLN
1	32-A	24	THR
1	32-A	28	ASN
1	32-A	30	LEU
1	32-A	43	ILE
1	32-A	45	THR
1	32-A	50	LEU
1	32-A	53	ASN
1	32-A	56	ASP
1	32-A	72	ASN
1	32-A	74	GLN
1	32-A	75	LEU
1	32-A	77	VAL
1	32-A	78	ILE
1	32-A	81	SER
1	32-A	90	LYS
1	32-A	93	THR
1	32-A	97	LYS
1	32-A	102	LYS
1	32-A	107	GLN
1	32-A	141	LEU
1	32-A	142	ASN
1	32-A	151	ASN
1	32-A	153	ASP
1	32-A	155	ASP
1	32-A	165	MET
1	32-A	188	ARG
1	32-A	216	ASP
1	32-A	221	ASN
1	32-A	227	LEU
1	32-A	232	LEU
1	32-A	235	MET
1	32-A	238	ASN
1	32-A	242	LEU
1	32-A	249	ILE
1	32-A	256	GLN
1	32-A	274	ASN
1	32-A	276	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	277	ASN
1	32-A	279	ARG
1	32-A	286	LEU
1	32-A	294	PHE
1	32-A	298	ARG
1	32-A	300	CYS
1	33-A	47	GLU
1	33-A	50	LEU
1	33-A	53	ASN
1	33-A	60	ARG
1	33-A	74	GLN
1	33-A	75	LEU
1	33-A	76	ARG
1	33-A	77	VAL
1	33-A	78	ILE
1	33-A	97	LYS
1	33-A	106	ILE
1	33-A	125	VAL
1	33-A	142	ASN
1	33-A	155	ASP
1	33-A	156	CYS
1	33-A	188	ARG
1	33-A	198	THR
1	33-A	216	ASP
1	33-A	221	ASN
1	33-A	236	LYS
1	33-A	242	LEU
1	33-A	273	GLN
1	33-A	276	MET
1	33-A	277	ASN
1	33-A	280	THR
1	33-A	286	LEU
1	33-A	304	THR
1	34-A	1	SER
1	34-A	5	LYS
1	34-A	24	THR
1	34-A	43	ILE
1	34-A	46	SER
1	34-A	49	MET
1	34-A	50	LEU
1	34-A	53	ASN
1	34-A	61	LYS

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	69	GLN
1	34-A	75	LEU
1	34-A	76	ARG
1	34-A	77	VAL
1	34-A	78	ILE
1	34-A	80	HIS
1	34-A	83	GLN
1	34-A	92	ASP
1	34-A	97	LYS
1	34-A	100	LYS
1	34-A	106	ILE
1	34-A	107	GLN
1	34-A	153	ASP
1	34-A	192	GLN
1	34-A	216	ASP
1	34-A	221	ASN
1	34-A	224	THR
1	34-A	225	THR
1	34-A	229	ASP
1	34-A	232	LEU
1	34-A	235	MET
1	34-A	236	LYS
1	34-A	242	LEU
1	34-A	243	THR
1	34-A	254	SER
1	34-A	256	GLN
1	34-A	267	SER
1	34-A	274	ASN
1	34-A	286	LEU
1	34-A	306	GLN
1	35-A	6	MET
1	35-A	24	THR
1	35-A	45	THR
1	35-A	53	ASN
1	35-A	56	ASP
1	35-A	61	LYS
1	35-A	67	LEU
1	35-A	69	GLN
1	35-A	73	VAL
1	35-A	74	GLN
1	35-A	77	VAL
1	35-A	82	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	93	THR
1	35-A	97	LYS
1	35-A	100	LYS
1	35-A	102	LYS
1	35-A	104	VAL
1	35-A	107	GLN
1	35-A	110	GLN
1	35-A	121	SER
1	35-A	122	PRO
1	35-A	125	VAL
1	35-A	134	PHE
1	35-A	137	LYS
1	35-A	166	GLU
1	35-A	192	GLN
1	35-A	217	ARG
1	35-A	221	ASN
1	35-A	222	ARG
1	35-A	229	ASP
1	35-A	232	LEU
1	35-A	236	LYS
1	35-A	238	ASN
1	35-A	242	LEU
1	35-A	243	THR
1	35-A	249	ILE
1	35-A	256	GLN
1	35-A	262	LEU
1	35-A	267	SER
1	35-A	277	ASN
1	35-A	281	ILE
