



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 31, 2022 – 10:36 AM EDT

PDB ID : 7MHQ
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 310 K
Authors : Ebrahim, A.; Riley, B.T.; Kumaran, D.; Andi, B.; Fuchs, M.R.; McSweeney, S.; Keedy, D.A.
Deposited on : 2021-04-15
Resolution : 1.96 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	FAILED
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.27

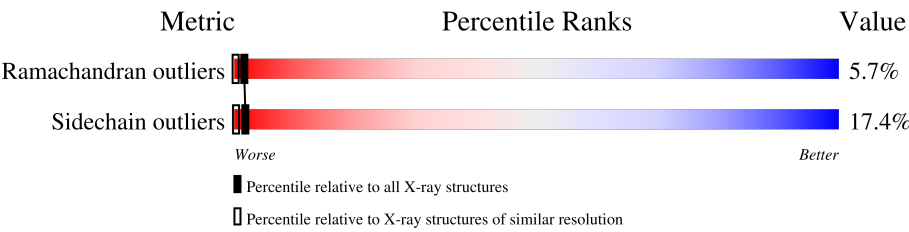
1 Overall quality at a glance i

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.96 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	2678 (1.96-1.96)
Sidechain outliers	138945	2678 (1.96-1.96)


























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

Note EDS failed to run properly.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	306	79% 18% .
1	10-A	306	78% 17% . .
1	11-A	306	75% 20% 5% .
1	12-A	306	80% 15% . .
1	13-A	306	81% 16% .
1	14-A	306	82% 14% .
1	15-A	306	79% 17% .
1	16-A	306	78% 18% .
1	17-A	306	76% 19% . .

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	18-A	306	
1	19-A	306	
1	2-A	306	
1	20-A	306	
1	21-A	306	
1	22-A	306	
1	23-A	306	
1	24-A	306	
1	25-A	306	
1	26-A	306	
1	27-A	306	
1	28-A	306	
1	29-A	306	
1	3-A	306	
1	30-A	306	
1	31-A	306	
1	32-A	306	
1	33-A	306	
1	34-A	306	
1	35-A	306	
1	36-A	306	
1	4-A	306	
1	5-A	306	
1	6-A	306	
1	7-A	306	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	8-A	306	<div><div></div><div>81%</div><div>15%</div><div>.</div><div>.</div></div>
1	9-A	306	<div><div></div><div>80%</div><div>15%</div><div>.</div><div>.</div></div>

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 170649 atoms, of which 83700 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			

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



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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

- 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		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	4-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	5-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	6-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	7-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	8-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	9-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	10-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	11-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	12-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	13-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	14-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	15-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	16-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	17-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	18-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	19-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	20-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	21-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	22-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	23-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	24-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
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

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	2-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	3-A	46	Total 46	O 46	0	0
4	4-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	5-A	42	Total 42	O 42	0	0
4	6-A	43	Total 43	O 43	0	0
4	7-A	35	Total 35	O 35	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	8-A	33	Total 33	O 33	0	0
4	9-A	39	Total 39	O 39	0	0
4	10-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	11-A	41	Total 41	O 41	0	0
4	12-A	42	Total 42	O 42	0	0
4	13-A	45	Total 45	O 45	0	0
4	14-A	43	Total 43	O 43	0	0
4	15-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	16-A	30	Total 30	O 30	0	0
4	17-A	34	Total 34	O 34	0	0
4	18-A	46	Total 46	O 46	0	0
4	19-A	41	Total 41	O 41	0	0
4	20-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	21-A	42	Total 42	O 42	0	0
4	22-A	44	Total 44	O 44	0	0
4	23-A	40	Total 40	O 40	0	0
4	24-A	33	Total 33	O 33	0	0
4	25-A	36	Total 36	O 36	0	0
4	26-A	41	Total 41	O 41	0	0
4	27-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	28-A	39	Total 39	O 39	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

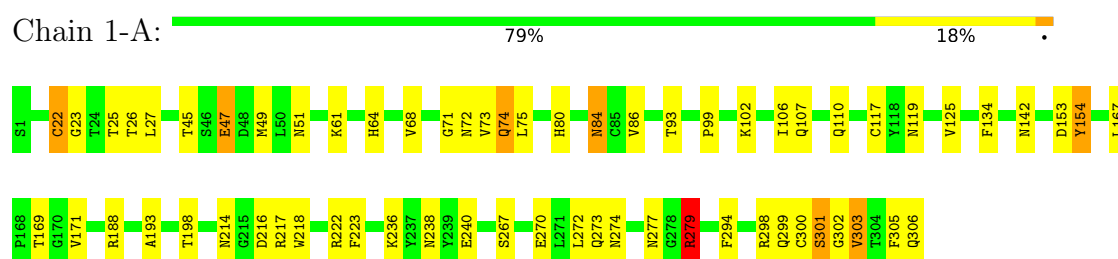
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	29-A	38	Total 38	O 38	0	0
4	30-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	31-A	34	Total 34	O 34	0	0
4	32-A	34	Total 34	O 34	0	0
4	33-A	39	Total 39	O 39	0	0
4	34-A	48	Total 48	O 48	0	0
4	35-A	37	Total 37	O 37	0	0
4	36-A	33	Total 33	O 33	0	0

3 Residue-property plots [i](#)

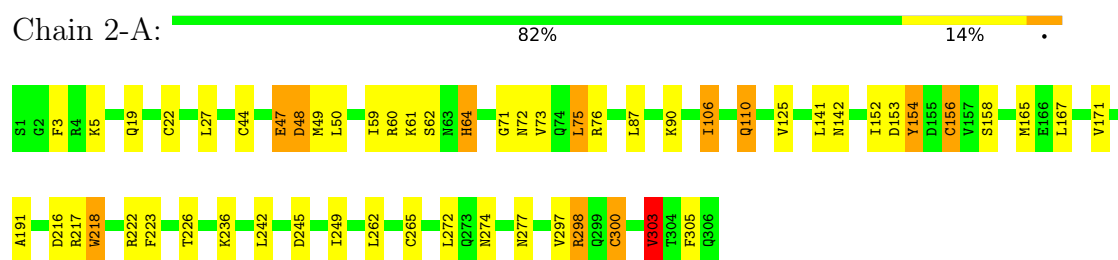
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-coded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



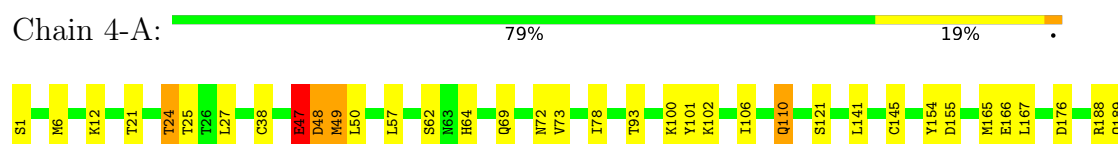
- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase





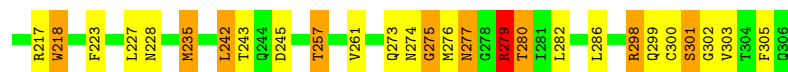
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 5-A: 81% 17% ..



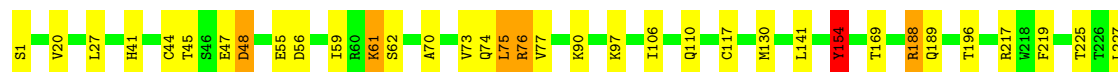
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 6-A: 79% 17% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 7-A: 84% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 8-A: 81% 15% ..



- Molecule 1: 3C-like proteinase

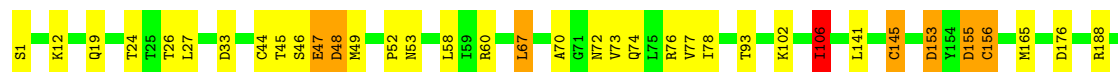
Chain 9-A: 80% 15% ..





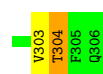
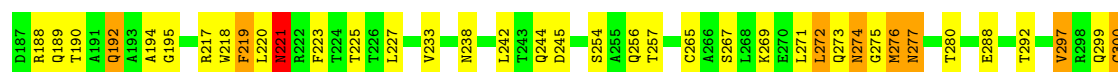
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 10-A: 78% 17% . .



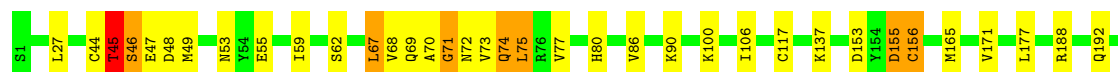
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 11-A: 75% 20% 5% . .



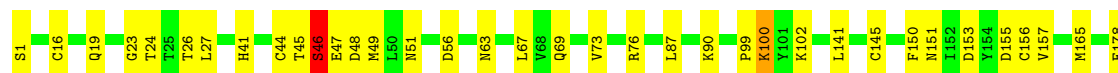
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 12-A: 80% 15% . .



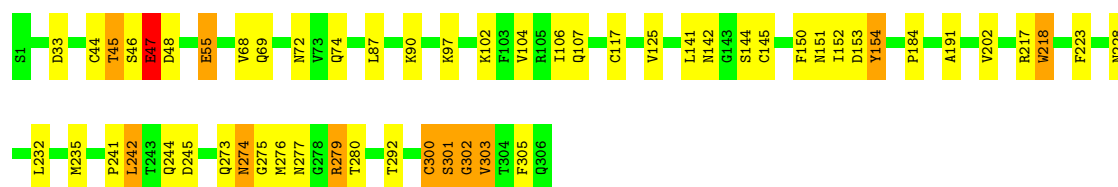
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 13-A: 81% 16% .



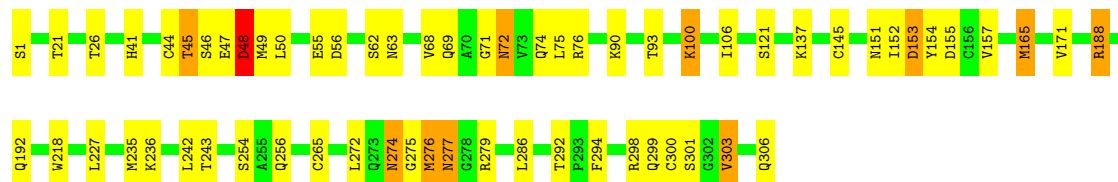
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 14-A: 82% 14% .



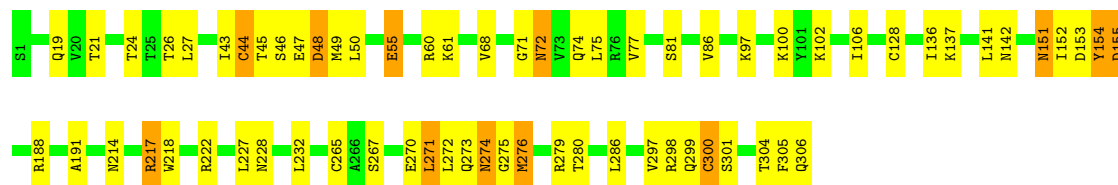
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 15-A: 79% 17% .



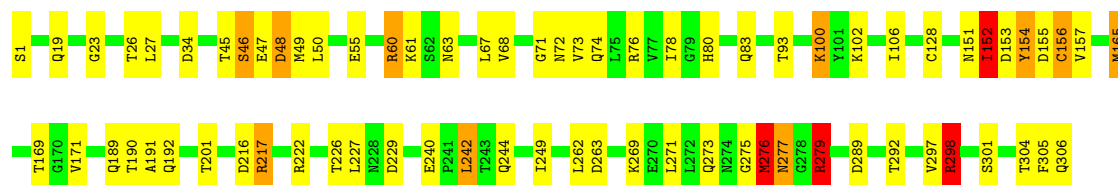
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 16-A: 78% 18% .



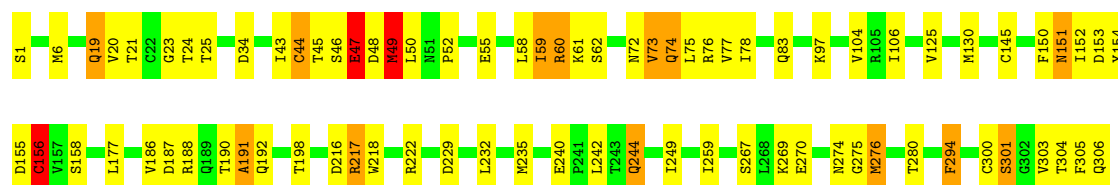
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 17-A: 76% 19% . .



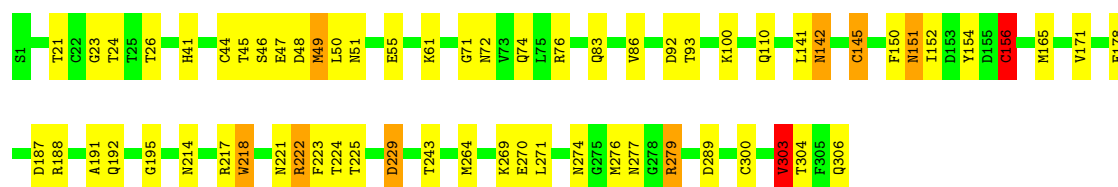
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 18-A: 74% 21% . .



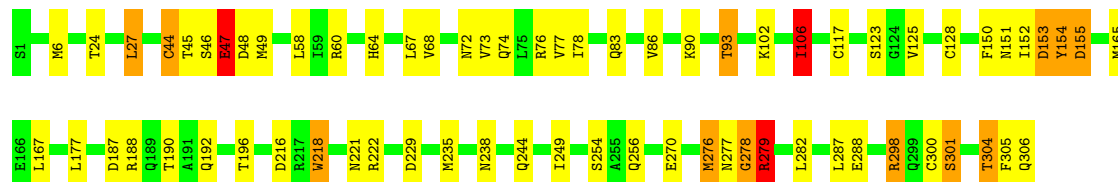
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 19-A: 79% 18% . .



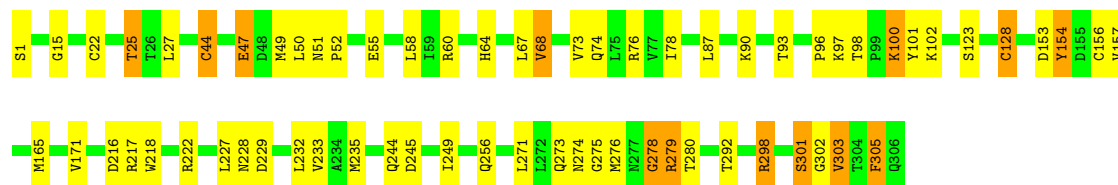
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 20-A: 77% 18% . .



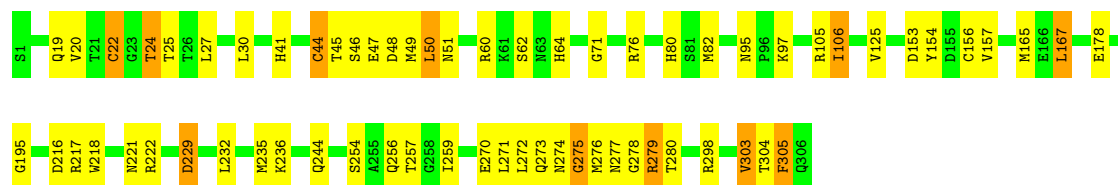
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 21-A: 78% 17% .



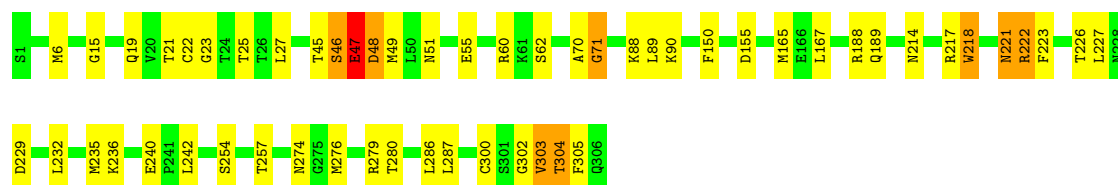
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 22-A: 79% 18% .



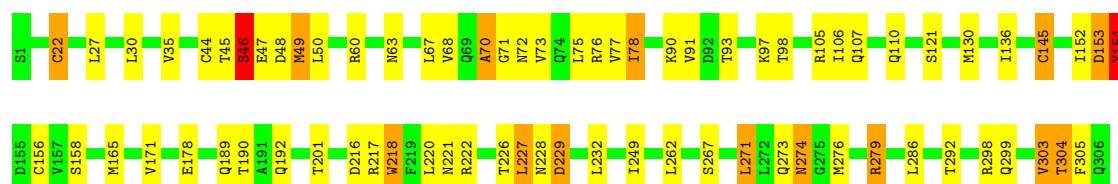
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 23-A: 82% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 24-A: 76% 19% 5% .



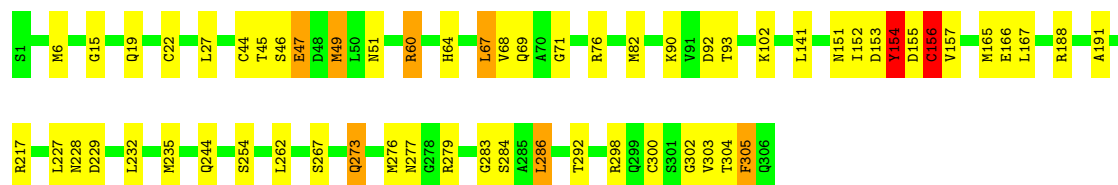
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 25-A: 75% 21% .



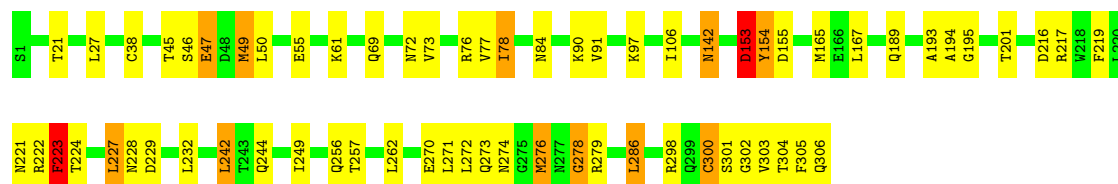
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 26-A: 80% 17% ..