1	35-A	284	SER
1	35-A	294	PHE
1	35-A	298	ARG
1	35-A	299	GLN
1	36-A	24	THR
1	36-A	27	LEU
1	36-A	41	HIS
1	36-A	43	ILE
1	36-A	46	SER
1	36-A	48	ASP
1	36-A	50	LEU
1	36-A	51	ASN
1	36-A	53	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	67	LEU
1	36-A	69	GLN
1	36-A	72	ASN
1	36-A	75	LEU
1	36-A	76	ARG
1	36-A	78	ILE
1	36-A	80	HIS
1	36-A	88	LYS
1	36-A	90	LYS
1	36-A	91	VAL
1	36-A	93	THR
1	36-A	97	LYS
1	36-A	105	ARG
1	36-A	110	GLN
1	36-A	125	VAL
1	36-A	136	ILE
1	36-A	137	LYS
1	36-A	142	ASN
1	36-A	151	ASN
1	36-A	153	ASP
1	36-A	156	CYS
1	36-A	189	GLN
1	36-A	197	ASP
1	36-A	205	LEU
1	36-A	217	ARG
1	36-A	221	ASN
1	36-A	223	PHE
1	36-A	224	THR
1	36-A	225	THR
1	36-A	235	MET
1	36-A	236	LYS
1	36-A	238	ASN
1	36-A	240	GLU
1	36-A	243	THR
1	36-A	249	ILE
1	36-A	256	GLN
1	36-A	267	SER
1	36-A	277	ASN
1	36-A	281	ILE
1	36-A	300	CYS
1	36-A	306	GLN
1	37-A	6	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	22	CYS
1	37-A	30	LEU
1	37-A	45	THR
1	37-A	46	SER
1	37-A	48	ASP
1	37-A	50	LEU
1	37-A	53	ASN
1	37-A	60	ARG
1	37-A	67	LEU
1	37-A	69	GLN
1	37-A	72	ASN
1	37-A	75	LEU
1	37-A	76	ARG
1	37-A	77	VAL
1	37-A	78	ILE
1	37-A	81	SER
1	37-A	93	THR
1	37-A	97	LYS
1	37-A	102	LYS
1	37-A	105	ARG
1	37-A	152	ILE
1	37-A	153	ASP
1	37-A	156	CYS
1	37-A	158	SER
1	37-A	165	MET
1	37-A	171	VAL
1	37-A	188	ARG
1	37-A	189	GLN
1	37-A	192	GLN
1	37-A	196	THR
1	37-A	216	ASP
1	37-A	217	ARG
1	37-A	221	ASN
1	37-A	223	PHE
1	37-A	224	THR
1	37-A	232	LEU
1	37-A	240	GLU
1	37-A	244	GLN
1	37-A	253	LEU
1	37-A	256	GLN
1	37-A	269	LYS
1	37-A	274	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	277	ASN
1	37-A	279	ARG
1	37-A	281	ILE
1	37-A	298	ARG
1	37-A	299	GLN
1	37-A	300	CYS
1	37-A	303	VAL
1	37-A	304	THR
1	38-A	1	SER
1	38-A	12	LYS
1	38-A	27	LEU
1	38-A	47	GLU
1	38-A	48	ASP
1	38-A	50	LEU
1	38-A	53	ASN
1	38-A	60	ARG
1	38-A	61	LYS
1	38-A	65	ASN
1	38-A	69	GLN
1	38-A	72	ASN
1	38-A	73	VAL
1	38-A	75	LEU
1	38-A	76	ARG
1	38-A	77	VAL
1	38-A	80	HIS
1	38-A	97	LYS
1	38-A	119	ASN
1	38-A	154	TYR
1	38-A	155	ASP
1	38-A	165	MET
1	38-A	189	GLN
1	38-A	214	ASN
1	38-A	222	ARG
1	38-A	236	LYS
1	38-A	245	ASP
1	38-A	263	ASP
1	38-A	269	LYS
1	38-A	273	GLN
1	38-A	279	ARG
1	38-A	281	ILE
1	38-A	288	GLU
1	38-A	298	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	301	SER
1	38-A	303	VAL
1	38-A	304	THR
1	38-A	305	PHE
1	38-A	306	GLN
1	39-A	12	LYS
1	39-A	19	GLN
1	39-A	21	THR
1	39-A	24	THR
1	39-A	30	LEU
1	39-A	31	TRP
1	39-A	47	GLU
1	39-A	48	ASP
1	39-A	50	LEU
1	39-A	51	ASN
1	39-A	53	ASN
1	39-A	60	ARG
1	39-A	73	VAL
1	39-A	75	LEU
1	39-A	76	ARG
1	39-A	77	VAL
1	39-A	78	ILE
1	39-A	80	HIS
1	39-A	87	LEU
1	39-A	91	VAL
1	39-A	93	THR
1	39-A	110	GLN
1	39-A	121	SER
1	39-A	136	ILE
1	39-A	142	ASN
1	39-A	151	ASN
1	39-A	154	TYR
1	39-A	158	SER
1	39-A	165	MET
1	39-A	188	ARG
1	39-A	222	ARG
1	39-A	225	THR
1	39-A	228	ASN
1	39-A	232	LEU
1	39-A	236	LYS
1	39-A	242	LEU
1	39-A	243	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	245	ASP
1	39-A	249	ILE
1	39-A	254	SER
1	39-A	256	GLN
1	39-A	277	ASN
1	39-A	279	ARG
1	39-A	281	ILE
1	39-A	298	ARG
1	39-A	300	CYS
1	39-A	304	THR
1	39-A	305	PHE
1	40-A	24	THR
1	40-A	30	LEU
1	40-A	47	GLU
1	40-A	51	ASN
1	40-A	53	ASN
1	40-A	55	GLU
1	40-A	59	ILE
1	40-A	60	ARG
1	40-A	69	GLN
1	40-A	72	ASN
1	40-A	75	LEU
1	40-A	76	ARG
1	40-A	77	VAL
1	40-A	81	SER
1	40-A	102	LYS
1	40-A	104	VAL
1	40-A	121	SER
1	40-A	123	SER
1	40-A	136	ILE
1	40-A	142	ASN
1	40-A	145	CYS
1	40-A	151	ASN
1	40-A	188	ARG
1	40-A	196	THR
1	40-A	216	ASP
1	40-A	224	THR
1	40-A	225	THR
1	40-A	228	ASN
1	40-A	232	LEU
1	40-A	235	MET
1	40-A	236	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	240	GLU
1	40-A	242	LEU
1	40-A	245	ASP
1	40-A	249	ILE
1	40-A	254	SER
1	40-A	256	GLN
1	40-A	263	ASP
1	40-A	270	GLU
1	40-A	276	MET
1	40-A	279	ARG
1	40-A	281	ILE
1	40-A	297	VAL
1	40-A	298	ARG
1	40-A	299	GLN
1	40-A	301	SER
1	40-A	304	THR
1	40-A	306	GLN
1	41-A	12	LYS
1	41-A	19	GLN
1	41-A	51	ASN
1	41-A	53	ASN
1	41-A	59	ILE
1	41-A	60	ARG
1	41-A	67	LEU
1	41-A	72	ASN
1	41-A	73	VAL
1	41-A	76	ARG
1	41-A	78	ILE
1	41-A	90	LYS
1	41-A	93	THR
1	41-A	123	SER
1	41-A	136	ILE
1	41-A	151	ASN
1	41-A	155	ASP
1	41-A	165	MET
1	41-A	186	VAL
1	41-A	190	THR
1	41-A	192	GLN
1	41-A	216	ASP
1	41-A	221	ASN
1	41-A	232	LEU
1	41-A	236	LYS

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	238	ASN
1	41-A	240	GLU
1	41-A	242	LEU
1	41-A	249	ILE
1	41-A	253	LEU
1	41-A	254	SER
1	41-A	256	GLN
1	41-A	270	GLU
1	41-A	279	ARG
1	41-A	280	THR
1	41-A	281	ILE
1	41-A	298	ARG
1	41-A	303	VAL
1	41-A	304	THR
1	41-A	305	PHE
1	41-A	306	GLN
1	42-A	24	THR
1	42-A	26	THR
1	42-A	46	SER
1	42-A	47	GLU
1	42-A	53	ASN
1	42-A	59	ILE
1	42-A	60	ARG
1	42-A	67	LEU
1	42-A	69	GLN
1	42-A	72	ASN
1	42-A	75	LEU
1	42-A	76	ARG
1	42-A	97	LYS
1	42-A	100	LYS
1	42-A	107	GLN
1	42-A	119	ASN
1	42-A	158	SER