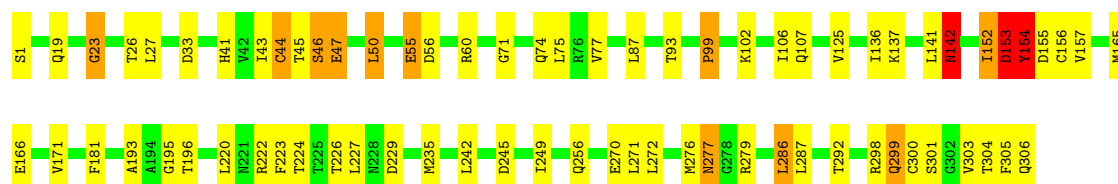
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 27-A: 78% 17% . .

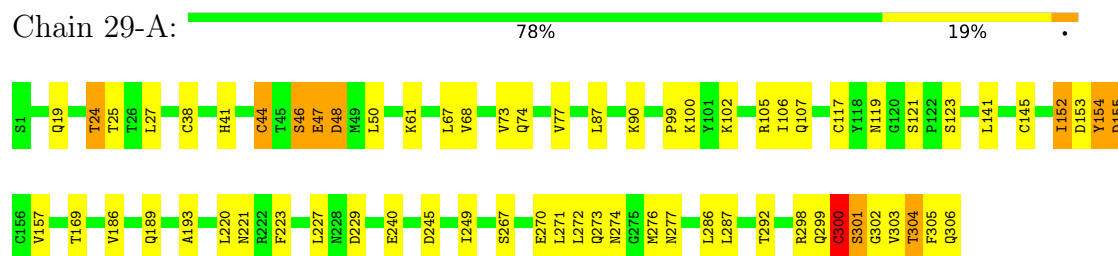


- Molecule 1: 3C-like proteinase

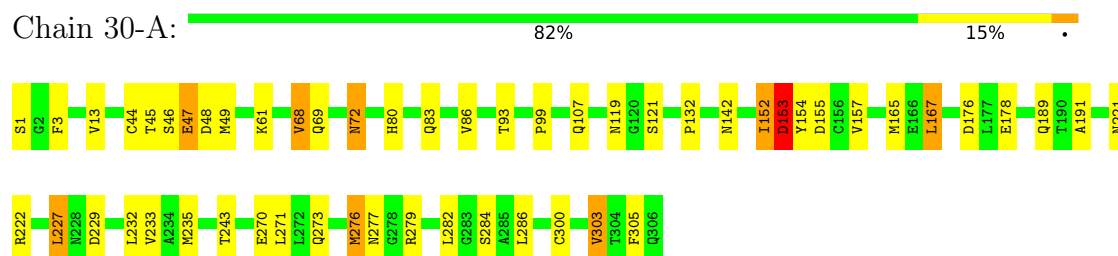
Chain 28-A: 76% 19% . .



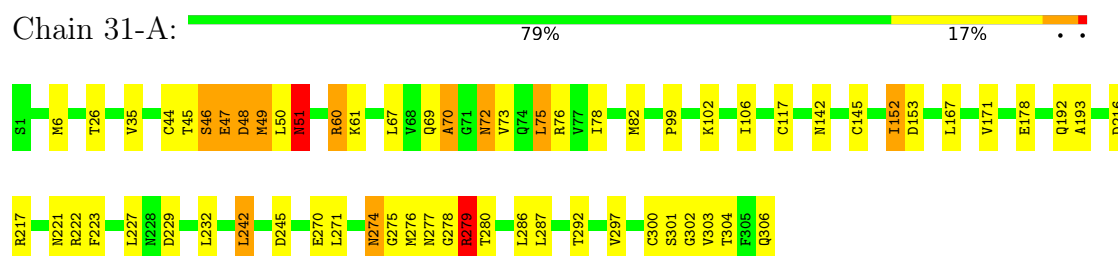
• Molecule 1: 3C-like proteinase



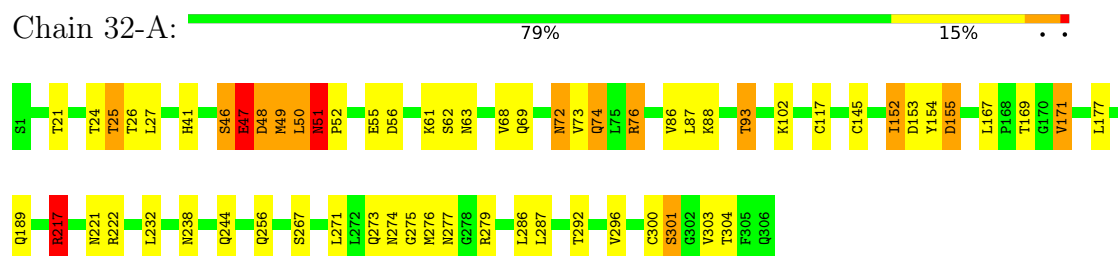
• Molecule 1: 3C-like proteinase



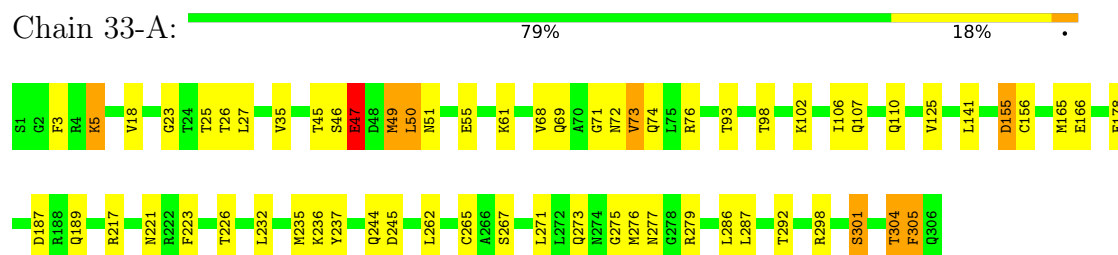
• Molecule 1: 3C-like proteinase



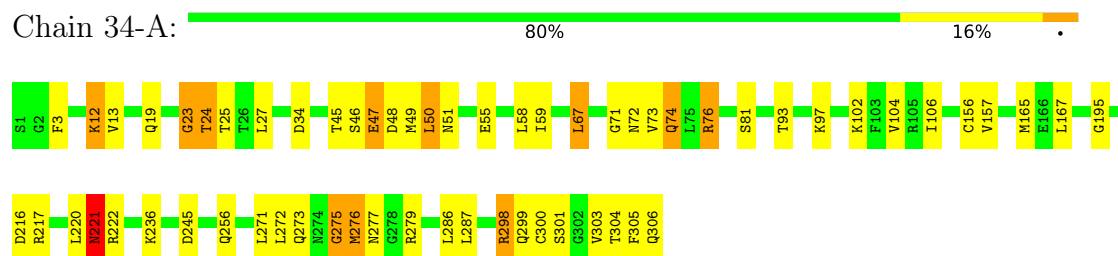
• Molecule 1: 3C-like proteinase



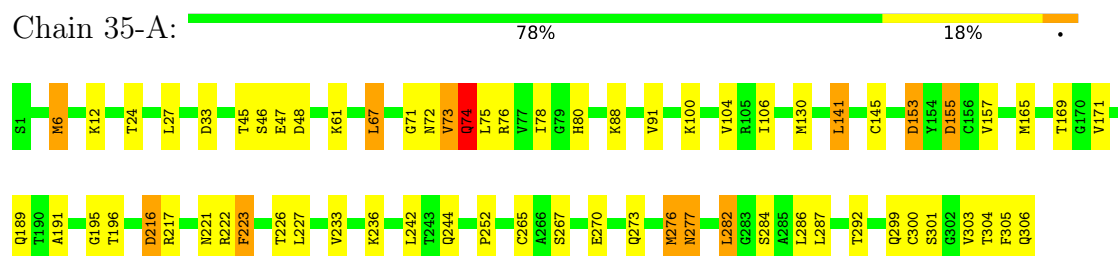
• Molecule 1: 3C-like proteinase



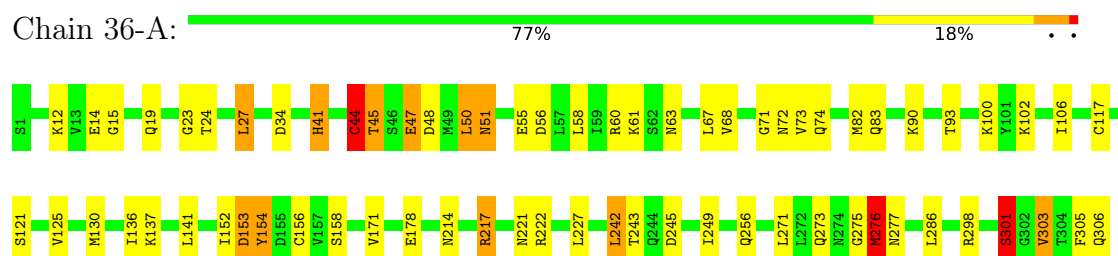
- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	114.30Å 54.29Å 44.97Å 90.00° 102.12° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	43.97 – 1.96	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.8 (43.97-1.96)	Depositor
R_{merge}	0.20	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.55 (at 1.97Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, R_{free}	0.171 , 0.235	Depositor
Wilson B-factor (Å ²)	29.5	Xtriage
Anisotropy	0.246	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	170649	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	43.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 9.77% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	1-A	0.76	2/2420 (0.1%)	0.87	3/3289 (0.1%)
1	2-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	3-A	0.78	4/2420 (0.2%)	0.88	4/3289 (0.1%)
1	4-A	0.79	4/2420 (0.2%)	0.88	0/3289
1	5-A	0.75	2/2420 (0.1%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	6-A	0.79	3/2420 (0.1%)	0.88	4/3289 (0.1%)
1	7-A	0.79	2/2420 (0.1%)	0.86	0/3289
1	8-A	0.81	5/2420 (0.2%)	0.88	0/3289
1	9-A	0.82	2/2420 (0.1%)	0.92	5/3289 (0.2%)
1	10-A	0.81	2/2420 (0.1%)	0.89	5/3289 (0.2%)
1	11-A	0.79	5/2420 (0.2%)	0.92	1/3289 (0.0%)
1	12-A	0.77	4/2420 (0.2%)	0.88	3/3289 (0.1%)
1	13-A	0.79	3/2420 (0.1%)	0.87	1/3289 (0.0%)
1	14-A	0.78	5/2420 (0.2%)	0.87	2/3289 (0.1%)
1	15-A	0.79	2/2420 (0.1%)	0.87	3/3289 (0.1%)
1	16-A	0.78	2/2420 (0.1%)	0.89	3/3289 (0.1%)
1	17-A	0.75	2/2420 (0.1%)	0.90	3/3289 (0.1%)
1	18-A	0.87	6/2420 (0.2%)	0.89	7/3289 (0.2%)
1	19-A	0.82	4/2420 (0.2%)	0.87	2/3289 (0.1%)
1	20-A	0.77	2/2420 (0.1%)	0.93	10/3289 (0.3%)
1	21-A	0.83	4/2420 (0.2%)	0.88	1/3289 (0.0%)
1	22-A	0.83	4/2420 (0.2%)	0.88	1/3289 (0.0%)
1	23-A	0.75	3/2420 (0.1%)	0.87	0/3289
1	24-A	0.80	4/2420 (0.2%)	0.91	4/3289 (0.1%)
1	25-A	0.76	4/2420 (0.2%)	0.90	6/3289 (0.2%)
1	26-A	0.80	4/2420 (0.2%)	0.89	5/3289 (0.2%)
1	27-A	0.80	3/2420 (0.1%)	0.88	4/3289 (0.1%)
1	28-A	0.77	5/2420 (0.2%)	0.88	3/3289 (0.1%)
1	29-A	0.77	3/2420 (0.1%)	0.88	1/3289 (0.0%)
1	30-A	0.72	1/2420 (0.0%)	0.85	1/3289 (0.0%)
1	31-A	0.77	3/2420 (0.1%)	0.88	2/3289 (0.1%)
1	32-A	0.80	4/2420 (0.2%)	0.87	3/3289 (0.1%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	33-A	0.75	3/2420 (0.1%)	0.87	3/3289 (0.1%)
1	34-A	0.75	1/2420 (0.0%)	0.86	3/3289 (0.1%)
1	35-A	0.79	3/2420 (0.1%)	0.88	5/3289 (0.2%)
1	36-A	0.76	3/2420 (0.1%)	0.89	4/3289 (0.1%)
All	All	0.78	117/87120 (0.1%)	0.88	104/118404 (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	5
1	2-A	0	6
1	3-A	0	5
1	4-A	0	7
1	5-A	0	9
1	6-A	0	9
1	7-A	0	8
1	8-A	0	6
1	9-A	0	13
1	10-A	0	10
1	11-A	0	18
1	12-A	0	12
1	13-A	0	11
1	14-A	0	10
1	15-A	0	7
1	16-A	0	7
1	17-A	0	15
1	18-A	0	13
1	19-A	0	12
1	20-A	0	12
1	21-A	0	15
1	22-A	0	8
1	23-A	0	6
1	24-A	0	16
1	25-A	0	10
1	26-A	0	9
1	27-A	0	10
1	28-A	0	17
1	29-A	0	12
1	30-A	0	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	31-A	0	14
1	32-A	0	9
1	33-A	0	3
1	34-A	0	11
1	35-A	0	6
1	36-A	0	8
All	All	0	360