1	42-A	188	ARG
1	42-A	190	THR
1	42-A	196	THR
1	42-A	221	ASN
1	42-A	223	PHE
1	42-A	224	THR
1	42-A	232	LEU
1	42-A	238	ASN
1	42-A	242	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	243	THR
1	42-A	254	SER
1	42-A	267	SER
1	42-A	280	THR
1	42-A	281	ILE
1	42-A	299	GLN
1	42-A	300	CYS
1	42-A	301	SER
1	42-A	305	PHE
1	42-A	306	GLN
1	43-A	34	ASP
1	43-A	46	SER
1	43-A	53	ASN
1	43-A	58	LEU
1	43-A	59	ILE
1	43-A	60	ARG
1	43-A	67	LEU
1	43-A	72	ASN
1	43-A	73	VAL
1	43-A	74	GLN
1	43-A	82	MET
1	43-A	87	LEU
1	43-A	97	LYS
1	43-A	119	ASN
1	43-A	125	VAL
1	43-A	128	CYS
1	43-A	137	LYS
1	43-A	142	ASN
1	43-A	165	MET
1	43-A	189	GLN
1	43-A	190	THR
1	43-A	198	THR
1	43-A	205	LEU
1	43-A	216	ASP
1	43-A	221	ASN
1	43-A	222	ARG
1	43-A	223	PHE
1	43-A	224	THR
1	43-A	232	LEU
1	43-A	238	ASN
1	43-A	240	GLU
1	43-A	242	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	243	THR
1	43-A	254	SER
1	43-A	256	GLN
1	43-A	270	GLU
1	43-A	279	ARG
1	43-A	280	THR
1	43-A	286	LEU
1	43-A	288	GLU
1	43-A	297	VAL
1	43-A	298	ARG
1	43-A	304	THR
1	43-A	305	PHE
1	44-A	6	MET
1	44-A	22	CYS
1	44-A	33	ASP
1	44-A	41	HIS
1	44-A	53	ASN
1	44-A	62	SER
1	44-A	67	LEU
1	44-A	76	ARG
1	44-A	77	VAL
1	44-A	80	HIS
1	44-A	92	ASP
1	44-A	97	LYS
1	44-A	110	GLN
1	44-A	122	PRO
1	44-A	128	CYS
1	44-A	137	LYS
1	44-A	142	ASN
1	44-A	152	ILE
1	44-A	153	ASP
1	44-A	158	SER
1	44-A	188	ARG
1	44-A	190	THR
1	44-A	196	THR
1	44-A	216	ASP
1	44-A	221	ASN
1	44-A	224	THR
1	44-A	227	LEU
1	44-A	228	ASN
1	44-A	232	LEU
1	44-A	236	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	44-A	242	LEU
1	44-A	256	GLN
1	44-A	276	MET
1	44-A	277	ASN
1	44-A	279	ARG
1	44-A	280	THR
1	44-A	286	LEU
1	44-A	303	VAL
1	44-A	306	GLN
1	45-A	24	THR
1	45-A	25	THR
1	45-A	43	ILE
1	45-A	47	GLU
1	45-A	53	ASN
1	45-A	67	LEU
1	45-A	69	GLN
1	45-A	72	ASN
1	45-A	73	VAL
1	45-A	76	ARG
1	45-A	77	VAL
1	45-A	90	LYS
1	45-A	102	LYS
1	45-A	104	VAL
1	45-A	107	GLN
1	45-A	110	GLN
1	45-A	152	ILE
1	45-A	165	MET
1	45-A	188	ARG
1	45-A	217	ARG
1	45-A	221	ASN
1	45-A	224	THR
1	45-A	226	THR
1	45-A	232	LEU
1	45-A	238	ASN
1	45-A	240	GLU
1	45-A	249	ILE
1	45-A	256	GLN
1	45-A	273	GLN
1	45-A	274	ASN
1	45-A	276	MET
1	45-A	279	ARG
1	45-A	280	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	45-A	286	LEU
1	45-A	288	GLU
1	45-A	297	VAL
1	45-A	298	ARG
1	45-A	299	GLN
1	45-A	305	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (413) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	53	ASN