All (117) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	21-A	128	CYS	CB-SG	-16.74	1.53	1.82
1	10-A	145	CYS	CB-SG	13.64	2.05	1.82
1	18-A	145	CYS	CB-SG	-13.28	1.59	1.82
1	9-A	145	CYS	CB-SG	12.55	2.03	1.82
1	8-A	145	CYS	CB-SG	11.95	2.02	1.82
1	18-A	300	CYS	CB-SG	11.91	2.02	1.82
1	4-A	145	CYS	CB-SG	11.74	2.02	1.82
1	8-A	300	CYS	CB-SG	11.65	2.02	1.82
1	1-A	300	CYS	CB-SG	11.30	2.01	1.82
1	6-A	300	CYS	CB-SG	10.30	1.99	1.82
1	19-A	145	CYS	CB-SG	10.27	1.99	1.82
1	15-A	106	ILE	C-N	-9.85	1.11	1.34
1	10-A	106	ILE	C-N	-8.96	1.13	1.34
1	31-A	145	CYS	CB-SG	8.79	1.97	1.82
1	22-A	22	CYS	CB-SG	8.74	1.97	1.82
1	35-A	145	CYS	CB-SG	8.61	1.96	1.82
1	32-A	145	CYS	CB-SG	-8.36	1.68	1.82
1	3-A	218	TRP	CB-CG	8.29	1.65	1.50
1	13-A	145	CYS	CB-SG	8.06	1.96	1.82
1	29-A	300	CYS	CB-SG	-7.99	1.68	1.82
1	22-A	106	ILE	C-N	-7.90	1.15	1.34
1	29-A	145	CYS	CB-SG	7.85	1.95	1.82
1	33-A	265	CYS	CB-SG	-7.84	1.69	1.82
1	2-A	218	TRP	CB-CG	7.58	1.64	1.50
1	14-A	145	CYS	CB-SG	7.53	1.95	1.82
1	22-A	156	CYS	CB-SG	-7.43	1.69	1.82
1	4-A	106	ILE	C-N	-7.33	1.17	1.34
1	7-A	300	CYS	CB-SG	7.32	1.94	1.82
1	3-A	145	CYS	CB-SG	7.31	1.94	1.82
1	20-A	128	CYS	CB-SG	-7.26	1.70	1.82
1	19-A	218	TRP	CB-CG	7.23	1.63	1.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	14-A	303	VAL	CB-CG2	-7.09	1.38	1.52
1	16-A	55	GLU	CB-CG	7.03	1.65	1.52
1	11-A	44	CYS	CB-SG	-6.92	1.70	1.82
1	22-A	44	CYS	CB-SG	-6.88	1.70	1.82
1	3-A	156	CYS	CB-SG	6.87	1.94	1.82
1	25-A	22	CYS	CB-SG	6.86	1.94	1.82
1	23-A	218	TRP	CB-CG	6.85	1.62	1.50
1	14-A	218	TRP	CB-CG	6.74	1.62	1.50
1	26-A	300	CYS	CB-SG	-6.68	1.70	1.82
1	13-A	218	TRP	CB-CG	6.65	1.62	1.50
1	27-A	270	GLU	CG-CD	6.60	1.61	1.51
1	11-A	265	CYS	CB-SG	-6.53	1.71	1.82
1	25-A	130	MET	CG-SD	-6.50	1.64	1.81
1	31-A	117	CYS	CB-SG	-6.45	1.71	1.82
1	35-A	130	MET	CG-SD	-6.44	1.64	1.81
1	32-A	117	CYS	CB-SG	-6.44	1.71	1.82
1	17-A	152	ILE	CB-CG2	-6.41	1.32	1.52
1	2-A	156	CYS	CB-SG	-6.39	1.71	1.82
1	18-A	47	GLU	CG-CD	6.38	1.61	1.51
1	27-A	270	GLU	CB-CG	6.31	1.64	1.52
1	6-A	156	CYS	CB-SG	-6.30	1.71	1.82
1	8-A	265	CYS	CB-SG	-6.30	1.71	1.82
1	20-A	117	CYS	CB-SG	-6.30	1.71	1.82
1	25-A	145	CYS	CB-SG	6.20	1.92	1.82
1	9-A	265	CYS	CB-SG	-6.15	1.71	1.82
1	3-A	117	CYS	CB-SG	-6.14	1.71	1.82
1	36-A	106	ILE	C-N	6.14	1.48	1.34
1	7-A	117	CYS	CB-SG	-6.05	1.72	1.82
1	34-A	156	CYS	CB-SG	-6.03	1.72	1.82
1	21-A	22	CYS	CB-SG	5.96	1.92	1.82
1	26-A	156	CYS	CB-SG	5.88	1.92	1.82
1	12-A	300	CYS	CB-SG	5.87	1.92	1.82
1	18-A	294	PHE	CB-CG	5.87	1.61	1.51
1	21-A	156	CYS	CB-SG	-5.87	1.72	1.81
1	11-A	130	MET	CG-SD	-5.86	1.66	1.81
1	19-A	300	CYS	CB-SG	5.86	1.92	1.82
1	35-A	265	CYS	CB-SG	-5.85	1.72	1.81
1	24-A	218	TRP	CB-CG	5.83	1.60	1.50
1	16-A	265	CYS	CB-SG	-5.76	1.72	1.81
1	4-A	47	GLU	CB-CG	5.72	1.63	1.52
1	26-A	166	GLU	CG-CD	5.71	1.60	1.51
1	27-A	153	ASP	CA-CB	5.68	1.66	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	8-A	156	CYS	CB-SG	5.66	1.91	1.82
1	24-A	130	MET	CG-SD	-5.66	1.66	1.81
1	25-A	117	CYS	CB-SG	-5.64	1.72	1.81
1	5-A	117	CYS	CB-SG	-5.58	1.72	1.81
1	14-A	117	CYS	CB-SG	-5.56	1.72	1.81
1	28-A	166	GLU	CG-CD	5.55	1.60	1.51
1	36-A	117	CYS	CB-SG	-5.51	1.72	1.81
1	12-A	117	CYS	CB-SG	-5.47	1.73	1.81
1	5-A	6	MET	CG-SD	5.47	1.95	1.81
1	17-A	128	CYS	CB-SG	-5.45	1.73	1.81
1	28-A	153	ASP	CA-CB	5.45	1.66	1.53
1	36-A	44	CYS	CB-SG	-5.44	1.73	1.81
1	11-A	178	GLU	CG-CD	5.44	1.60	1.51
1	11-A	178	GLU	CB-CG	5.41	1.62	1.52
1	24-A	145	CYS	CB-SG	5.39	1.91	1.82
1	32-A	217	ARG	CG-CD	5.37	1.65	1.51
1	8-A	117	CYS	CB-SG	-5.36	1.73	1.81
1	2-A	265	CYS	CB-SG	-5.36	1.73	1.81
1	30-A	47	GLU	CB-CG	5.34	1.62	1.52
1	24-A	156	CYS	CB-SG	-5.30	1.73	1.81
1	15-A	265	CYS	CB-SG	-5.29	1.73	1.81
1	4-A	166	GLU	CG-CD	5.28	1.59	1.51
1	21-A	44	CYS	CB-SG	-5.27	1.73	1.81
1	1-A	117	CYS	CB-SG	-5.27	1.73	1.81
1	28-A	55	GLU	CB-CG	5.27	1.62	1.52
1	31-A	300	CYS	CB-SG	5.26	1.91	1.82
1	32-A	55	GLU	CB-CG	5.23	1.62	1.52
1	2-A	106	ILE	C-N	5.22	1.46	1.34
1	13-A	16	CYS	CB-SG	-5.22	1.73	1.81
1	18-A	44	CYS	CB-SG	-5.22	1.73	1.81
1	33-A	166	GLU	CG-CD	5.20	1.59	1.51
1	28-A	142	ASN	CB-CG	5.15	1.62	1.51
1	23-A	47	GLU	CG-CD	5.13	1.59	1.51
1	12-A	303	VAL	CB-CG2	5.13	1.63	1.52
1	18-A	244	GLN	CG-CD	5.11	1.62	1.51
1	6-A	218	TRP	CB-CG	5.09	1.59	1.50
1	23-A	300	CYS	CB-SG	-5.09	1.73	1.81
1	29-A	117	CYS	CB-SG	-5.08	1.73	1.81
1	26-A	60	ARG	CG-CD	5.08	1.64	1.51
1	14-A	55	GLU	CB-CG	5.07	1.61	1.52
1	12-A	156	CYS	CB-SG	-5.07	1.73	1.81
1	28-A	44	CYS	CB-SG	-5.06	1.73	1.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	33-A	47	GLU	CB-CG	5.04	1.61	1.52
1	19-A	156	CYS	CB-SG	5.03	1.90	1.82

All (104) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	20-A	128	CYS	CA-CB-SG	-13.80	89.17	114.00
1	10-A	218	TRP	CA-CB-CG	8.09	129.07	113.70
1	27-A	300	CYS	CA-CB-SG	-7.84	99.89	114.00
1	1-A	22	CYS	CA-CB-SG	-7.60	100.33	114.00
1	20-A	44	CYS	CA-CB-SG	-7.46	100.58	114.00
1	35-A	67	LEU	CA-CB-CG	7.45	132.43	115.30
1	9-A	49	MET	CA-CB-CG	7.22	125.57	113.30
1	31-A	242	LEU	CA-CB-CG	7.22	131.90	115.30
1	10-A	145	CYS	CA-CB-SG	7.14	126.86	114.00
1	27-A	286	LEU	CA-CB-CG	7.12	131.68	115.30
1	2-A	216	ASP	CB-CG-OD2	-7.06	111.95	118.30
1	20-A	27	LEU	CA-CB-CG	7.01	131.41	115.30
1	35-A	75	LEU	CA-CB-CG	-6.80	99.66	115.30
1	28-A	154	TYR	CA-CB-CG	6.75	126.22	113.40
1	25-A	82	MET	CA-CB-CG	6.63	124.58	113.30
1	25-A	130	MET	CB-CG-SD	-6.63	92.51	112.40
1	32-A	50	LEU	CA-CB-CG	6.58	130.43	115.30
1	20-A	154	TYR	CA-CB-CG	6.55	125.84	113.40
1	9-A	300	CYS	CA-CB-SG	-6.51	102.28	114.00
1	20-A	155	ASP	CB-CG-OD1	-6.38	112.55	118.30
1	35-A	6	MET	CG-SD-CE	-6.24	90.22	100.20
1	9-A	130	MET	CG-SD-CE	-6.22	90.24	100.20
1	14-A	47	GLU	CA-CB-CG	6.15	126.92	113.40
1	18-A	275	GLY	N-CA-C	6.14	128.46	113.10
1	29-A	145	CYS	CA-CB-SG	6.14	125.06	114.00
1	9-A	145	CYS	CA-CB-SG	6.11	125.00	114.00
1	20-A	154	TYR	CB-CG-CD1	6.10	124.66	121.00
1	12-A	67	LEU	CA-CB-CG	6.10	129.32	115.30
1	25-A	271	LEU	CA-CB-CG	6.06	129.24	115.30
1	16-A	271	LEU	CA-CB-CG	6.01	129.12	115.30
1	21-A	128	CYS	CA-CB-SG	-5.99	103.22	114.00
1	22-A	167	LEU	CA-CB-CG	5.98	129.06	115.30
1	14-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.98	129.05	115.30
1	28-A	286	LEU	CA-CB-CG	5.97	129.04	115.30
1	35-A	130	MET	CA-CB-CG	-5.96	103.17	113.30
1	24-A	271	LEU	CA-CB-CG	5.89	128.84	115.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	3-A	106	ILE	C-N-CA	5.84	136.30	121.70
1	11-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.83	128.71	115.30
1	20-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.81	123.53	118.30
1	35-A	141	LEU	CB-CG-CD2	-5.79	101.15	111.00
1	28-A	165	MET	CG-SD-CE	5.79	109.47	100.20
1	18-A	130	MET	CG-SD-CE	-5.79	90.94	100.20
1	18-A	303	VAL	CA-CB-CG1	5.76	119.54	110.90
1	10-A	67	LEU	CA-CB-CG	5.75	128.51	115.30
1	24-A	130	MET	CA-CB-CG	-5.72	103.57	113.30
1	18-A	49	MET	CA-CB-CG	5.67	122.94	113.30
1	17-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.64	128.28	115.30
1	36-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.63	128.25	115.30
1	16-A	300	CYS	CA-CB-SG	-5.59	103.94	114.00
1	30-A	167	LEU	CA-CB-CG	5.59	128.15	115.30
1	32-A	271	LEU	CA-CB-CG	5.57	128.12	115.30
1	9-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.57	128.10	115.30
1	34-A	67	LEU	CA-CB-CG	5.57	128.10	115.30
1	12-A	75	LEU	CA-CB-CG	5.55	128.07	115.30
1	17-A	298	ARG	CG-CD-NE	-5.55	100.15	111.80
1	26-A	276	MET	CA-CB-CG	5.52	122.68	113.30
1	10-A	299	GLN	C-N-CA	5.47	135.38	121.70
1	1-A	302	GLY	N-CA-C	5.46	126.75	113.10
1	25-A	145	CYS	CA-CB-SG	5.44	123.80	114.00
1	26-A	154	TYR	CA-CB-CG	5.44	123.74	113.40
1	12-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.42	127.77	115.30
1	3-A	165	MET	CG-SD-CE	-5.37	91.61	100.20
1	33-A	271	LEU	CA-CB-CG	5.37	127.64	115.30
1	26-A	67	LEU	CA-CB-CG	-5.37	102.96	115.30
1	17-A	165	MET	CB-CG-SD	-5.35	96.35	112.40
1	19-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.34	123.11	118.30
1	20-A	300	CYS	CA-CB-SG	-5.33	104.40	114.00
1	18-A	294	PHE	CB-CG-CD1	5.33	124.53	120.80
1	25-A	286	LEU	CA-CB-CG	5.32	127.53	115.30
1	5-A	48	ASP	CB-CG-OD1	-5.31	113.53	118.30
1	26-A	154	TYR	CB-CG-CD2	5.30	124.18	121.00
1	18-A	218	TRP	CA-CB-CG	-5.29	103.64	113.70
1	34-A	165	MET	CB-CG-SD	-5.24	96.67	112.40
1	20-A	106	ILE	C-N-CA	5.23	134.78	121.70
1	36-A	27	LEU	CB-CG-CD2	5.22	119.88	111.00
1	26-A	286	LEU	CA-CB-CG	5.22	127.31	115.30
1	13-A	271	LEU	CA-CB-CG	5.22	127.31	115.30
1	6-A	300	CYS	CA-CB-SG	5.20	123.36	114.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	6-A	89	LEU	CA-CB-CG	5.19	127.24	115.30
1	19-A	49	MET	CB-CG-SD	-5.19	96.82	112.40
1	24-A	22	CYS	CA-CB-SG	-5.19	104.66	114.00
1	15-A	188	ARG	NE-CZ-NH1	5.18	122.89	120.30
1	6-A	235	MET	CB-CG-SD	-5.17	96.87	112.40
1	10-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.16	127.17	115.30
1	25-A	268	LEU	CA-CB-CG	5.16	127.16	115.30
1	6-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.14	127.13	115.30
1	31-A	152	ILE	C-N-CA	5.14	134.54	121.70
1	3-A	302	GLY	N-CA-C	-5.13	100.27	113.10
1	1-A	153	ASP	CB-CG-OD2	-5.12	113.69	118.30
1	32-A	171	VAL	CG1-CB-CG2	5.12	119.09	110.90
1	20-A	27	LEU	CB-CG-CD2	5.11	119.69	111.00
1	36-A	41	HIS	O-C-N	-5.11	114.53	122.70
1	24-A	227	LEU	CA-CB-CG	5.10	127.03	115.30
1	3-A	289	ASP	CB-CG-OD1	5.07	122.87	118.30
1	27-A	167	LEU	CA-CB-CG	5.07	126.97	115.30
1	36-A	303	VAL	CG1-CB-CG2	-5.07	102.79	110.90
1	15-A	165	MET	CG-SD-CE	5.06	108.30	100.20
1	33-A	286	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.92	115.30
1	15-A	188	ARG	CG-CD-NE	5.05	122.40	111.80
1	27-A	242	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.91	115.30
1	18-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.05	122.84	118.30
1	33-A	187	ASP	CB-CG-OD1	5.02	122.82	118.30
1	34-A	102	LYS	CD-CE-NZ	5.01	123.23	111.70
1	16-A	275	GLY	N-CA-C	5.01	125.63	113.10

There are no chirality outliers.

All (360) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	154	TYR	Peptide
1	1-A	279	ARG	Sidechain,Peptide
1	1-A	64	HIS	Peptide
1	1-A	74	GLN	Peptide
1	10-A	153	ASP	Peptide
1	10-A	155	ASP	Peptide
1	10-A	195	GLY	Peptide
1	10-A	220	LEU	Peptide
1	10-A	276	MET	Peptide
1	10-A	300	CYS	Peptide
1	10-A	301	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	10-A	44	CYS	Peptide
1	10-A	45	THR	Peptide
1	10-A	48	ASP	Peptide
1	11-A	153	ASP	Peptide
1	11-A	154	TYR	Peptide
1	11-A	192	GLN	Peptide
1	11-A	194	ALA	Peptide
1	11-A	195	GLY	Peptide
1	11-A	219	PHE	Peptide
1	11-A	221	ASN	Peptide
1	11-A	271	LEU	Peptide
1	11-A	275	GLY	Peptide
1	11-A	276	MET	Peptide
1	11-A	299	GLN	Peptide
1	11-A	300	CYS	Peptide
1	11-A	304	THR	Peptide
1	11-A	44	CYS	Peptide
1	11-A	46	SER	Peptide
1	11-A	48	ASP	Peptide
1	11-A	68	VAL	Peptide
1	11-A	74	GLN	Peptide
1	12-A	153	ASP	Peptide
1	12-A	220	LEU	Peptide
1	12-A	221	ASN	Peptide
1	12-A	278	GLY	Peptide
1	12-A	298	ARG	Sidechain
1	12-A	299	GLN	Peptide
1	12-A	300	CYS	Peptide
1	12-A	44	CYS	Peptide
1	12-A	45	THR	Peptide
1	12-A	46	SER	Peptide
1	12-A	71	GLY	Peptide
1	12-A	74	GLN	Peptide
1	13-A	100	LYS	Peptide
1	13-A	150	PHE	Peptide
1	13-A	155	ASP	Peptide
1	13-A	217	ARG	Sidechain
1	13-A	221	ASN	Peptide
1	13-A	23	GLY	Peptide
1	13-A	235	MET	Peptide
1	13-A	24	THR	Peptide
1	13-A	273	GLN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	13-A	44	CYS	Peptide
1	13-A	46	SER	Peptide
1	14-A	150	PHE	Peptide
1	14-A	154	TYR	Peptide
1	14-A	275	GLY	Peptide
1	14-A	279	ARG	Sidechain
1	14-A	300	CYS	Peptide
1	14-A	302	GLY	Peptide
1	14-A	305	PHE	Peptide
1	14-A	44	CYS	Peptide
1	14-A	45	THR	Peptide
1	14-A	47	GLU	Peptide
1	15-A	100	LYS	Peptide
1	15-A	151	ASN	Peptide
1	15-A	300	CYS	Peptide
1	15-A	44	CYS	Peptide
1	15-A	45	THR	Peptide
1	15-A	47	GLU	Peptide
1	15-A	48	ASP	Peptide
1	16-A	151	ASN	Peptide
1	16-A	155	ASP	Peptide
1	16-A	217	ARG	Sidechain
1	16-A	298	ARG	Peptide
1	16-A	299	GLN	Peptide
1	16-A	44	CYS	Peptide
1	16-A	72	ASN	Peptide
1	17-A	152	ILE	Peptide
1	17-A	155	ASP	Peptide
1	17-A	156	CYS	Peptide
1	17-A	169	THR	Peptide
1	17-A	217	ARG	Sidechain
1	17-A	23	GLY	Peptide
1	17-A	276	MET	Peptide
1	17-A	277	ASN	Peptide
1	17-A	279	ARG	Sidechain
1	17-A	298	ARG	Sidechain
1	17-A	301	SER	Peptide
1	17-A	304	THR	Peptide
1	17-A	46	SER	Peptide
1	17-A	60	ARG	Peptide
1	17-A	73	VAL	Peptide
1	18-A	151	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	18-A	155	ASP	Peptide
1	18-A	156	CYS	Peptide
1	18-A	19	GLN	Peptide
1	18-A	190	THR	Peptide
1	18-A	191	ALA	Peptide
1	18-A	217	ARG	Sidechain
1	18-A	274	ASN	Peptide
1	18-A	305	PHE	Peptide
1	18-A	44	CYS	Peptide
1	18-A	47	GLU	Peptide
1	18-A	59	ILE	Peptide
1	18-A	73	VAL	Peptide
1	19-A	141	LEU	Peptide
1	19-A	150	PHE	Peptide
1	19-A	151	ASN	Peptide
1	19-A	229	ASP	Peptide
1	19-A	274	ASN	Peptide
1	19-A	279	ARG	Sidechain
1	19-A	303	VAL	Peptide
1	19-A	44	CYS	Peptide
1	19-A	45	THR	Peptide
1	19-A	48	ASP	Peptide
1	19-A	50	LEU	Peptide
1	19-A	92	ASP	Peptide
1	2-A	152	ILE	Peptide
1	2-A	236	LYS	Peptide
1	2-A	300	CYS	Peptide
1	2-A	303	VAL	Peptide
1	2-A	44	CYS	Peptide
1	2-A	64	HIS	Peptide
1	20-A	150	PHE	Peptide
1	20-A	151	ASN	Peptide
1	20-A	153	ASP	Peptide
1	20-A	155	ASP	Peptide
1	20-A	190	THR	Peptide
1	20-A	218	TRP	Peptide
1	20-A	278	GLY	Peptide
1	20-A	279	ARG	Sidechain,Peptide
1	20-A	298	ARG	Sidechain
1	20-A	301	SER	Peptide
1	20-A	47	GLU	Peptide
1	21-A	100	LYS	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	21-A	153	ASP	Peptide
1	21-A	154	TYR	Peptide
1	21-A	217	ARG	Sidechain
1	21-A	25	THR	Peptide
1	21-A	256	GLN	Peptide
1	21-A	275	GLY	Peptide
1	21-A	278	GLY	Peptide
1	21-A	279	ARG	Sidechain
1	21-A	280	THR	Peptide
1	21-A	298	ARG	Sidechain
1	21-A	302	GLY	Peptide
1	21-A	44	CYS	Peptide
1	21-A	47	GLU	Peptide
1	21-A	68	VAL	Peptide
1	22-A	229	ASP	Peptide
1	22-A	24	THR	Peptide
1	22-A	275	GLY	Peptide
1	22-A	305	PHE	Peptide
1	22-A	44	CYS	Peptide
1	22-A	45	THR	Peptide
1	22-A	48	ASP	Peptide
1	22-A	50	LEU	Peptide
1	23-A	150	PHE	Peptide
1	23-A	221	ASN	Peptide
1	23-A	227	LEU	Peptide
1	23-A	305	PHE	Peptide
1	23-A	46	SER	Peptide
1	23-A	71	GLY	Peptide
1	24-A	105	ARG	Sidechain
1	24-A	154	TYR	Peptide
1	24-A	189	GLN	Peptide
1	24-A	220	LEU	Peptide
1	24-A	221	ASN	Peptide
1	24-A	227	LEU	Peptide
1	24-A	279	ARG	Peptide
1	24-A	299	GLN	Peptide
1	24-A	304	THR	Peptide
1	24-A	305	PHE	Peptide
1	24-A	44	CYS	Peptide
1	24-A	46	SER	Peptide
1	24-A	49	MET	Peptide
1	24-A	70	ALA	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	24-A	71	GLY	Peptide
1	24-A	75	LEU	Peptide
1	25-A	156	CYS	Peptide
1	25-A	22	CYS	Peptide
1	25-A	279	ARG	Sidechain
1	25-A	305	PHE	Peptide
1	25-A	44	CYS	Peptide
1	25-A	45	THR	Peptide
1	25-A	48	ASP	Peptide
1	25-A	49	MET	Peptide
1	25-A	66	PHE	Peptide
1	25-A	70	ALA	Peptide
1	26-A	141	LEU	Peptide
1	26-A	156	CYS	Peptide
1	26-A	188	ARG	Sidechain
1	26-A	229	ASP	Peptide
1	26-A	273	GLN	Peptide
1	26-A	304	THR	Peptide
1	26-A	305	PHE	Peptide
1	26-A	44	CYS	Peptide
1	26-A	46	SER	Peptide
1	27-A	153	ASP	Peptide
1	27-A	195	GLY	Peptide
1	27-A	221	ASN	Peptide
1	27-A	222	ARG	Sidechain
1	27-A	223	PHE	Peptide
1	27-A	227	LEU	Peptide
1	27-A	229	ASP	Peptide
1	27-A	273	GLN	Peptide
1	27-A	278	GLY	Peptide
1	27-A	46	SER	Peptide
1	28-A	141	LEU	Peptide
1	28-A	152	ILE	Peptide
1	28-A	153	ASP	Peptide
1	28-A	154	TYR	Peptide
1	28-A	181	PHE	Peptide
1	28-A	193	ALA	Peptide
1	28-A	195	GLY	Peptide
1	28-A	220	LEU	Peptide
1	28-A	222	ARG	Peptide
1	28-A	227	LEU	Peptide
1	28-A	23	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	28-A	44	CYS	Peptide
1	28-A	46	SER	Peptide
1	28-A	47	GLU	Peptide
1	28-A	50	LEU	Peptide
1	28-A	75	LEU	Peptide
1	28-A	99	PRO	Peptide
1	29-A	105	ARG	Sidechain,Peptide
1	29-A	152	ILE	Peptide
1	29-A	193	ALA	Peptide
1	29-A	220	LEU	Peptide
1	29-A	221	ASN	Peptide
1	29-A	274	ASN	Peptide
1	29-A	300	CYS	Peptide
1	29-A	304	THR	Peptide
1	29-A	44	CYS	Peptide
1	29-A	47	GLU	Peptide
1	29-A	48	ASP	Peptide
1	3-A	110	GLN	Peptide
1	3-A	278	GLY	Peptide
1	3-A	301	SER	Peptide
1	3-A	303	VAL	Peptide
1	3-A	99	PRO	Peptide
1	30-A	152	ILE	Peptide
1	30-A	153	ASP	Peptide
1	30-A	227	LEU	Peptide
1	30-A	276	MET	Peptide
1	30-A	300	CYS	Peptide
1	30-A	303	VAL	Peptide
1	30-A	44	CYS	Peptide
1	30-A	45	THR	Peptide
1	30-A	47	GLU	Peptide
1	30-A	68	VAL	Peptide
1	30-A	72	ASN	Peptide
1	31-A	142	ASN	Peptide
1	31-A	193	ALA	Peptide
1	31-A	227	LEU	Peptide
1	31-A	279	ARG	Peptide
1	31-A	302	GLY	Peptide
1	31-A	44	CYS	Peptide
1	31-A	46	SER	Peptide
1	31-A	47	GLU	Peptide
1	31-A	48	ASP	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	31-A	51	ASN	Peptide
1	31-A	60	ARG	Sidechain
1	31-A	70	ALA	Peptide
1	31-A	72	ASN	Peptide
1	31-A	75	LEU	Peptide
1	32-A	152	ILE	Peptide
1	32-A	217	ARG	Sidechain
1	32-A	275	GLY	Peptide
1	32-A	277	ASN	Peptide
1	32-A	47	GLU	Peptide
1	32-A	48	ASP	Peptide
1	32-A	51	ASN	Peptide
1	32-A	62	SER	Peptide
1	32-A	72	ASN	Peptide
1	33-A	305	PHE	Peptide
1	33-A	47	GLU	Peptide
1	33-A	49	MET	Peptide
1	34-A	217	ARG	Sidechain,Peptide
1	34-A	220	LEU	Peptide
1	34-A	221	ASN	Peptide
1	34-A	23	GLY	Peptide
1	34-A	275	GLY	Peptide
1	34-A	298	ARG	Sidechain
1	34-A	48	ASP	Peptide
1	34-A	71	GLY	Peptide
1	34-A	73	VAL	Peptide
1	34-A	74	GLN	Peptide
1	35-A	155	ASP	Peptide
1	35-A	195	GLY	Peptide
1	35-A	216	ASP	Peptide
1	35-A	299	GLN	Peptide
1	35-A	47	GLU	Peptide
1	35-A	74	GLN	Peptide
1	36-A	152	ILE	Peptide
1	36-A	153	ASP	Peptide
1	36-A	217	ARG	Sidechain
1	36-A	276	MET	Peptide
1	36-A	301	SER	Peptide
1	36-A	44	CYS	Peptide
1	36-A	50	LEU	Peptide
1	36-A	74	GLN	Peptide
1	4-A	189	GLN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	4-A	24	THR	Peptide
1	4-A	273	GLN	Peptide
1	4-A	298	ARG	Sidechain
1	4-A	300	CYS	Peptide
1	4-A	303	VAL	Peptide
1	4-A	48	ASP	Peptide
1	5-A	276	MET	Peptide
1	5-A	300	CYS	Peptide
1	5-A	301	SER	Peptide
1	5-A	303	VAL	Peptide
1	5-A	304	THR	Peptide
1	5-A	44	CYS	Peptide
1	5-A	45	THR	Peptide
1	5-A	47	GLU	Peptide
1	5-A	73	VAL	Peptide
1	6-A	154	TYR	Peptide
1	6-A	178	GLU	Peptide
1	6-A	275	GLY	Peptide
1	6-A	277	ASN	Peptide
1	6-A	279	ARG	Peptide
1	6-A	298	ARG	Sidechain
1	6-A	302	GLY	Peptide
1	6-A	44	CYS	Peptide
1	6-A	45	THR	Peptide
1	7-A	154	TYR	Peptide
1	7-A	188	ARG	Sidechain
1	7-A	276	MET	Peptide
1	7-A	300	CYS	Peptide
1	7-A	44	CYS	Peptide
1	7-A	73	VAL	Peptide
1	7-A	75	LEU	Peptide
1	7-A	76	ARG	Peptide
1	8-A	152	ILE	Peptide
1	8-A	222	ARG	Sidechain
1	8-A	298	ARG	Peptide
1	8-A	299	GLN	Peptide
1	8-A	300	CYS	Peptide
1	8-A	303	VAL	Peptide
1	9-A	152	ILE	Peptide
1	9-A	220	LEU	Peptide
1	9-A	221	ASN	Peptide
1	9-A	24	THR	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	9-A	298	ARG	Peptide
1	9-A	299	GLN	Peptide
1	9-A	300	CYS	Peptide
1	9-A	301	SER	Peptide
1	9-A	304	THR	Peptide
1	9-A	44	CYS	Peptide
1	9-A	45	THR	Peptide
1	9-A	46	SER	Peptide
1	9-A	60	ARG	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	2312	0	0
1	3-A	2367	2313	2313	0	0
1	4-A	2367	2313	2312	0	0
1	5-A	2367	2313	2313	0	0
1	6-A	2367	2313	2313	0	0
1	7-A	2367	2313	2311	0	0
1	8-A	2367	2313	2313	0	0
1	9-A	2367	2313	2313	0	0
1	10-A	2367	2313	2312	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	2312	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	2310	0	0
1	21-A	2367	2313	2313	0	0
1	22-A	2367	2313	2312	0	0
1	23-A	2367	2313	2313	0	0
1	24-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	25-A	2367	2313	2313	0	0
1	26-A	2367	2313	2313	0	0
1	27-A	2367	2313	2313	0	0
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	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	1-A	45	0	0	0	0
4	2-A	45	0	0	0	0
4	3-A	46	0	0	0	0
4	4-A	37	0	0	0	0
4	5-A	42	0	0	0	0
4	6-A	43	0	0	0	0
4	7-A	35	0	0	0	0
4	8-A	33	0	0	0	0
4	9-A	39	0	0	0	0
4	10-A	37	0	0	0	0
4	11-A	41	0	0	0	0
4	12-A	42	0	0	0	0
4	13-A	45	0	0	0	0
4	14-A	43	0	0	0	0
4	15-A	38	0	0	0	0
4	16-A	30	0	0	0	0
4	17-A	34	0	0	0	0
4	18-A	46	0	0	0	0
4	19-A	41	0	0	0	0
4	20-A	38	0	0	0	0
4	21-A	42	0	0	0	0
4	22-A	44	0	0	0	0
4	23-A	40	0	0	0	0
4	24-A	33	0	0	0	0
4	25-A	36	0	0	0	0
4	26-A	41	0	0	0	0
4	27-A	38	0	0	0	0
4	28-A	39	0	0	0	0
4	29-A	38	0	0	0	0
4	30-A	37	0	0	0	0
4	31-A	34	0	0	0	0
4	32-A	34	0	0	0	0
4	33-A	39	0	0	0	0
4	34-A	48	0	0	0	0
4	35-A	37	0	0	0	0
4	36-A	33	0	0	0	0
All	All	86949	83700	83690	0	0

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

There are no clashes within the asymmetric unit.

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	1-A	304/306 (99%)	249 (82%)	35 (12%)	20 (7%)	1	0
1	2-A	304/306 (99%)	255 (84%)	33 (11%)	16 (5%)	2	0
1	3-A	304/306 (99%)	257 (84%)	23 (8%)	24 (8%)	1	0
1	4-A	304/306 (99%)	255 (84%)	32 (10%)	17 (6%)	2	0
1	5-A	304/306 (99%)	250 (82%)	43 (14%)	11 (4%)	3	0
1	6-A	304/306 (99%)	255 (84%)	28 (9%)	21 (7%)	1	0
1	7-A	304/306 (99%)	256 (84%)	37 (12%)	11 (4%)	3	0
1	8-A	304/306 (99%)	254 (84%)	32 (10%)	18 (6%)	1	0
1	9-A	304/306 (99%)	258 (85%)	24 (8%)	22 (7%)	1	0
1	10-A	304/306 (99%)	254 (84%)	32 (10%)	18 (6%)	1	0
1	11-A	304/306 (99%)	244 (80%)	36 (12%)	24 (8%)	1	0
1	12-A	304/306 (99%)	257 (84%)	31 (10%)	16 (5%)	2	0
1	13-A	304/306 (99%)	262 (86%)	31 (10%)	11 (4%)	3	0
1	14-A	304/306 (99%)	272 (90%)	20 (7%)	12 (4%)	3	0
1	15-A	304/306 (99%)	262 (86%)	28 (9%)	14 (5%)	2	0
1	16-A	304/306 (99%)	249 (82%)	42 (14%)	13 (4%)	2	0
1	17-A	304/306 (99%)	248 (82%)	35 (12%)	21 (7%)	1	0
1	18-A	304/306 (99%)	245 (81%)	39 (13%)	20 (7%)	1	0
1	19-A	304/306 (99%)	260 (86%)	28 (9%)	16 (5%)	2	0
1	20-A	304/306 (99%)	261 (86%)	28 (9%)	15 (5%)	2	0
1	21-A	304/306 (99%)	247 (81%)	43 (14%)	14 (5%)	2	0
1	22-A	304/306 (99%)	251 (83%)	33 (11%)	20 (7%)	1	0
1	23-A	304/306 (99%)	257 (84%)	31 (10%)	16 (5%)	2	0
1	24-A	304/306 (99%)	247 (81%)	41 (14%)	16 (5%)	2	0
1	25-A	304/306 (99%)	248 (82%)	33 (11%)	23 (8%)	1	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	26-A	304/306 (99%)	272 (90%)	20 (7%)	12 (4%)	3	0
1	27-A	304/306 (99%)	257 (84%)	27 (9%)	20 (7%)	1	0
1	28-A	304/306 (99%)	246 (81%)	40 (13%)	18 (6%)	1	0
1	29-A	304/306 (99%)	252 (83%)	34 (11%)	18 (6%)	1	0
1	30-A	304/306 (99%)	253 (83%)	37 (12%)	14 (5%)	2	0
1	31-A	304/306 (99%)	259 (85%)	25 (8%)	20 (7%)	1	0
1	32-A	304/306 (99%)	251 (83%)	32 (10%)	21 (7%)	1	0
1	33-A	304/306 (99%)	258 (85%)	26 (9%)	20 (7%)	1	0
1	34-A	304/306 (99%)	256 (84%)	27 (9%)	21 (7%)	1	0
1	35-A	304/306 (99%)	257 (84%)	32 (10%)	15 (5%)	2	0
1	36-A	304/306 (99%)	257 (84%)	28 (9%)	19 (6%)	1	0
All	All	10944/11016 (99%)	9171 (84%)	1146 (10%)	627 (6%)	1	0