1	1-A	84	ASN
1	1-A	180	ASN
1	1-A	214	ASN
1	1-A	238	ASN
1	1-A	273	GLN
1	2-A	53	ASN
1	2-A	84	ASN
1	2-A	151	ASN
1	2-A	180	ASN
1	2-A	238	ASN
1	2-A	244	GLN
1	2-A	256	GLN
1	3-A	19	GLN
1	3-A	53	ASN
1	3-A	63	ASN
1	3-A	151	ASN
1	3-A	214	ASN
1	3-A	273	GLN
1	4-A	19	GLN
1	4-A	53	ASN
1	4-A	64	HIS
1	4-A	69	GLN
1	4-A	142	ASN
1	4-A	214	ASN
1	4-A	274	ASN
1	4-A	277	ASN
1	5-A	19	GLN
1	5-A	53	ASN
1	5-A	69	GLN
1	5-A	74	GLN
1	5-A	119	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	151	ASN
1	5-A	214	ASN
1	5-A	221	ASN
1	5-A	228	ASN
1	5-A	274	ASN
1	5-A	277	ASN
1	6-A	19	GLN
1	6-A	41	HIS
1	6-A	53	ASN
1	6-A	74	GLN
1	6-A	80	HIS
1	6-A	189	GLN
1	6-A	221	ASN
1	6-A	274	ASN
1	7-A	53	ASN
1	7-A	69	GLN
1	7-A	74	GLN
1	7-A	142	ASN
1	7-A	151	ASN
1	7-A	214	ASN
1	7-A	228	ASN
1	7-A	238	ASN
1	7-A	256	GLN
1	7-A	274	ASN
1	7-A	277	ASN
1	8-A	51	ASN
1	8-A	53	ASN
1	8-A	69	GLN
1	8-A	74	GLN
1	8-A	110	GLN
1	8-A	142	ASN
1	8-A	151	ASN
1	8-A	189	GLN
1	8-A	214	ASN
1	8-A	228	ASN
1	8-A	274	ASN
1	8-A	277	ASN
1	9-A	74	GLN
1	9-A	80	HIS
1	9-A	142	ASN
1	9-A	151	ASN
1	9-A	189	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	214	ASN
1	9-A	238	ASN
1	9-A	277	ASN
1	10-A	51	ASN
1	10-A	53	ASN
1	10-A	119	ASN
1	10-A	142	ASN
1	10-A	151	ASN
1	10-A	214	ASN
1	10-A	238	ASN
1	10-A	277	ASN
1	10-A	306	GLN
1	11-A	19	GLN
1	11-A	41	HIS
1	11-A	51	ASN
1	11-A	64	HIS
1	11-A	74	GLN
1	11-A	214	ASN
1	11-A	238	ASN
1	11-A	273	GLN
1	12-A	51	ASN
1	12-A	63	ASN
1	12-A	69	GLN
1	12-A	74	GLN
1	12-A	107	GLN
1	12-A	110	GLN
1	12-A	189	GLN
1	12-A	214	ASN
1	12-A	238	ASN
1	12-A	256	GLN
1	12-A	306	GLN
1	13-A	41	HIS
1	13-A	69	GLN
1	13-A	74	GLN
1	13-A	107	GLN
1	13-A	110	GLN
1	13-A	119	ASN
1	13-A	142	ASN
1	13-A	238	ASN
1	13-A	273	GLN
1	13-A	274	ASN
1	13-A	306	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	72	ASN
1	14-A	74	GLN
1	14-A	107	GLN
1	14-A	119	ASN
1	14-A	221	ASN
1	14-A	244	GLN
1	14-A	306	GLN
1	15-A	51	ASN
1	15-A	63	ASN
1	15-A	110	GLN
1	15-A	119	ASN
1	15-A	151	ASN
1	15-A	221	ASN
1	15-A	228	ASN
1	16-A	41	HIS
1	16-A	51	ASN
1	16-A	142	ASN
1	16-A	299	GLN
1	17-A	41	HIS
1	17-A	51	ASN
1	17-A	74	GLN
1	17-A	119	ASN
1	17-A	151	ASN
1	17-A	256	GLN
1	17-A	273	GLN
1	17-A	299	GLN
1	18-A	19	GLN
1	18-A	41	HIS
1	18-A	69	GLN
1	18-A	119	ASN
1	18-A	151	ASN
1	18-A	277	ASN
1	18-A	306	GLN
1	19-A	64	HIS
1	19-A	84	ASN
1	19-A	228	ASN
1	19-A	244	GLN