All (627) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	22	CYS
1	1-A	47	GLU
1	1-A	51	ASN
1	1-A	72	ASN
1	1-A	73	VAL
1	1-A	273	GLN
1	1-A	274	ASN
1	1-A	277	ASN
1	1-A	301	SER
1	1-A	303	VAL
1	1-A	305	PHE
1	2-A	48	ASP
1	2-A	71	GLY
1	2-A	72	ASN
1	2-A	73	VAL
1	2-A	75	LEU
1	2-A	110	GLN
1	2-A	154	TYR
1	2-A	191	ALA
1	2-A	305	PHE
1	3-A	46	SER
1	3-A	48	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	49	MET
1	3-A	59	ILE
1	3-A	60	ARG
1	3-A	72	ASN
1	3-A	73	VAL
1	3-A	99	PRO
1	3-A	110	GLN
1	3-A	154	TYR
1	3-A	274	ASN
1	3-A	276	MET
1	3-A	301	SER
1	4-A	48	ASP
1	4-A	49	MET
1	4-A	50	LEU
1	4-A	72	ASN
1	4-A	110	GLN
1	4-A	155	ASP
1	4-A	222	ARG
1	4-A	274	ASN
1	4-A	277	ASN
1	4-A	304	THR
1	5-A	49	MET
1	5-A	100	LYS
1	5-A	155	ASP
1	5-A	274	ASN
1	5-A	303	VAL
1	5-A	304	THR
1	6-A	23	GLY
1	6-A	46	SER
1	6-A	47	GLU
1	6-A	49	MET
1	6-A	75	LEU
1	6-A	154	TYR
1	6-A	257	THR
1	6-A	279	ARG
1	6-A	299	GLN
1	6-A	301	SER
1	6-A	305	PHE
1	7-A	48	ASP
1	7-A	62	SER
1	7-A	70	ALA
1	7-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	45	THR
1	8-A	49	MET
1	8-A	61	LYS
1	8-A	71	GLY
1	8-A	223	PHE
1	8-A	273	GLN
1	8-A	299	GLN
1	8-A	301	SER
1	8-A	305	PHE
1	9-A	45	THR
1	9-A	46	SER
1	9-A	47	GLU
1	9-A	62	SER
1	9-A	71	GLY
1	9-A	72	ASN
1	9-A	153	ASP
1	9-A	223	PHE
1	9-A	273	GLN
1	9-A	277	ASN
1	9-A	278	GLY
1	9-A	298	ARG
1	9-A	301	SER
1	9-A	302	GLY
1	10-A	48	ASP
1	10-A	49	MET
1	10-A	70	ALA
1	10-A	155	ASP
1	10-A	156	CYS
1	10-A	221	ASN
1	10-A	298	ARG
1	10-A	300	CYS
1	11-A	49	MET
1	11-A	73	VAL
1	11-A	153	ASP
1	11-A	219	PHE
1	11-A	272	LEU
1	11-A	273	GLN
1	11-A	274	ASN
1	11-A	277	ASN
1	11-A	300	CYS
1	11-A	303	VAL
1	11-A	304	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	46	SER
1	12-A	47	GLU
1	12-A	48	ASP
1	12-A	70	ALA
1	12-A	72	ASN
1	12-A	73	VAL
1	12-A	155	ASP
1	12-A	277	ASN
1	12-A	299	GLN
1	12-A	300	CYS
1	12-A	301	SER
1	12-A	303	VAL
1	13-A	47	GLU
1	13-A	274	ASN
1	13-A	278	GLY
1	13-A	300	CYS
1	13-A	301	SER
1	13-A	303	VAL
1	14-A	47	GLU
1	14-A	72	ASN
1	14-A	302	GLY
1	14-A	303	VAL
1	15-A	46	SER
1	15-A	48	ASP
1	15-A	72	ASN
1	15-A	155	ASP
1	15-A	276	MET
1	15-A	301	SER
1	16-A	46	SER
1	16-A	48	ASP
1	16-A	71	GLY
1	16-A	152	ILE
1	16-A	153	ASP
1	16-A	154	TYR
1	16-A	191	ALA
1	17-A	47	GLU
1	17-A	48	ASP
1	17-A	49	MET
1	17-A	100	LYS
1	17-A	153	ASP
1	17-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	191	ALA
1	17-A	229	ASP
1	17-A	275	GLY
1	17-A	277	ASN
1	18-A	49	MET
1	18-A	74	GLN
1	18-A	150	PHE
1	18-A	151	ASN
1	18-A	156	CYS
1	18-A	191	ALA
1	18-A	301	SER
1	19-A	51	ASN
1	19-A	71	GLY
1	19-A	156	CYS
1	19-A	191	ALA
1	19-A	222	ARG
1	19-A	276	MET
1	19-A	277	ASN
1	20-A	48	ASP
1	20-A	72	ASN
1	20-A	192	GLN
1	20-A	218	TRP
1	20-A	221	ASN
1	20-A	229	ASP
1	20-A	276	MET
1	20-A	278	GLY
1	21-A	47	GLU
1	21-A	97	LYS
1	21-A	101	TYR
1	21-A	228	ASN
1	21-A	301	SER
1	21-A	305	PHE
1	22-A	47	GLU
1	22-A	51	ASN
1	22-A	218	TRP
1	22-A	273	GLN
1	22-A	274	ASN
1	22-A	277	ASN
1	22-A	279	ARG
1	22-A	304	THR
1	23-A	23	GLY
1	23-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	70	ALA
1	23-A	88	LYS
1	23-A	222	ARG
1	23-A	223	PHE
1	23-A	229	ASP
1	23-A	274	ASN
1	24-A	22	CYS
1	24-A	47	GLU
1	24-A	49	MET
1	24-A	70	ALA
1	24-A	72	ASN
1	24-A	153	ASP
1	24-A	154	TYR
1	24-A	190	THR
1	24-A	218	TRP
1	24-A	229	ASP
1	25-A	24	THR
1	25-A	75	LEU
1	25-A	95	ASN
1	25-A	153	ASP
1	25-A	154	TYR
1	25-A	274	ASN
1	26-A	47	GLU
1	26-A	49	MET
1	27-A	47	GLU
1	27-A	142	ASN
1	27-A	153	ASP
1	27-A	154	TYR
1	27-A	155	ASP
1	27-A	194	ALA
1	27-A	224	THR
1	27-A	302	GLY
1	28-A	47	GLU
1	28-A	142	ASN
1	28-A	153	ASP
1	28-A	154	TYR
1	28-A	155	ASP
1	28-A	196	THR
1	28-A	224	THR
1	28-A	229	ASP
1	28-A	299	GLN
1	28-A	300	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	301	SER
1	28-A	303	VAL
1	29-A	25	THR
1	29-A	46	SER
1	29-A	100	LYS
1	29-A	106	ILE
1	29-A	154	TYR
1	29-A	155	ASP
1	29-A	299	GLN
1	29-A	300	CYS
1	29-A	302	GLY
1	29-A	303	VAL
1	30-A	153	ASP
1	30-A	154	TYR
1	30-A	229	ASP
1	30-A	277	ASN
1	30-A	279	ARG
1	31-A	47	GLU
1	31-A	49	MET
1	31-A	51	ASN
1	31-A	70	ALA
1	31-A	73	VAL
1	31-A	78	ILE
1	31-A	274	ASN
1	31-A	276	MET
1	31-A	277	ASN
1	31-A	279	ARG
1	31-A	280	THR
1	31-A	301	SER
1	31-A	303	VAL
1	32-A	24	THR
1	32-A	25	THR
1	32-A	46	SER
1	32-A	49	MET
1	32-A	51	ASN
1	32-A	153	ASP
1	32-A	296	VAL
1	32-A	301	SER
1	32-A	304	THR
1	33-A	49	MET
1	33-A	50	LEU
1	33-A	155	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	223	PHE
1	33-A	275	GLY
1	33-A	276	MET
1	33-A	277	ASN
1	33-A	301	SER
1	34-A	46	SER
1	34-A	50	LEU
1	34-A	74	GLN
1	34-A	76	ARG
1	34-A	276	MET
1	34-A	277	ASN
1	34-A	299	GLN
1	34-A	305	PHE
1	35-A	73	VAL
1	35-A	74	GLN
1	35-A	153	ASP
1	35-A	223	PHE
1	35-A	276	MET
1	35-A	282	LEU
1	35-A	300	CYS
1	35-A	301	SER
1	35-A	303	VAL
1	36-A	45	THR
1	36-A	47	GLU
1	36-A	71	GLY
1	36-A	171	VAL
1	36-A	276	MET
1	36-A	277	ASN
1	36-A	303	VAL
1	1-A	75	LEU
1	2-A	49	MET
1	2-A	274	ASN
1	3-A	47	GLU
1	3-A	71	GLY
1	3-A	221	ASN
1	3-A	277	ASN
1	3-A	304	THR
1	4-A	47	GLU
1	4-A	221	ASN
1	4-A	301	SER
1	4-A	305	PHE
1	5-A	68	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	276	MET
1	6-A	191	ALA
1	6-A	192	GLN
1	6-A	275	GLY
1	7-A	74	GLN
1	8-A	59	ILE
1	8-A	218	TRP
1	8-A	300	CYS
1	9-A	154	TYR
1	9-A	300	CYS
1	10-A	106	ILE
1	10-A	153	ASP
1	10-A	272	LEU
1	10-A	277	ASN
1	10-A	278	GLY
1	10-A	299	GLN
1	11-A	45	THR
1	11-A	47	GLU
1	11-A	48	ASP
1	11-A	154	TYR
1	11-A	155	ASP
1	11-A	221	ASN
1	11-A	238	ASN
1	11-A	244	GLN
1	11-A	276	MET
1	12-A	71	GLY
1	12-A	274	ASN
1	13-A	46	SER
1	13-A	48	ASP
1	13-A	99	PRO
1	13-A	191	ALA
1	14-A	142	ASN
1	14-A	191	ALA
1	15-A	71	GLY
1	15-A	153	ASP
1	15-A	277	ASN
1	17-A	45	THR
1	17-A	157	VAL
1	17-A	190	THR
1	17-A	297	VAL
1	18-A	59	ILE
1	18-A	60	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	72	ASN
1	18-A	276	MET
1	19-A	23	GLY
1	19-A	72	ASN
1	19-A	142	ASN
1	19-A	151	ASN
1	19-A	195	GLY
1	20-A	47	GLU
1	20-A	93	THR
1	20-A	106	ILE
1	20-A	279	ARG
1	20-A	305	PHE
1	21-A	15	GLY
1	22-A	71	GLY
1	22-A	216	ASP
1	22-A	236	LYS
1	22-A	257	THR
1	22-A	276	MET
1	23-A	48	ASP
1	23-A	71	GLY
1	23-A	89	LEU
1	23-A	302	GLY
1	24-A	46	SER
1	24-A	63	ASN
1	24-A	178	GLU
1	24-A	274	ASN
1	24-A	303	VAL
1	25-A	3	PHE
1	25-A	25	THR
1	25-A	47	GLU
1	25-A	216	ASP
1	25-A	234	ALA
1	25-A	279	ARG
1	25-A	301	SER
1	26-A	15	GLY
1	26-A	154	TYR
1	26-A	283	GLY
1	27-A	49	MET
1	27-A	84	ASN
1	27-A	276	MET
1	27-A	278	GLY
1	27-A	303	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	304	THR
1	28-A	71	GLY
1	28-A	99	PRO
1	28-A	152	ILE
1	28-A	277	ASN
1	29-A	153	ASP
1	29-A	229	ASP
1	30-A	13	VAL
1	30-A	48	ASP
1	30-A	72	ASN
1	30-A	152	ILE
1	30-A	191	ALA
1	30-A	282	LEU
1	31-A	99	PRO
1	31-A	152	ILE
1	31-A	153	ASP
1	31-A	229	ASP
1	31-A	275	GLY
1	32-A	47	GLU
1	32-A	93	THR
1	33-A	23	GLY
1	33-A	46	SER
1	33-A	47	GLU
1	33-A	73	VAL
1	33-A	76	ARG
1	34-A	23	GLY
1	34-A	47	GLU
1	34-A	51	ASN
1	34-A	221	ASN
1	34-A	275	GLY
1	35-A	46	SER
1	35-A	80	HIS
1	35-A	191	ALA
1	35-A	277	ASN
1	36-A	15	GLY
1	36-A	51	ASN
1	36-A	72	ASN
1	36-A	275	GLY
1	1-A	25	THR
1	1-A	99	PRO
1	2-A	47	GLU
1	2-A	62	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	298	ARG
1	3-A	63	ASN
1	3-A	191	ALA
1	3-A	300	CYS
1	4-A	102	LYS
1	4-A	154	TYR
1	6-A	48	ASP
1	6-A	223	PHE
1	7-A	41	HIS
1	7-A	273	GLN
1	7-A	302	GLY
1	8-A	60	ARG
1	8-A	75	LEU
1	8-A	153	ASP
1	8-A	191	ALA
1	8-A	303	VAL
1	10-A	46	SER
1	11-A	297	VAL
1	14-A	244	GLN
1	14-A	301	SER
1	15-A	63	ASN
1	15-A	192	GLN
1	15-A	274	ASN
1	15-A	275	GLY
1	16-A	274	ASN
1	16-A	297	VAL
1	17-A	63	ASN
1	17-A	71	GLY
1	17-A	72	ASN
1	17-A	192	GLN
1	17-A	276	MET
1	17-A	279	ARG
1	18-A	46	SER
1	18-A	47	GLU
1	18-A	192	GLN
1	18-A	229	ASP
1	21-A	229	ASP
1	22-A	46	SER
1	22-A	195	GLY
1	22-A	275	GLY
1	22-A	278	GLY
1	22-A	303	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	45	THR
1	23-A	303	VAL
1	23-A	304	THR
1	25-A	99	PRO
1	25-A	193	ALA
1	25-A	194	ALA
1	25-A	229	ASP
1	25-A	232	LEU
1	25-A	304	THR
1	26-A	64	HIS
1	26-A	76	ARG
1	27-A	76	ARG
1	27-A	193	ALA
1	27-A	219	PHE
1	27-A	223	PHE
1	28-A	304	THR
1	29-A	47	GLU
1	29-A	119	ASN
1	29-A	301	SER
1	30-A	303	VAL
1	32-A	52	PRO
1	32-A	155	ASP
1	32-A	276	MET
1	32-A	279	ARG
1	34-A	195	GLY
1	34-A	300	CYS
1	35-A	71	GLY
1	36-A	23	GLY
1	36-A	63	ASN
1	36-A	305	PHE
1	1-A	84	ASN
1	1-A	279	ARG
1	2-A	223	PHE
1	3-A	279	ARG
1	4-A	62	SER
1	5-A	33	ASP
1	6-A	261	VAL
1	6-A	280	THR
1	7-A	219	PHE
1	9-A	299	GLN
1	9-A	304	THR
1	11-A	51	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	190	THR
1	11-A	218	TRP
1	14-A	48	ASP
1	14-A	274	ASN
1	15-A	303	VAL
1	16-A	276	MET
1	18-A	97	LYS
1	19-A	178	GLU
1	20-A	152	ILE
1	20-A	304	THR
1	21-A	278	GLY
1	21-A	303	VAL
1	25-A	284	SER
1	27-A	45	THR
1	29-A	99	PRO
1	30-A	46	SER
1	32-A	63	ASN
1	32-A	72	ASN
1	32-A	74	GLN
1	32-A	76	ARG
1	33-A	74	GLN
1	34-A	49	MET
1	35-A	76	ARG
1	36-A	154	TYR
1	1-A	23	GLY
1	1-A	154	TYR
1	1-A	193	ALA
1	5-A	48	ASP
1	5-A	69	GLN
1	6-A	274	ASN
1	6-A	282	LEU
1	7-A	61	LYS
1	7-A	299	GLN
1	9-A	221	ASN
1	10-A	47	GLU
1	12-A	49	MET
1	13-A	63	ASN
1	14-A	33	ASP
1	16-A	47	GLU
1	16-A	279	ARG
1	18-A	25	THR
1	19-A	192	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	52	PRO
1	21-A	154	TYR
1	22-A	41	HIS
1	24-A	78	ILE
1	25-A	51	ASN
1	26-A	51	ASN
1	26-A	71	GLY
1	26-A	284	SER
1	29-A	24	THR
1	29-A	277	ASN
1	30-A	99	PRO
1	31-A	75	LEU
1	31-A	278	GLY
1	33-A	5	LYS
1	33-A	51	ASN
1	33-A	237	TYR
1	33-A	304	THR
1	34-A	12	LYS
1	34-A	24	THR
1	36-A	301	SER
1	2-A	303	VAL
1	3-A	111	THR
1	6-A	298	ARG
1	8-A	192	GLN
1	9-A	152	ILE
1	12-A	45	THR
1	19-A	41	HIS
1	26-A	191	ALA
1	27-A	78	ILE
1	28-A	23	GLY
1	33-A	25	THR
1	36-A	14	GLU
1	36-A	41	HIS
1	25-A	52	PRO
1	25-A	302	GLY
1	32-A	152	ILE
1	34-A	59	ILE
1	9-A	95	ASN
1	10-A	52	PRO
1	18-A	73	VAL
1	21-A	96	PRO
1	22-A	95	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	71	GLY
1	36-A	73	VAL
1	1-A	71	GLY
1	3-A	106	ILE
1	10-A	275	GLY
1	14-A	184	PRO
1	18-A	23	GLY
1	18-A	52	PRO
1	19-A	303	VAL
1	21-A	51	ASN
1	26-A	302	GLY
1	32-A	303	VAL
1	34-A	303	VAL
1	17-A	152	ILE
1	34-A	13	VAL
1	9-A	99	PRO
1	23-A	15	GLY

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%)	219 (83%)	44 (17%)	2	0
1	2-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	3-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	4-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	5-A	263/263 (100%)	217 (82%)	46 (18%)	2	0
1	6-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	7-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	8-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	9-A	263/263 (100%)	222 (84%)	41 (16%)	2	0
1	10-A	263/263 (100%)	213 (81%)	50 (19%)	1	0
1	11-A	263/263 (100%)	212 (81%)	51 (19%)	1	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	12-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	0
1	13-A	263/263 (100%)	219 (83%)	44 (17%)	2	0
1	14-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	15-A	263/263 (100%)	213 (81%)	50 (19%)	1	0
1	16-A	263/263 (100%)	209 (80%)	54 (20%)	1	0
1	17-A	263/263 (100%)	212 (81%)	51 (19%)	1	0
1	18-A	263/263 (100%)	208 (79%)	55 (21%)	1	0
1	19-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	20-A	263/263 (100%)	211 (80%)	52 (20%)	1	0
1	21-A	263/263 (100%)	217 (82%)	46 (18%)	2	0
1	22-A	263/263 (100%)	220 (84%)	43 (16%)	2	0
1	23-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	24-A	263/263 (100%)	210 (80%)	53 (20%)	1	0
1	25-A	263/263 (100%)	214 (81%)	49 (19%)	1	0
1	26-A	263/263 (100%)	221 (84%)	42 (16%)	2	0
1	27-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	28-A	263/263 (100%)	215 (82%)	48 (18%)	1	0
1	29-A	263/263 (100%)	215 (82%)	48 (18%)	1	0
1	30-A	263/263 (100%)	226 (86%)	37 (14%)	3	0
1	31-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	32-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	33-A	263/263 (100%)	218 (83%)	45 (17%)	2	0
1	34-A	263/263 (100%)	224 (85%)	39 (15%)	3	0
1	35-A	263/263 (100%)	211 (80%)	52 (20%)	1	0
1	36-A	263/263 (100%)	211 (80%)	52 (20%)	1	0
All	All	9468/9468 (100%)	7824 (83%)	1644 (17%)	2	0

All (1644) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	26	THR
1	1-A	27	LEU
1	1-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	47	GLU
1	1-A	49	MET
1	1-A	61	LYS
1	1-A	68	VAL
1	1-A	74	GLN
1	1-A	80	HIS
1	1-A	84	ASN
1	1-A	86	VAL
1	1-A	93	THR
1	1-A	102	LYS
1	1-A	106	ILE
1	1-A	107	GLN
1	1-A	110	GLN
1	1-A	119	ASN
1	1-A	125	VAL
1	1-A	134	PHE
1	1-A	142	ASN
1	1-A	167	LEU
1	1-A	169	THR
1	1-A	171	VAL
1	1-A	188	ARG
1	1-A	198	THR
1	1-A	214	ASN
1	1-A	216	ASP
1	1-A	217	ARG
1	1-A	218	TRP
1	1-A	222	ARG
1	1-A	223	PHE
1	1-A	236	LYS
1	1-A	238	ASN
1	1-A	240	GLU
1	1-A	267	SER
1	1-A	270	GLU
1	1-A	272	LEU
1	1-A	279	ARG
1	1-A	294	PHE
1	1-A	298	ARG
1	1-A	299	GLN
1	1-A	301	SER
1	1-A	303	VAL
1	1-A	306	GLN
1	2-A	3	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	5	LYS
1	2-A	19	GLN
1	2-A	22	CYS
1	2-A	27	LEU
1	2-A	47	GLU
1	2-A	48	ASP
1	2-A	50	LEU
1	2-A	59	ILE
1	2-A	60	ARG
1	2-A	61	LYS
1	2-A	64	HIS
1	2-A	75	LEU
1	2-A	76	ARG
1	2-A	87	LEU
1	2-A	90	LYS
1	2-A	106	ILE
1	2-A	110	GLN
1	2-A	125	VAL
1	2-A	141	LEU
1	2-A	142	ASN
1	2-A	153	ASP
1	2-A	154	TYR
1	2-A	156	CYS
1	2-A	158	SER
1	2-A	165	MET
1	2-A	167	LEU
1	2-A	171	VAL
1	2-A	217	ARG
1	2-A	218	TRP
1	2-A	222	ARG
1	2-A	226	THR
1	2-A	242	LEU
1	2-A	245	ASP
1	2-A	249	ILE
1	2-A	262	LEU
1	2-A	272	LEU
1	2-A	277	ASN
1	2-A	297	VAL
1	2-A	298	ARG
1	2-A	300	CYS
1	2-A	303	VAL
1	3-A	6	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	20	VAL
1	3-A	24	THR
1	3-A	27	LEU
1	3-A	30	LEU
1	3-A	34	ASP
1	3-A	47	GLU
1	3-A	49	MET
1	3-A	51	ASN
1	3-A	55	GLU
1	3-A	64	HIS
1	3-A	67	LEU
1	3-A	76	ARG
1	3-A	86	VAL
1	3-A	90	LYS
1	3-A	100	LYS
1	3-A	102	LYS
1	3-A	106	ILE
1	3-A	110	GLN
1	3-A	141	LEU
1	3-A	142	ASN
1	3-A	153	ASP
1	3-A	154	TYR
1	3-A	165	MET
1	3-A	169	THR
1	3-A	171	VAL
1	3-A	177	LEU
1	3-A	178	GLU
1	3-A	184	PRO
1	3-A	196	THR
1	3-A	201	THR
1	3-A	218	TRP
1	3-A	224	THR
1	3-A	228	ASN
1	3-A	236	LYS
1	3-A	270	GLU
1	3-A	271	LEU
1	3-A	273	GLN
1	3-A	274	ASN
1	3-A	279	ARG
1	3-A	284	SER
1	3-A	287	LEU
1	3-A	298	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	300	CYS
1	3-A	304	THR
1	4-A	1	SER
1	4-A	6	MET
1	4-A	12	LYS
1	4-A	21	THR
1	4-A	24	THR
1	4-A	25	THR
1	4-A	27	LEU
1	4-A	38	CYS
1	4-A	47	GLU
1	4-A	49	MET
1	4-A	57	LEU
1	4-A	64	HIS
1	4-A	69	GLN
1	4-A	73	VAL
1	4-A	78	ILE
1	4-A	93	THR
1	4-A	100	LYS
1	4-A	101	TYR
1	4-A	110	GLN
1	4-A	121	SER
1	4-A	141	LEU
1	4-A	165	MET
1	4-A	167	LEU
1	4-A	176	ASP
1	4-A	188	ARG
1	4-A	216	ASP
1	4-A	220	LEU
1	4-A	223	PHE
1	4-A	226	THR
1	4-A	227	LEU
1	4-A	228	ASN
1	4-A	230	PHE
1	4-A	236	LYS
1	4-A	242	LEU
1	4-A	243	THR
1	4-A	244	GLN
1	4-A	249	ILE
1	4-A	262	LEU
1	4-A	272	LEU
1	4-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	279	ARG
1	4-A	280	THR
1	4-A	299	GLN
1	4-A	301	SER
1	4-A	305	PHE
1	5-A	6	MET
1	5-A	19	GLN
1	5-A	24	THR
1	5-A	27	LEU
1	5-A	35	VAL
1	5-A	50	LEU
1	5-A	60	ARG
1	5-A	67	LEU
1	5-A	72	ASN
1	5-A	77	VAL
1	5-A	81	SER
1	5-A	90	LYS
1	5-A	100	LYS
1	5-A	110	GLN
1	5-A	132	PRO
1	5-A	141	LEU
1	5-A	142	ASN
1	5-A	158	SER
1	5-A	167	LEU
1	5-A	169	THR
1	5-A	171	VAL
1	5-A	180	ASN
1	5-A	216	ASP
1	5-A	218	TRP
1	5-A	221	ASN
1	5-A	223	PHE
1	5-A	228	ASN
1	5-A	243	THR
1	5-A	244	GLN
1	5-A	249	ILE
1	5-A	254	SER
1	5-A	270	GLU
1	5-A	271	LEU
1	5-A	274	ASN
1	5-A	276	MET
1	5-A	277	ASN
1	5-A	279	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	280	THR
1	5-A	286	LEU
1	5-A	289	ASP
1	5-A	292	THR
1	5-A	294	PHE
1	5-A	297	VAL
1	5-A	303	VAL
1	5-A	304	THR
1	5-A	305	PHE
1	6-A	1	SER
1	6-A	21	THR
1	6-A	27	LEU
1	6-A	50	LEU
1	6-A	59	ILE
1	6-A	67	LEU
1	6-A	72	ASN
1	6-A	75	LEU
1	6-A	77	VAL
1	6-A	81	SER
1	6-A	86	VAL
1	6-A	87	LEU
1	6-A	91	VAL
1	6-A	93	THR
1	6-A	104	VAL
1	6-A	106	ILE
1	6-A	110	GLN
1	6-A	125	VAL
1	6-A	130	MET
1	6-A	153	ASP
1	6-A	154	TYR
1	6-A	155	ASP
1	6-A	157	VAL
1	6-A	188	ARG
1	6-A	189	GLN
1	6-A	217	ARG
1	6-A	218	TRP
1	6-A	227	LEU
1	6-A	228	ASN
1	6-A	235	MET
1	6-A	242	LEU
1	6-A	243	THR
1	6-A	245	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	257	THR
1	6-A	273	GLN
1	6-A	276	MET
1	6-A	277	ASN
1	6-A	279	ARG
1	6-A	280	THR
1	6-A	286	LEU
1	6-A	301	SER
1	6-A	303	VAL
1	7-A	1	SER
1	7-A	20	VAL
1	7-A	27	LEU
1	7-A	45	THR
1	7-A	47	GLU
1	7-A	48	ASP
1	7-A	55	GLU
1	7-A	56	ASP
1	7-A	59	ILE
1	7-A	61	LYS
1	7-A	75	LEU
1	7-A	76	ARG
1	7-A	77	VAL
1	7-A	90	LYS
1	7-A	97	LYS
1	7-A	106	ILE
1	7-A	110	GLN
1	7-A	130	MET
1	7-A	141	LEU
1	7-A	154	TYR
1	7-A	169	THR
1	7-A	188	ARG
1	7-A	189	GLN
1	7-A	196	THR
1	7-A	217	ARG
1	7-A	225	THR
1	7-A	227	LEU
1	7-A	233	VAL
1	7-A	238	ASN
1	7-A	240	GLU
1	7-A	244	GLN
1	7-A	249	ILE
1	7-A	270	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	276	MET
1	7-A	277	ASN
1	7-A	297	VAL
1	7-A	298	ARG
1	7-A	299	GLN
1	7-A	305	PHE
1	8-A	1	SER
1	8-A	24	THR
1	8-A	26	THR
1	8-A	27	LEU
1	8-A	45	THR
1	8-A	46	SER
1	8-A	48	ASP
1	8-A	50	LEU
1	8-A	60	ARG
1	8-A	62	SER
1	8-A	67	LEU
1	8-A	76	ARG
1	8-A	91	VAL
1	8-A	93	THR
1	8-A	98	THR
1	8-A	102	LYS
1	8-A	106	ILE
1	8-A	107	GLN
1	8-A	125	VAL
1	8-A	141	LEU
1	8-A	145	CYS
1	8-A	152	ILE
1	8-A	153	ASP
1	8-A	155	ASP
1	8-A	156	CYS
1	8-A	169	THR
1	8-A	189	GLN
1	8-A	192	GLN
1	8-A	217	ARG
1	8-A	218	TRP
1	8-A	223	PHE
1	8-A	226	THR
1	8-A	236	LYS
1	8-A	242	LEU
1	8-A	252	PRO
1	8-A	254	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	269	LYS
1	8-A	272	LEU
1	8-A	276	MET
1	8-A	288	GLU
1	8-A	297	VAL
1	8-A	298	ARG
1	8-A	299	GLN
1	8-A	304	THR
1	8-A	306	GLN
1	9-A	6	MET
1	9-A	27	LEU
1	9-A	47	GLU
1	9-A	49	MET
1	9-A	53	ASN
1	9-A	56	ASP
1	9-A	60	ARG
1	9-A	61	LYS
1	9-A	68	VAL
1	9-A	74	GLN
1	9-A	76	ARG
1	9-A	86	VAL
1	9-A	87	LEU
1	9-A	91	VAL
1	9-A	93	THR
1	9-A	106	ILE
1	9-A	137	LYS
1	9-A	144	SER
1	9-A	152	ILE
1	9-A	154	TYR
1	9-A	169	THR
1	9-A	186	VAL
1	9-A	192	GLN
1	9-A	217	ARG
1	9-A	222	ARG
1	9-A	223	PHE
1	9-A	228	ASN
1	9-A	232	LEU
1	9-A	235	MET
1	9-A	267	SER
1	9-A	273	GLN
1	9-A	274	ASN
1	9-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	277	ASN
1	9-A	279	ARG
1	9-A	280	THR
1	9-A	292	THR
1	9-A	299	GLN
1	9-A	304	THR
1	9-A	305	PHE
1	9-A	306	GLN
1	10-A	1	SER
1	10-A	12	LYS
1	10-A	19	GLN
1	10-A	24	THR
1	10-A	26	THR
1	10-A	27	LEU
1	10-A	33	ASP
1	10-A	47	GLU
1	10-A	53	ASN
1	10-A	58	LEU
1	10-A	60	ARG
1	10-A	67	LEU
1	10-A	72	ASN
1	10-A	73	VAL
1	10-A	74	GLN
1	10-A	76	ARG
1	10-A	77	VAL
1	10-A	78	ILE
1	10-A	93	THR
1	10-A	102	LYS
1	10-A	106	ILE
1	10-A	141	LEU
1	10-A	145	CYS
1	10-A	156	CYS
1	10-A	165	MET
1	10-A	176	ASP
1	10-A	188	ARG
1	10-A	192	GLN
1	10-A	196	THR
1	10-A	198	THR
1	10-A	217	ARG
1	10-A	218	TRP
1	10-A	220	LEU
1	10-A	221	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	223	PHE
1	10-A	227	LEU
1	10-A	242	LEU
1	10-A	244	GLN
1	10-A	245	ASP
1	10-A	249	ILE
1	10-A	256	GLN
1	10-A	273	GLN
1	10-A	274	ASN
1	10-A	276	MET
1	10-A	279	ARG
1	10-A	286	LEU
1	10-A	299	GLN
1	10-A	304	THR
1	10-A	305	PHE
1	10-A	306	GLN
1	11-A	6	MET
1	11-A	19	GLN
1	11-A	26	THR
1	11-A	27	LEU
1	11-A	45	THR
1	11-A	50	LEU
1	11-A	53	ASN
1	11-A	58	LEU
1	11-A	67	LEU
1	11-A	69	GLN
1	11-A	72	ASN
1	11-A	74	GLN
1	11-A	76	ARG
1	11-A	77	VAL
1	11-A	93	THR
1	11-A	95	ASN
1	11-A	98	THR
1	11-A	102	LYS
1	11-A	110	GLN
1	11-A	125	VAL
1	11-A	153	ASP
1	11-A	155	ASP
1	11-A	156	CYS
1	11-A	157	VAL
1	11-A	165	MET
1	11-A	171	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	178	GLU
1	11-A	186	VAL
1	11-A	188	ARG
1	11-A	189	GLN
1	11-A	192	GLN
1	11-A	217	ARG
1	11-A	220	LEU
1	11-A	221	ASN
1	11-A	223	PHE
1	11-A	225	THR
1	11-A	227	LEU
1	11-A	233	VAL
1	11-A	245	ASP
1	11-A	254	SER
1	11-A	256	GLN
1	11-A	257	THR
1	11-A	267	SER
1	11-A	269	LYS
1	11-A	272	LEU
1	11-A	274	ASN
1	11-A	277	ASN
1	11-A	280	THR
1	11-A	288	GLU
1	11-A	292	THR
1	11-A	297	VAL
1	12-A	27	LEU
1	12-A	45	THR
1	12-A	53	ASN
1	12-A	55	GLU
1	12-A	59	ILE
1	12-A	62	SER
1	12-A	67	LEU
1	12-A	68	VAL
1	12-A	69	GLN
1	12-A	74	GLN
1	12-A	75	LEU
1	12-A	77	VAL
1	12-A	80	HIS
1	12-A	86	VAL
1	12-A	90	LYS
1	12-A	100	LYS
1	12-A	106	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	137	LYS
1	12-A	155	ASP
1	12-A	156	CYS
1	12-A	165	MET
1	12-A	171	VAL
1	12-A	177	LEU
1	12-A	188	ARG
1	12-A	192	GLN
1	12-A	217	ARG
1	12-A	220	LEU
1	12-A	221	ASN
1	12-A	228	ASN
1	12-A	232	LEU
1	12-A	235	MET
1	12-A	242	LEU
1	12-A	256	GLN
1	12-A	262	LEU
1	12-A	269	LYS
1	12-A	272	LEU
1	12-A	273	GLN
1	12-A	274	ASN
1	12-A	284	SER
1	12-A	286	LEU
1	12-A	300	CYS
1	12-A	304	THR
1	12-A	306	GLN
1	13-A	1	SER
1	13-A	19	GLN
1	13-A	26	THR
1	13-A	27	LEU
1	13-A	41	HIS
1	13-A	45	THR
1	13-A	46	SER
1	13-A	49	MET
1	13-A	51	ASN
1	13-A	56	ASP
1	13-A	67	LEU
1	13-A	69	GLN
1	13-A	73	VAL
1	13-A	76	ARG
1	13-A	87	LEU
1	13-A	90	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	100	LYS
1	13-A	102	LYS
1	13-A	141	LEU
1	13-A	151	ASN
1	13-A	153	ASP
1	13-A	156	CYS
1	13-A	157	VAL
1	13-A	165	MET
1	13-A	178	GLU
1	13-A	180	ASN
1	13-A	189	GLN
1	13-A	216	ASP
1	13-A	217	ARG
1	13-A	218	TRP
1	13-A	220	LEU
1	13-A	222	ARG
1	13-A	223	PHE
1	13-A	235	MET
1	13-A	249	ILE
1	13-A	271	LEU
1	13-A	272	LEU
1	13-A	273	GLN
1	13-A	274	ASN
1	13-A	279	ARG
1	13-A	289	ASP
1	13-A	298	ARG
1	13-A	300	CYS
1	13-A	301	SER
1	14-A	45	THR
1	14-A	46	SER
1	14-A	55	GLU
1	14-A	68	VAL
1	14-A	69	GLN
1	14-A	74	GLN
1	14-A	87	LEU
1	14-A	90	LYS
1	14-A	97	LYS
1	14-A	102	LYS
1	14-A	104	VAL
1	14-A	106	ILE
1	14-A	107	GLN
1	14-A	125	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	141	LEU
1	14-A	144	SER
1	14-A	151	ASN
1	14-A	152	ILE
1	14-A	153	ASP
1	14-A	154	TYR
1	14-A	202	VAL
1	14-A	217	ARG
1	14-A	218	TRP
1	14-A	223	PHE
1	14-A	228	ASN
1	14-A	232	LEU
1	14-A	235	MET
1	14-A	241	PRO
1	14-A	242	LEU
1	14-A	245	ASP
1	14-A	273	GLN
1	14-A	274	ASN
1	14-A	276	MET
1	14-A	277	ASN
1	14-A	279	ARG
1	14-A	280	THR
1	14-A	292	THR
1	14-A	300	CYS
1	14-A	301	SER
1	15-A	1	SER
1	15-A	21	THR
1	15-A	26	THR
1	15-A	41	HIS
1	15-A	45	THR
1	15-A	48	ASP
1	15-A	49	MET
1	15-A	50	LEU
1	15-A	55	GLU
1	15-A	56	ASP
1	15-A	62	SER
1	15-A	68	VAL
1	15-A	69	GLN
1	15-A	72	ASN
1	15-A	74	GLN
1	15-A	75	LEU
1	15-A	76	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	90	LYS
1	15-A	93	THR
1	15-A	100	LYS
1	15-A	121	SER
1	15-A	137	LYS
1	15-A	145	CYS
1	15-A	152	ILE
1	15-A	153	ASP
1	15-A	154	TYR
1	15-A	157	VAL
1	15-A	165	MET
1	15-A	171	VAL
1	15-A	188	ARG
1	15-A	218	TRP
1	15-A	227	LEU
1	15-A	235	MET
1	15-A	236	LYS
1	15-A	242	LEU
1	15-A	243	THR
1	15-A	254	SER
1	15-A	256	GLN
1	15-A	272	LEU
1	15-A	274	ASN
1	15-A	276	MET
1	15-A	277	ASN
1	15-A	279	ARG
1	15-A	286	LEU
1	15-A	292	THR
1	15-A	294	PHE
1	15-A	298	ARG
1	15-A	299	GLN
1	15-A	303	VAL
1	15-A	306	GLN
1	16-A	19	GLN
1	16-A	21	THR
1	16-A	24	THR
1	16-A	26	THR
1	16-A	27	LEU
1	16-A	43	ILE
1	16-A	44	CYS
1	16-A	45	THR
1	16-A	48	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	49	MET
1	16-A	50	LEU
1	16-A	55	GLU
1	16-A	60	ARG
1	16-A	61	LYS
1	16-A	68	VAL