1	19-A	273	GLN
1	20-A	19	GLN
1	20-A	51	ASN
1	20-A	74	GLN
1	20-A	84	ASN

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	119	ASN
1	20-A	164	HIS
1	20-A	214	ASN
1	20-A	238	ASN
1	21-A	19	GLN
1	21-A	41	HIS
1	21-A	51	ASN
1	21-A	69	GLN
1	21-A	80	HIS
1	21-A	151	ASN
1	21-A	238	ASN
1	21-A	273	GLN
1	22-A	63	ASN
1	22-A	74	GLN
1	22-A	107	GLN
1	22-A	180	ASN
1	22-A	214	ASN
1	22-A	244	GLN
1	22-A	273	GLN
1	22-A	277	ASN
1	22-A	306	GLN
1	23-A	63	ASN
1	23-A	69	GLN
1	23-A	72	ASN
1	23-A	107	GLN
1	23-A	142	ASN
1	23-A	221	ASN
1	23-A	256	GLN
1	23-A	277	ASN
1	24-A	64	HIS
1	24-A	107	GLN
1	24-A	238	ASN
1	24-A	256	GLN
1	24-A	299	GLN
1	25-A	41	HIS
1	25-A	142	ASN
1	25-A	221	ASN
1	25-A	273	GLN
1	26-A	19	GLN
1	26-A	65	ASN
1	26-A	69	GLN
1	26-A	74	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	80	HIS
1	26-A	84	ASN
1	26-A	142	ASN
1	26-A	151	ASN
1	26-A	180	ASN
1	26-A	221	ASN
1	26-A	238	ASN
1	26-A	299	GLN
1	27-A	51	ASN
1	27-A	65	ASN
1	27-A	110	GLN
1	27-A	151	ASN
1	27-A	180	ASN
1	27-A	221	ASN
1	27-A	228	ASN
1	27-A	277	ASN
1	27-A	299	GLN
1	28-A	41	HIS
1	28-A	51	ASN
1	28-A	53	ASN
1	28-A	65	ASN
1	28-A	69	GLN
1	28-A	80	HIS
1	28-A	83	GLN
1	28-A	110	GLN
1	28-A	127	GLN
1	28-A	180	ASN
1	28-A	189	GLN
1	29-A	41	HIS
1	29-A	53	ASN
1	29-A	65	ASN
1	29-A	69	GLN
1	29-A	74	GLN
1	29-A	84	ASN
1	29-A	110	GLN
1	29-A	142	ASN
1	29-A	221	ASN
1	29-A	228	ASN
1	29-A	273	GLN
1	29-A	274	ASN
1	29-A	277	ASN
1	29-A	299	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	53	ASN
1	30-A	65	ASN
1	30-A	69	GLN
1	30-A	83	GLN
1	30-A	95	ASN
1	30-A	110	GLN
1	30-A	180	ASN
1	30-A	228	ASN
1	30-A	238	ASN
1	30-A	277	ASN
1	30-A	299	GLN
1	31-A	19	GLN
1	31-A	41	HIS
1	31-A	53	ASN
1	31-A	63	ASN
1	31-A	64	HIS
1	31-A	65	ASN
1	31-A	74	GLN
1	31-A	83	GLN
1	31-A	84	ASN
1	31-A	110	GLN
1	31-A	189	GLN
1	31-A	221	ASN
1	31-A	228	ASN
1	31-A	256	GLN
1	31-A	274	ASN
1	31-A	299	GLN
1	32-A	53	ASN
1	32-A	72	ASN
1	32-A	74	GLN
1	32-A	83	GLN
1	32-A	214	ASN
1	32-A	228	ASN
1	32-A	238	ASN
1	32-A	256	GLN
1	33-A	19	GLN
1	33-A	41	HIS
1	33-A	53	ASN
1	33-A	65	ASN
1	33-A	69	GLN
1	33-A	74	GLN
1	33-A	80	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	83	GLN
1	33-A	84	ASN
1	33-A	142	ASN
1	33-A	180	ASN
1	33-A	189	GLN
1	33-A	221	ASN
1	33-A	238	ASN
1	33-A	273	GLN
1	33-A	299	GLN
1	34-A	53	ASN
1	34-A	65	ASN
1	34-A	80	HIS
1	34-A	107	GLN
1	34-A	180	ASN
1	34-A	299	GLN
1	35-A	41	HIS
1	35-A	53	ASN