1	16-A	72	ASN
1	16-A	74	GLN
1	16-A	75	LEU
1	16-A	77	VAL
1	16-A	81	SER
1	16-A	86	VAL
1	16-A	97	LYS
1	16-A	100	LYS
1	16-A	102	LYS
1	16-A	106	ILE
1	16-A	128	CYS
1	16-A	136	ILE
1	16-A	137	LYS
1	16-A	141	LEU
1	16-A	142	ASN
1	16-A	151	ASN
1	16-A	154	TYR
1	16-A	188	ARG
1	16-A	214	ASN
1	16-A	217	ARG
1	16-A	218	TRP
1	16-A	222	ARG
1	16-A	227	LEU
1	16-A	228	ASN
1	16-A	232	LEU
1	16-A	267	SER
1	16-A	270	GLU
1	16-A	271	LEU
1	16-A	272	LEU
1	16-A	273	GLN
1	16-A	274	ASN
1	16-A	276	MET
1	16-A	280	THR
1	16-A	286	LEU
1	16-A	300	CYS
1	16-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	304	THR
1	16-A	305	PHE
1	16-A	306	GLN
1	17-A	1	SER
1	17-A	19	GLN
1	17-A	26	THR
1	17-A	27	LEU
1	17-A	34	ASP
1	17-A	46	SER
1	17-A	48	ASP
1	17-A	50	LEU
1	17-A	55	GLU
1	17-A	60	ARG
1	17-A	61	LYS
1	17-A	67	LEU
1	17-A	68	VAL
1	17-A	74	GLN
1	17-A	76	ARG
1	17-A	78	ILE
1	17-A	80	HIS
1	17-A	83	GLN
1	17-A	93	THR
1	17-A	100	LYS
1	17-A	102	LYS
1	17-A	106	ILE
1	17-A	151	ASN
1	17-A	152	ILE
1	17-A	154	TYR
1	17-A	156	CYS
1	17-A	165	MET
1	17-A	171	VAL
1	17-A	189	GLN
1	17-A	201	THR
1	17-A	216	ASP
1	17-A	217	ARG
1	17-A	222	ARG
1	17-A	226	THR
1	17-A	227	LEU
1	17-A	240	GLU
1	17-A	242	LEU
1	17-A	244	GLN
1	17-A	249	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	262	LEU
1	17-A	263	ASP
1	17-A	269	LYS
1	17-A	271	LEU
1	17-A	273	GLN
1	17-A	276	MET
1	17-A	279	ARG
1	17-A	289	ASP
1	17-A	292	THR
1	17-A	298	ARG
1	17-A	305	PHE
1	17-A	306	GLN
1	18-A	1	SER
1	18-A	6	MET
1	18-A	19	GLN
1	18-A	20	VAL
1	18-A	21	THR
1	18-A	24	THR
1	18-A	34	ASP
1	18-A	43	ILE
1	18-A	45	THR
1	18-A	47	GLU
1	18-A	48	ASP
1	18-A	49	MET
1	18-A	50	LEU
1	18-A	55	GLU
1	18-A	58	LEU
1	18-A	60	ARG
1	18-A	61	LYS
1	18-A	62	SER
1	18-A	74	GLN
1	18-A	75	LEU
1	18-A	76	ARG
1	18-A	77	VAL
1	18-A	78	ILE
1	18-A	83	GLN
1	18-A	104	VAL
1	18-A	106	ILE
1	18-A	125	VAL
1	18-A	152	ILE
1	18-A	153	ASP
1	18-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	156	CYS
1	18-A	158	SER
1	18-A	177	LEU
1	18-A	186	VAL
1	18-A	188	ARG
1	18-A	198	THR
1	18-A	216	ASP
1	18-A	217	ARG
1	18-A	222	ARG
1	18-A	232	LEU
1	18-A	235	MET
1	18-A	240	GLU
1	18-A	242	LEU
1	18-A	244	GLN
1	18-A	249	ILE
1	18-A	259	ILE
1	18-A	267	SER
1	18-A	269	LYS
1	18-A	270	GLU
1	18-A	276	MET
1	18-A	280	THR
1	18-A	294	PHE
1	18-A	301	SER
1	18-A	304	THR
1	18-A	306	GLN
1	19-A	21	THR
1	19-A	24	THR
1	19-A	26	THR
1	19-A	46	SER
1	19-A	47	GLU
1	19-A	49	MET
1	19-A	55	GLU
1	19-A	61	LYS
1	19-A	74	GLN
1	19-A	76	ARG
1	19-A	83	GLN
1	19-A	86	VAL
1	19-A	93	THR
1	19-A	100	LYS
1	19-A	110	GLN
1	19-A	142	ASN
1	19-A	145	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	152	ILE
1	19-A	154	TYR
1	19-A	156	CYS
1	19-A	165	MET
1	19-A	171	VAL
1	19-A	188	ARG
1	19-A	214	ASN
1	19-A	217	ARG
1	19-A	218	TRP
1	19-A	221	ASN
1	19-A	222	ARG
1	19-A	223	PHE
1	19-A	224	THR
1	19-A	225	THR
1	19-A	229	ASP
1	19-A	243	THR
1	19-A	264	MET
1	19-A	269	LYS
1	19-A	270	GLU
1	19-A	271	LEU
1	19-A	279	ARG
1	19-A	289	ASP
1	19-A	303	VAL
1	19-A	304	THR
1	19-A	306	GLN
1	20-A	6	MET
1	20-A	24	THR
1	20-A	27	LEU
1	20-A	44	CYS
1	20-A	45	THR
1	20-A	46	SER
1	20-A	47	GLU
1	20-A	49	MET
1	20-A	58	LEU
1	20-A	60	ARG
1	20-A	64	HIS
1	20-A	67	LEU
1	20-A	68	VAL
1	20-A	73	VAL
1	20-A	74	GLN
1	20-A	76	ARG
1	20-A	77	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	78	ILE
1	20-A	83	GLN
1	20-A	86	VAL
1	20-A	90	LYS
1	20-A	93	THR
1	20-A	102	LYS
1	20-A	106	ILE
1	20-A	123	SER
1	20-A	125	VAL
1	20-A	153	ASP
1	20-A	154	TYR
1	20-A	165	MET
1	20-A	167	LEU
1	20-A	177	LEU
1	20-A	188	ARG
1	20-A	196	THR
1	20-A	216	ASP
1	20-A	222	ARG
1	20-A	235	MET
1	20-A	238	ASN
1	20-A	244	GLN
1	20-A	249	ILE
1	20-A	254	SER
1	20-A	256	GLN
1	20-A	270	GLU
1	20-A	276	MET
1	20-A	277	ASN
1	20-A	279	ARG
1	20-A	282	LEU
1	20-A	287	LEU
1	20-A	288	GLU
1	20-A	298	ARG
1	20-A	301	SER
1	20-A	304	THR
1	20-A	306	GLN
1	21-A	1	SER
1	21-A	25	THR
1	21-A	27	LEU
1	21-A	49	MET
1	21-A	50	LEU
1	21-A	55	GLU
1	21-A	58	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	60	ARG
1	21-A	64	HIS
1	21-A	67	LEU
1	21-A	68	VAL
1	21-A	73	VAL
1	21-A	74	GLN
1	21-A	76	ARG
1	21-A	78	ILE
1	21-A	87	LEU
1	21-A	90	LYS
1	21-A	93	THR
1	21-A	98	THR
1	21-A	100	LYS
1	21-A	102	LYS
1	21-A	123	SER
1	21-A	128	CYS
1	21-A	157	VAL
1	21-A	165	MET
1	21-A	171	VAL
1	21-A	216	ASP
1	21-A	218	TRP
1	21-A	222	ARG
1	21-A	227	LEU
1	21-A	232	LEU
1	21-A	233	VAL
1	21-A	235	MET
1	21-A	244	GLN
1	21-A	245	ASP
1	21-A	249	ILE
1	21-A	271	LEU
1	21-A	273	GLN
1	21-A	274	ASN
1	21-A	276	MET
1	21-A	279	ARG
1	21-A	292	THR
1	21-A	298	ARG
1	21-A	301	SER
1	21-A	303	VAL
1	21-A	305	PHE
1	22-A	19	GLN
1	22-A	20	VAL
1	22-A	22	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	24	THR
1	22-A	25	THR
1	22-A	27	LEU
1	22-A	30	LEU
1	22-A	49	MET
1	22-A	50	LEU
1	22-A	60	ARG
1	22-A	62	SER
1	22-A	64	HIS
1	22-A	76	ARG
1	22-A	80	HIS
1	22-A	82	MET
1	22-A	97	LYS
1	22-A	105	ARG
1	22-A	106	ILE
1	22-A	125	VAL
1	22-A	153	ASP
1	22-A	154	TYR
1	22-A	157	VAL
1	22-A	165	MET
1	22-A	167	LEU
1	22-A	178	GLU
1	22-A	217	ARG
1	22-A	221	ASN
1	22-A	222	ARG
1	22-A	229	ASP
1	22-A	232	LEU
1	22-A	235	MET
1	22-A	244	GLN
1	22-A	254	SER
1	22-A	256	GLN
1	22-A	259	ILE
1	22-A	270	GLU
1	22-A	271	LEU
1	22-A	272	LEU
1	22-A	279	ARG
1	22-A	280	THR
1	22-A	298	ARG
1	22-A	303	VAL
1	22-A	305	PHE
1	23-A	6	MET
1	23-A	19	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	21	THR
1	23-A	22	CYS
1	23-A	25	THR
1	23-A	27	LEU
1	23-A	46	SER
1	23-A	47	GLU
1	23-A	48	ASP
1	23-A	49	MET
1	23-A	51	ASN
1	23-A	55	GLU
1	23-A	60	ARG
1	23-A	62	SER
1	23-A	90	LYS
1	23-A	155	ASP
1	23-A	165	MET
1	23-A	167	LEU
1	23-A	188	ARG
1	23-A	189	GLN
1	23-A	214	ASN
1	23-A	217	ARG
1	23-A	218	TRP
1	23-A	221	ASN
1	23-A	222	ARG
1	23-A	226	THR
1	23-A	232	LEU
1	23-A	235	MET
1	23-A	236	LYS
1	23-A	240	GLU
1	23-A	242	LEU
1	23-A	254	SER
1	23-A	257	THR
1	23-A	276	MET
1	23-A	279	ARG
1	23-A	280	THR
1	23-A	286	LEU
1	23-A	287	LEU
1	23-A	303	VAL
1	23-A	304	THR
1	24-A	27	LEU
1	24-A	30	LEU
1	24-A	35	VAL
1	24-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	46	SER
1	24-A	48	ASP
1	24-A	50	LEU
1	24-A	60	ARG
1	24-A	67	LEU
1	24-A	68	VAL
1	24-A	73	VAL
1	24-A	76	ARG
1	24-A	77	VAL
1	24-A	78	ILE
1	24-A	90	LYS
1	24-A	91	VAL
1	24-A	93	THR
1	24-A	97	LYS
1	24-A	98	THR
1	24-A	106	ILE
1	24-A	107	GLN
1	24-A	110	GLN
1	24-A	121	SER
1	24-A	136	ILE
1	24-A	145	CYS
1	24-A	152	ILE
1	24-A	153	ASP
1	24-A	154	TYR
1	24-A	158	SER
1	24-A	165	MET
1	24-A	171	VAL
1	24-A	192	GLN
1	24-A	201	THR
1	24-A	216	ASP
1	24-A	217	ARG
1	24-A	222	ARG
1	24-A	226	THR
1	24-A	228	ASN
1	24-A	229	ASP
1	24-A	232	LEU
1	24-A	249	ILE
1	24-A	262	LEU
1	24-A	267	SER
1	24-A	271	LEU
1	24-A	273	GLN
1	24-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	276	MET
1	24-A	279	ARG
1	24-A	286	LEU
1	24-A	292	THR
1	24-A	298	ARG
1	24-A	303	VAL
1	24-A	304	THR
1	25-A	1	SER
1	25-A	22	CYS
1	25-A	25	THR
1	25-A	27	LEU
1	25-A	30	LEU
1	25-A	34	ASP
1	25-A	45	THR
1	25-A	48	ASP
1	25-A	49	MET
1	25-A	50	LEU
1	25-A	55	GLU
1	25-A	56	ASP
1	25-A	61	LYS
1	25-A	67	LEU
1	25-A	69	GLN
1	25-A	72	ASN
1	25-A	74	GLN
1	25-A	87	LEU
1	25-A	90	LYS
1	25-A	97	LYS
1	25-A	100	LYS
1	25-A	102	LYS
1	25-A	123	SER
1	25-A	125	VAL
1	25-A	152	ILE
1	25-A	153	ASP
1	25-A	154	TYR
1	25-A	155	ASP
1	25-A	156	CYS
1	25-A	158	SER
1	25-A	165	MET
1	25-A	171	VAL
1	25-A	217	ARG
1	25-A	222	ARG
1	25-A	225	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	227	LEU
1	25-A	243	THR
1	25-A	244	GLN
1	25-A	256	GLN
1	25-A	270	GLU
1	25-A	271	LEU
1	25-A	274	ASN
1	25-A	286	LEU
1	25-A	292	THR
1	25-A	297	VAL
1	25-A	299	GLN
1	25-A	303	VAL
1	25-A	304	THR
1	25-A	306	GLN
1	26-A	6	MET
1	26-A	19	GLN
1	26-A	22	CYS
1	26-A	27	LEU
1	26-A	45	THR
1	26-A	47	GLU
1	26-A	49	MET
1	26-A	60	ARG
1	26-A	67	LEU
1	26-A	68	VAL
1	26-A	69	GLN
1	26-A	82	MET
1	26-A	90	LYS
1	26-A	92	ASP
1	26-A	93	THR
1	26-A	102	LYS
1	26-A	151	ASN
1	26-A	152	ILE
1	26-A	153	ASP
1	26-A	154	TYR
1	26-A	155	ASP
1	26-A	156	CYS
1	26-A	157	VAL
1	26-A	165	MET
1	26-A	167	LEU
1	26-A	217	ARG
1	26-A	227	LEU
1	26-A	228	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	232	LEU
1	26-A	235	MET
1	26-A	244	GLN
1	26-A	254	SER
1	26-A	262	LEU
1	26-A	267	SER
1	26-A	273	GLN
1	26-A	277	ASN
1	26-A	279	ARG
1	26-A	286	LEU
1	26-A	292	THR
1	26-A	298	ARG
1	26-A	303	VAL
1	26-A	305	PHE
1	27-A	21	THR
1	27-A	27	LEU
1	27-A	38	CYS
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET
1	27-A	50	LEU
1	27-A	55	GLU
1	27-A	61	LYS
1	27-A	69	GLN
1	27-A	72	ASN
1	27-A	73	VAL
1	27-A	77	VAL
1	27-A	78	ILE
1	27-A	90	LYS
1	27-A	91	VAL
1	27-A	97	LYS
1	27-A	106	ILE
1	27-A	142	ASN
1	27-A	154	TYR
1	27-A	165	MET
1	27-A	189	GLN
1	27-A	201	THR
1	27-A	216	ASP
1	27-A	217	ARG
1	27-A	223	PHE
1	27-A	227	LEU
1	27-A	228	ASN
1	27-A	232	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	242	LEU
1	27-A	244	GLN
1	27-A	249	ILE
1	27-A	256	GLN
1	27-A	257	THR
1	27-A	262	LEU
1	27-A	271	LEU
1	27-A	272	LEU
1	27-A	274	ASN
1	27-A	276	MET
1	27-A	279	ARG
1	27-A	286	LEU
1	27-A	298	ARG
1	27-A	300	CYS
1	27-A	301	SER
1	27-A	305	PHE
1	27-A	306	GLN
1	28-A	1	SER
1	28-A	19	GLN
1	28-A	26	THR
1	28-A	27	LEU
1	28-A	33	ASP
1	28-A	41	HIS
1	28-A	43	ILE
1	28-A	45	THR
1	28-A	46	SER
1	28-A	50	LEU
1	28-A	55	GLU
1	28-A	56	ASP
1	28-A	60	ARG
1	28-A	74	GLN
1	28-A	77	VAL
1	28-A	87	LEU
1	28-A	93	THR
1	28-A	102	LYS
1	28-A	106	ILE
1	28-A	107	GLN
1	28-A	125	VAL
1	28-A	136	ILE
1	28-A	137	LYS
1	28-A	142	ASN
1	28-A	153	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	156	CYS
1	28-A	157	VAL
1	28-A	171	VAL
1	28-A	223	PHE
1	28-A	226	THR
1	28-A	235	MET
1	28-A	242	LEU
1	28-A	245	ASP
1	28-A	249	ILE
1	28-A	256	GLN
1	28-A	270	GLU
1	28-A	271	LEU
1	28-A	272	LEU
1	28-A	276	MET
1	28-A	277	ASN
1	28-A	279	ARG
1	28-A	286	LEU
1	28-A	287	LEU
1	28-A	292	THR
1	28-A	298	ARG
1	28-A	299	GLN
1	28-A	305	PHE
1	28-A	306	GLN
1	29-A	19	GLN
1	29-A	24	THR
1	29-A	27	LEU
1	29-A	38	CYS
1	29-A	41	HIS
1	29-A	44	CYS
1	29-A	46	SER
1	29-A	48	ASP
1	29-A	50	LEU
1	29-A	61	LYS
1	29-A	67	LEU
1	29-A	68	VAL
1	29-A	73	VAL
1	29-A	74	GLN
1	29-A	77	VAL
1	29-A	87	LEU
1	29-A	90	LYS
1	29-A	102	LYS
1	29-A	107	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	121	SER
1	29-A	123	SER
1	29-A	141	LEU
1	29-A	152	ILE
1	29-A	154	TYR
1	29-A	155	ASP
1	29-A	157	VAL
1	29-A	169	THR
1	29-A	186	VAL
1	29-A	189	GLN
1	29-A	223	PHE
1	29-A	227	LEU
1	29-A	240	GLU
1	29-A	245	ASP
1	29-A	249	ILE
1	29-A	267	SER
1	29-A	270	GLU
1	29-A	271	LEU
1	29-A	272	LEU
1	29-A	273	GLN
1	29-A	276	MET
1	29-A	286	LEU
1	29-A	287	LEU
1	29-A	292	THR
1	29-A	298	ARG
1	29-A	301	SER
1	29-A	304	THR
1	29-A	305	PHE
1	29-A	306	GLN
1	30-A	1	SER
1	30-A	3	PHE
1	30-A	49	MET
1	30-A	61	LYS
1	30-A	68	VAL
1	30-A	69	GLN
1	30-A	80	HIS
1	30-A	83	GLN
1	30-A	86	VAL
1	30-A	93	THR
1	30-A	107	GLN