1	35-A	65	ASN
1	35-A	72	ASN
1	35-A	80	HIS
1	35-A	84	ASN
1	35-A	110	GLN
1	35-A	180	ASN
1	35-A	221	ASN
1	35-A	256	GLN
1	35-A	274	ASN
1	35-A	277	ASN
1	35-A	299	GLN
1	36-A	19	GLN
1	36-A	41	HIS
1	36-A	51	ASN
1	36-A	53	ASN
1	36-A	63	ASN
1	36-A	65	ASN
1	36-A	69	GLN
1	36-A	72	ASN
1	36-A	74	GLN
1	36-A	80	HIS
1	36-A	110	GLN
1	36-A	180	ASN
1	36-A	189	GLN
1	36-A	221	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	274	ASN
1	37-A	53	ASN
1	37-A	65	ASN
1	37-A	69	GLN
1	37-A	72	ASN
1	37-A	74	GLN
1	37-A	80	HIS
1	37-A	142	ASN
1	37-A	180	ASN
1	37-A	256	GLN
1	37-A	273	GLN
1	38-A	51	ASN
1	38-A	53	ASN
1	38-A	69	GLN
1	38-A	72	ASN
1	38-A	80	HIS
1	38-A	84	ASN
1	38-A	142	ASN
1	38-A	151	ASN
1	38-A	214	ASN
1	38-A	238	ASN
1	39-A	51	ASN
1	39-A	53	ASN
1	39-A	63	ASN
1	39-A	80	HIS
1	39-A	110	GLN
1	39-A	119	ASN
1	39-A	151	ASN
1	39-A	180	ASN
1	39-A	189	GLN
1	39-A	244	GLN
1	39-A	273	GLN
1	39-A	274	ASN
1	39-A	277	ASN
1	40-A	41	HIS
1	40-A	51	ASN
1	40-A	53	ASN
1	40-A	63	ASN
1	40-A	80	HIS
1	40-A	110	GLN
1	40-A	151	ASN
1	40-A	163	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	273	GLN
1	41-A	41	HIS
1	41-A	51	ASN
1	41-A	53	ASN
1	41-A	72	ASN
1	41-A	74	GLN
1	41-A	80	HIS
1	41-A	84	ASN
1	41-A	110	GLN
1	41-A	180	ASN
1	41-A	189	GLN
1	41-A	238	ASN
1	42-A	19	GLN
1	42-A	51	ASN
1	42-A	53	ASN
1	42-A	80	HIS
1	42-A	277	ASN
1	42-A	299	GLN
1	42-A	306	GLN
1	43-A	51	ASN
1	43-A	53	ASN
1	43-A	69	GLN
1	43-A	80	HIS
1	43-A	119	ASN
1	43-A	151	ASN
1	43-A	244	GLN
1	43-A	273	GLN
1	43-A	277	ASN
1	44-A	41	HIS
1	44-A	51	ASN
1	44-A	53	ASN
1	44-A	256	GLN
1	44-A	273	GLN
1	44-A	277	ASN
1	44-A	306	GLN
1	45-A	53	ASN
1	45-A	72	ASN
1	45-A	84	ASN
1	45-A	95	ASN
1	45-A	119	ASN
1	45-A	151	ASN
1	45-A	180	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	45-A	256	GLN
1	45-A	273	GLN
1	45-A	274	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 135 ligands modelled in this entry, 45 are monoatomic - leaving 90 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](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

### 6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

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

### 6.3 Carbohydrates

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

### 6.4 Ligands

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

### 6.5 Other polymers

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