1	30-A	119	ASN
1	30-A	121	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	132	PRO
1	30-A	142	ASN
1	30-A	153	ASP
1	30-A	155	ASP
1	30-A	157	VAL
1	30-A	165	MET
1	30-A	167	LEU
1	30-A	176	ASP
1	30-A	178	GLU
1	30-A	189	GLN
1	30-A	221	ASN
1	30-A	222	ARG
1	30-A	227	LEU
1	30-A	232	LEU
1	30-A	233	VAL
1	30-A	235	MET
1	30-A	243	THR
1	30-A	270	GLU
1	30-A	271	LEU
1	30-A	273	GLN
1	30-A	276	MET
1	30-A	284	SER
1	30-A	286	LEU
1	30-A	305	PHE
1	31-A	6	MET
1	31-A	26	THR
1	31-A	35	VAL
1	31-A	45	THR
1	31-A	46	SER
1	31-A	48	ASP
1	31-A	49	MET
1	31-A	50	LEU
1	31-A	51	ASN
1	31-A	60	ARG
1	31-A	61	LYS
1	31-A	67	LEU
1	31-A	69	GLN
1	31-A	72	ASN
1	31-A	76	ARG
1	31-A	82	MET
1	31-A	102	LYS
1	31-A	106	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	167	LEU
1	31-A	171	VAL
1	31-A	178	GLU
1	31-A	192	GLN
1	31-A	216	ASP
1	31-A	217	ARG
1	31-A	221	ASN
1	31-A	222	ARG
1	31-A	223	PHE
1	31-A	232	LEU
1	31-A	242	LEU
1	31-A	245	ASP
1	31-A	270	GLU
1	31-A	271	LEU
1	31-A	274	ASN
1	31-A	279	ARG
1	31-A	286	LEU
1	31-A	287	LEU
1	31-A	292	THR
1	31-A	297	VAL
1	31-A	304	THR
1	31-A	306	GLN
1	32-A	21	THR
1	32-A	25	THR
1	32-A	26	THR
1	32-A	27	LEU
1	32-A	41	HIS
1	32-A	46	SER
1	32-A	47	GLU
1	32-A	48	ASP
1	32-A	49	MET
1	32-A	50	LEU
1	32-A	51	ASN
1	32-A	56	ASP
1	32-A	61	LYS
1	32-A	68	VAL
1	32-A	69	GLN
1	32-A	73	VAL
1	32-A	74	GLN
1	32-A	76	ARG
1	32-A	86	VAL
1	32-A	87	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	88	LYS
1	32-A	93	THR
1	32-A	102	LYS
1	32-A	154	TYR
1	32-A	155	ASP
1	32-A	167	LEU
1	32-A	169	THR
1	32-A	171	VAL
1	32-A	177	LEU
1	32-A	189	GLN
1	32-A	217	ARG
1	32-A	221	ASN
1	32-A	222	ARG
1	32-A	232	LEU
1	32-A	238	ASN
1	32-A	244	GLN
1	32-A	256	GLN
1	32-A	267	SER
1	32-A	273	GLN
1	32-A	274	ASN
1	32-A	286	LEU
1	32-A	287	LEU
1	32-A	292	THR
1	32-A	300	CYS
1	32-A	301	SER
1	33-A	3	PHE
1	33-A	5	LYS
1	33-A	18	VAL
1	33-A	26	THR
1	33-A	27	LEU
1	33-A	35	VAL
1	33-A	45	THR
1	33-A	50	LEU
1	33-A	55	GLU
1	33-A	61	LYS
1	33-A	68	VAL
1	33-A	69	GLN
1	33-A	72	ASN
1	33-A	73	VAL
1	33-A	93	THR
1	33-A	98	THR
1	33-A	102	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	106	ILE
1	33-A	107	GLN
1	33-A	110	GLN
1	33-A	125	VAL
1	33-A	141	LEU
1	33-A	155	ASP
1	33-A	156	CYS
1	33-A	165	MET
1	33-A	178	GLU
1	33-A	189	GLN
1	33-A	217	ARG
1	33-A	221	ASN
1	33-A	226	THR
1	33-A	232	LEU
1	33-A	235	MET
1	33-A	236	LYS
1	33-A	244	GLN
1	33-A	245	ASP
1	33-A	262	LEU
1	33-A	267	SER
1	33-A	273	GLN
1	33-A	279	ARG
1	33-A	287	LEU
1	33-A	292	THR
1	33-A	298	ARG
1	33-A	301	SER
1	33-A	304	THR
1	33-A	305	PHE
1	34-A	3	PHE
1	34-A	12	LYS
1	34-A	19	GLN
1	34-A	24	THR
1	34-A	25	THR
1	34-A	27	LEU
1	34-A	34	ASP
1	34-A	45	THR
1	34-A	47	GLU
1	34-A	50	LEU
1	34-A	55	GLU
1	34-A	58	LEU
1	34-A	67	LEU
1	34-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	76	ARG
1	34-A	81	SER
1	34-A	93	THR
1	34-A	97	LYS
1	34-A	104	VAL
1	34-A	106	ILE
1	34-A	157	VAL
1	34-A	167	LEU
1	34-A	216	ASP
1	34-A	221	ASN
1	34-A	222	ARG
1	34-A	236	LYS
1	34-A	245	ASP
1	34-A	256	GLN
1	34-A	271	LEU
1	34-A	272	LEU
1	34-A	273	GLN
1	34-A	276	MET
1	34-A	279	ARG
1	34-A	286	LEU
1	34-A	287	LEU
1	34-A	298	ARG
1	34-A	301	SER
1	34-A	304	THR
1	34-A	306	GLN
1	35-A	6	MET
1	35-A	12	LYS
1	35-A	24	THR
1	35-A	27	LEU
1	35-A	33	ASP
1	35-A	45	THR
1	35-A	48	ASP
1	35-A	61	LYS
1	35-A	67	LEU
1	35-A	72	ASN
1	35-A	73	VAL
1	35-A	74	GLN
1	35-A	78	ILE
1	35-A	88	LYS
1	35-A	91	VAL
1	35-A	100	LYS
1	35-A	104	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	106	ILE
1	35-A	141	LEU
1	35-A	153	ASP
1	35-A	155	ASP
1	35-A	157	VAL
1	35-A	165	MET
1	35-A	169	THR
1	35-A	171	VAL
1	35-A	189	GLN
1	35-A	196	THR
1	35-A	216	ASP
1	35-A	217	ARG
1	35-A	221	ASN
1	35-A	222	ARG
1	35-A	223	PHE
1	35-A	226	THR
1	35-A	227	LEU
1	35-A	233	VAL
1	35-A	236	LYS
1	35-A	242	LEU
1	35-A	244	GLN
1	35-A	252	PRO
1	35-A	267	SER
1	35-A	270	GLU
1	35-A	273	GLN
1	35-A	276	MET
1	35-A	277	ASN
1	35-A	282	LEU
1	35-A	284	SER
1	35-A	286	LEU
1	35-A	287	LEU
1	35-A	292	THR
1	35-A	304	THR
1	35-A	305	PHE
1	35-A	306	GLN
1	36-A	12	LYS
1	36-A	19	GLN
1	36-A	24	THR
1	36-A	27	LEU
1	36-A	34	ASP
1	36-A	44	CYS
1	36-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	47	GLU
1	36-A	48	ASP
1	36-A	50	LEU
1	36-A	51	ASN
1	36-A	55	GLU
1	36-A	56	ASP
1	36-A	58	LEU
1	36-A	60	ARG
1	36-A	61	LYS
1	36-A	67	LEU
1	36-A	68	VAL
1	36-A	82	MET
1	36-A	83	GLN
1	36-A	90	LYS
1	36-A	93	THR
1	36-A	100	LYS
1	36-A	102	LYS
1	36-A	121	SER
1	36-A	125	VAL
1	36-A	130	MET
1	36-A	136	ILE
1	36-A	137	LYS
1	36-A	141	LEU
1	36-A	153	ASP
1	36-A	154	TYR
1	36-A	156	CYS
1	36-A	158	SER
1	36-A	178	GLU
1	36-A	214	ASN
1	36-A	217	ARG
1	36-A	221	ASN
1	36-A	222	ARG
1	36-A	227	LEU
1	36-A	242	LEU
1	36-A	243	THR
1	36-A	245	ASP
1	36-A	249	ILE
1	36-A	256	GLN
1	36-A	271	LEU
1	36-A	273	GLN
1	36-A	276	MET
1	36-A	286	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	298	ARG
1	36-A	301	SER
1	36-A	306	GLN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (290) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	51	ASN
1	1-A	80	HIS
1	1-A	244	GLN
1	2-A	19	GLN
1	2-A	51	ASN
1	2-A	69	GLN
1	2-A	80	HIS
1	2-A	83	GLN
1	2-A	238	ASN
1	2-A	273	GLN
1	3-A	19	GLN
1	3-A	83	GLN
1	3-A	110	GLN
1	3-A	151	ASN
1	3-A	273	GLN
1	4-A	80	HIS
1	4-A	83	GLN
1	4-A	107	GLN
1	4-A	110	GLN
1	4-A	214	ASN
1	4-A	277	ASN
1	5-A	41	HIS
1	5-A	64	HIS
1	5-A	95	ASN
1	5-A	119	ASN
1	5-A	127	GLN
1	5-A	180	ASN
1	5-A	214	ASN
1	5-A	228	ASN
1	5-A	273	GLN
1	5-A	299	GLN
1	6-A	19	GLN
1	6-A	74	GLN
1	6-A	189	GLN
1	6-A	214	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	228	ASN
1	6-A	277	ASN
1	7-A	19	GLN
1	7-A	63	ASN
1	7-A	74	GLN
1	7-A	83	GLN
1	7-A	214	ASN
1	7-A	274	ASN
1	8-A	41	HIS
1	8-A	53	ASN
1	8-A	74	GLN
1	8-A	80	HIS
1	8-A	151	ASN
1	8-A	189	GLN
1	8-A	192	GLN
1	8-A	214	ASN
1	9-A	41	HIS
1	9-A	53	ASN
1	9-A	74	GLN
1	9-A	80	HIS
1	9-A	180	ASN
1	9-A	214	ASN
1	9-A	238	ASN
1	9-A	273	GLN
1	9-A	274	ASN
1	9-A	306	GLN
1	10-A	53	ASN
1	10-A	64	HIS
1	10-A	74	GLN
1	10-A	83	GLN
1	10-A	110	GLN
1	10-A	151	ASN
1	10-A	214	ASN
1	10-A	221	ASN
1	10-A	274	ASN
1	10-A	277	ASN
1	10-A	299	GLN
1	10-A	306	GLN
1	11-A	72	ASN
1	11-A	74	GLN
1	11-A	80	HIS
1	11-A	83	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	110	GLN
1	11-A	192	GLN
1	11-A	214	ASN
1	11-A	228	ASN
1	11-A	244	GLN
1	11-A	256	GLN
1	11-A	274	ASN
1	11-A	277	ASN
1	12-A	74	GLN
1	12-A	83	GLN
1	12-A	142	ASN
1	12-A	192	GLN
1	12-A	214	ASN
1	12-A	228	ASN
1	12-A	256	GLN
1	12-A	274	ASN
1	13-A	19	GLN
1	13-A	80	HIS
1	13-A	119	ASN
1	13-A	142	ASN
1	13-A	163	HIS
1	13-A	180	ASN
1	13-A	214	ASN
1	13-A	221	ASN
1	13-A	273	GLN
1	13-A	274	ASN
1	14-A	41	HIS
1	14-A	69	GLN
1	14-A	80	HIS
1	14-A	83	GLN
1	14-A	84	ASN
1	14-A	107	GLN
1	14-A	151	ASN
1	14-A	180	ASN
1	14-A	214	ASN
1	14-A	221	ASN
1	14-A	238	ASN
1	15-A	107	GLN
1	15-A	151	ASN
1	15-A	180	ASN
1	15-A	214	ASN
1	15-A	238	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	244	GLN
1	15-A	256	GLN
1	15-A	277	ASN
1	16-A	19	GLN
1	16-A	64	HIS
1	16-A	65	ASN
1	16-A	74	GLN
1	16-A	180	ASN
1	16-A	189	GLN
1	16-A	221	ASN
1	16-A	273	GLN
1	17-A	65	ASN
1	17-A	74	GLN
1	17-A	80	HIS
1	17-A	151	ASN
1	17-A	189	GLN
1	17-A	214	ASN
1	17-A	256	GLN
1	18-A	74	GLN
1	18-A	142	ASN
1	18-A	214	ASN
1	19-A	41	HIS
1	19-A	65	ASN
1	19-A	142	ASN
1	19-A	238	ASN
1	20-A	19	GLN
1	20-A	41	HIS
1	20-A	65	ASN
1	20-A	69	GLN
1	20-A	74	GLN
1	20-A	142	ASN
1	20-A	238	ASN
1	20-A	244	GLN
1	21-A	74	GLN
1	21-A	83	GLN
1	21-A	151	ASN
1	21-A	180	ASN
1	21-A	214	ASN
1	21-A	221	ASN
1	21-A	274	ASN
1	22-A	65	ASN
1	22-A	80	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	214	ASN
1	22-A	228	ASN
1	22-A	238	ASN
1	22-A	273	GLN
1	23-A	41	HIS
1	23-A	65	ASN
1	23-A	80	HIS
1	23-A	83	GLN
1	23-A	107	GLN
1	23-A	151	ASN
1	23-A	189	GLN
1	23-A	214	ASN
1	23-A	238	ASN
1	23-A	256	GLN
1	24-A	64	HIS
1	24-A	65	ASN
1	24-A	80	HIS
1	24-A	83	GLN
1	24-A	84	ASN
1	24-A	180	ASN
1	24-A	189	GLN
1	24-A	214	ASN
1	24-A	221	ASN
1	24-A	274	ASN
1	25-A	41	HIS
1	25-A	64	HIS
1	25-A	65	ASN
1	25-A	69	GLN
1	25-A	72	ASN
1	25-A	74	GLN
1	25-A	80	HIS
1	25-A	214	ASN
1	25-A	274	ASN
1	25-A	299	GLN
1	26-A	41	HIS
1	26-A	65	ASN
1	26-A	83	GLN
1	26-A	84	ASN
1	26-A	151	ASN
1	26-A	189	GLN
1	26-A	214	ASN
1	26-A	228	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	238	ASN
1	26-A	277	ASN
1	26-A	299	GLN
1	26-A	306	GLN
1	27-A	41	HIS
1	27-A	63	ASN
1	27-A	65	ASN
1	27-A	72	ASN
1	27-A	84	ASN
1	27-A	119	ASN
1	27-A	142	ASN
1	27-A	180	ASN
1	27-A	189	GLN
1	27-A	214	ASN
1	27-A	274	ASN
1	27-A	299	GLN
1	27-A	306	GLN
1	28-A	65	ASN
1	28-A	74	GLN
1	28-A	83	GLN
1	28-A	107	GLN
1	28-A	142	ASN
1	28-A	214	ASN
1	28-A	221	ASN
1	28-A	299	GLN
1	29-A	65	ASN
1	29-A	151	ASN
1	29-A	214	ASN
1	29-A	221	ASN
1	29-A	228	ASN
1	29-A	277	ASN
1	29-A	299	GLN
1	29-A	306	GLN
1	30-A	65	ASN
1	30-A	69	GLN
1	30-A	80	HIS
1	30-A	83	GLN
1	30-A	214	ASN
1	30-A	221	ASN
1	30-A	244	GLN
1	30-A	299	GLN
1	31-A	51	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	65	ASN
1	31-A	189	GLN
1	31-A	214	ASN
1	31-A	238	ASN
1	31-A	256	GLN
1	31-A	299	GLN
1	31-A	306	GLN
1	32-A	51	ASN
1	32-A	74	GLN
1	32-A	83	GLN
1	32-A	214	ASN
1	32-A	221	ASN
1	32-A	256	GLN
1	32-A	273	GLN
1	32-A	277	ASN
1	32-A	299	GLN
1	33-A	19	GLN
1	33-A	41	HIS
1	33-A	65	ASN
1	33-A	83	GLN
1	33-A	189	GLN
1	33-A	214	ASN
1	33-A	221	ASN
1	33-A	273	GLN
1	33-A	299	GLN
1	34-A	65	ASN
1	34-A	72	ASN
1	34-A	74	GLN
1	34-A	84	ASN
1	34-A	214	ASN
1	34-A	244	GLN
1	35-A	19	GLN
1	35-A	51	ASN
1	35-A	64	HIS
1	35-A	65	ASN
1	35-A	69	GLN
1	35-A	72	ASN
1	35-A	83	GLN
1	35-A	238	ASN
1	35-A	244	GLN
1	35-A	299	GLN
1	36-A	65	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	72	ASN
1	36-A	84	ASN
1	36-A	299	GLN

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 108 ligands modelled in this entry, 36 are monoatomic - leaving 72 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	DMS	2-A	502	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.55	0
2	DMS	1-A	501	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	2.23	2 (66%)
2	DMS	2-A	501	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.24	0
2	DMS	1-A	502	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	3-A	501	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	0.46	0

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	1-A	501	DMS	C2-S-C1	2.69	112.28	98.44
2	1-A	501	DMS	O-S-C1	2.06	117.06	106.54

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	4-A	1
1	22-A	1
1	10-A	1
1	15-A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
4	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.17
22	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.15
10	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.13
15	A	106:ILE	C	107:GLN	N	1.11

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.